



Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

und

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

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2019“**

**Teil 2**  
**Durchführung und Ergebnisse**  
**der Untersuchung zweier Weißweine**  
**FT19P02 und FT19P03**

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

Stand: 25.02.2020



**Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>7</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT19P02 und FT19P03	9
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	12
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT19P02 und FT19P03</b>	<b>13</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	17
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT19P02</b>	<b>21</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	21
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	21
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	22
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse	23
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	23
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	25
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	25
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	26
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse	27
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	28
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	30
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	30
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	30
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse	31
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	32
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	33
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	33
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	34
4.4.3	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	35
4.4.4	Deskriptive Ergebnisse	36
4.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	37
4.5	Glucose [g/L]	39
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	39
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	39
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse	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	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	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	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	55
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse	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	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	64
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	64
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	66
4.12.1	Herkömmliche und Laborergebnisse	66
4.12.2	Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	66
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	66
4.12.4	Deskriptive Ergebnisse	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	70
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse	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	74
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse	75
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	75
4.15	Reduktone [mg/L]	78
4.15.1	Laborergebnisse	78
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	78
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	78
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	80
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	80
4.16.2	Laborergebnisse, jodometrisch	80
4.16.3	Deskriptive Ergebnisse	81
4.16.4	Angaben zu den Analyseverfahren	82

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	84
4.17.1	Laborergebnisse	84
4.17.2	Deskriptive Ergebnisse	85
4.17.3	Angaben zu den Analyseverfahren	86
<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P03</b>	<b>88</b>
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	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	94
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	95
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	97
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	97
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	97
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse	98
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	99
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	100
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	100
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	101
5.4.3	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	102
5.4.4	Deskriptive Ergebnisse	103
5.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	104
5.5	Glucose [g/L]	106
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	106
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	106
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse	108
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	108
5.6	Fructose [g/L]	110
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	110
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	110
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse	112
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	112
5.7	Glycerin [g/L]	114
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	114
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse	114
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	114
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	115
5.8	pH-Wert	117
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	117
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	117
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	118
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse	119
5.9	Gesamtsäure [g/L]	121
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	121
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	122
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse	123
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	123

5.10	Weinsäure [g/L]	125
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	125
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	125
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse	127
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	127
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	129
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	129
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	129
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse	131
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	131
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	133
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	133
5.12.2	Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	133
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	133
5.12.4	Deskriptive Ergebnisse	134
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	136
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	136
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	136
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	137
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse	138
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	138
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	140
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	140
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	140
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	141
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse	142
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	142
5.15	Reduktone [mg/L]	144
5.15.1	Laborergebnisse	144
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	144
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	144
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	146
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	146
5.16.2	Laborergebnisse jodometrisch	146
5.16.3	Deskriptive Ergebnisse	147
5.16.4	Angaben zu den Analyseverfahren	148
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	149
5.17.1	Laborergebnisse	149
5.17.2	Deskriptive Ergebnisse	150
5.17.3	Angaben zu den Analyseverfahren	151

## **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 teilnehmenden 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. Zugleich konnten die beteiligten Laboratorien die Qualität ihrer FTIR-Messergebnisse überprüfen.

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

Teil 1 des Berichtes behandelt neben Aspekten, die für die gesamte Laborvergleichsuntersuchung von Bedeutung sind, die Ergebnisse für das Prüfgut FT19P01. Der vorliegende Teil 2 dokumentiert die Ergebnisse der Untersuchung der Prüfgüter FT19P02 und FT19P03. Teil 3 berichtet die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT19P04a, FT19P04b und FT19P05. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 des Berichtes besprochen wurden. Daher wird gegebenenfalls auf Teil 1 verwiesen.

## **2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung**

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT19P02 bzw. FT19P03 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfgüter durch die teilnehmenden Laboratorien behandelt.

### **2.1 Untersuchungsmaterial**

#### **2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes**

Das Prüfgut FT19P02 war ein 2017er Chenin Blanc aus Südafrika, der als Vertreter ausländischer Weine aus gewerblicher Herstellung stammte und nach Stürzen der ursprünglichen Abfüllung in 0,75 L-Flaschen unverändert in 0,33 L-Flaschen umgefüllt wurde. Weitere Angaben siehe Teil 1, Abschnitt 2.1.2 des Berichtes über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Als Prüfgut FT19P03 wurde ein 2018er rheinhessischer Weißburgunder mit erhöhtem Gehalt an flüchtiger Säure als Grundwein verwendet, der mit Süßreserve auf etwa 30 g/L Restzucker eingestellt wurde. Analytische Werte aus Voranalysen finden sich in Teil 1, Abschnitt 2.1.2 des Berichtes über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde mit beiden Proben durchgeführt.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P02

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorh. Alkohol g/L	Gesamt-extrakt g/L	Vergärb. Zucker g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	pH-Wert	Gesamtsäure g/L	Reduktone mg/L	Freie Schwefl. Säure mg/L	Gesamte Schwefl. Säure mg/L
1	9	0,99166	102,31	22,2	3,23	0,91	2,30	3,25	5,50	5,2	19,8	102,6
2	7	0,99157	102,08	21,8	3,07	0,85	2,20	3,27	5,52	5,2	20,3	104,0
3	3	0,99162	102,63	22,2	3,24	0,97	2,30	3,27	5,50	5,2	20,3	103,3
4	10	0,99160	101,92	21,9	2,82	0,79	2,00	3,27	5,48	5,1	19,8	102,6
5	6	0,99161	102,00	21,9	2,92	0,83	2,10	3,27	5,49	5,1	19,8	103,4
6	14	0,99160	102,31	22,0	2,89	0,79	2,10	3,27	5,47	5,2	20,3	103,3
7	1	0,99166	102,16	22,1	3,03	0,86	2,20	3,27	5,51	4,7	19,8	103,4
8	13	0,99162	102,31	22,1	3,13	0,87	2,30	3,27	5,52	4,7	20,3	106,0
9	2	0,99161	102,55	22,1	2,87	0,80	2,10	3,27	5,49	5,2	19,8	102,6
10	8	0,99161	102,94	22,3	2,73	0,76	2,00	3,27	5,50	5,2	19,8	102,6
11	5	0,99160	102,16	22,0	2,90	0,80	2,10	3,27	5,51	5,2	19,8	104,2
12	12	0,99158	102,00	21,9	2,89	0,81	2,10	3,27	5,46	5,1	20,3	103,3
13	10	0,99155	101,92	21,7	2,87	0,82	2,10	3,24	5,46	5,2	20,3	102,5
14	6	0,99154	102,47	21,9	2,71	0,72	2,00	3,26	5,47	5,2	20,3	102,5
15	14	0,99154	102,00	21,7	2,84	0,80	2,00	3,27	5,47	4,7	20,3	103,3
16	12	0,99152	101,92	21,7	2,88	0,82	2,10	3,27	5,46	4,7	20,8	103,1
17	7	0,99155	102,87	22,1	2,76	0,76	2,00	3,27	5,46	5,2	20,8	102,3
18	9	0,99154	102,23	21,8	2,76	0,77	2,00	3,27	5,43	5,2	20,3	103,3
19	2	0,99153	101,92	21,7	2,90	0,81	2,10	3,27	5,39	5,2	20,3	102,5
20	1	0,99156	101,84	21,7	2,89	0,79	2,10	3,27	5,45	4,7	20,8	103,1
21	8	0,99155	102,47	22,0	2,87	0,80	2,10	3,27	5,48	4,7	20,8	103,1
22	3	0,99155	102,23	21,9	2,85	0,79	2,10	3,27	5,46	5,1	20,8	103,9
23	5	0,99155	102,08	21,8	2,86	0,80	2,10	3,27	5,46	4,7	20,3	103,3
24	13	0,99154	102,00	21,7	2,85	0,80	2,00	3,27	5,45	5,2	20,3	102,5



### 2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT19P02 und FT19P03

Vom Prüfgut **FT19P02** wurden 234 Flaschen zu je 0,33 L gefüllt. Während der Füllung wurde jede 17. Flasche, insgesamt 14 Flaschen als Basis für die Homogenitätsprüfung entnommen und aufsteigend nummeriert. Mittels Zufallsgenerator wurden daraus 12 Flaschen für die Homogenitätsprüfung ausgewählt. Aus jeder Probe wurden 4 Serien von Messproben erstellt, die jeweils zweimal unter Wiederholbedingungen untersucht wurden. Für die Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. An den Proben der ersten Doppelserie wurden die Relative Dichte mit dem Biegeschwinger und der Vorhandene Alkohol mittels Nahinfrarotspektroskopie bestimmt und der Gesamtextrakt berechnet. An der zweiten Doppelserie wurden mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie Glucose und Fructose bestimmt sowie der Gehalt an Vergärbarem Zucker berechnet. Eine weitere Doppelserie diente der Bestimmung des pH-Wertes und der Gesamtsäure und die vierte Doppelserie der jodometrischen Bestimmung der Reduktone, der Freien und der Gesamten Schweflige Säure mit elektrometrischer Endpunktbestimmung an einem automatisierten Titrator. Die Messergebnisse sind in Tabelle 1 enthalten.

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT19P02** wurden wie in Teil 1 beschrieben graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen und auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge bzw. Probenfolge geprüft. Die Messergebnisse zeigten sowohl einzelne, graphisch auffällige Werte als auch unterschiedlich signifikante Korrelationen zur Mess- oder Füllreihenfolge. Diese werden häufig beobachtet und sind bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden Varianzanalyse zu berücksichtigen, sofern sie geeignet sind, deren Aussagekraft zu beeinträchtigen oder die Ergebnisse der Varianzanalyse eine Inhomogenität des Prüfgutes aufzeigen.

**Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P02**

	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, densitometr..	0,991578	24	0,1951	0,9946	0,000051		0,000132	0,389		0,000071
Vorh. Alkohol NIR	102,22	24	1,2882	0,3341	0,284	0,108	0,535	0,531	0,202	0,3397
Gesamtextrakt, berechnet	21,93	24	0,4383	0,9087	0,216		0,594	0,364		0,3112
Vergärbare Zucker HPLC	2,91	24	0,4359	0,9101	0,163		0,121	1,344		0,1588
Glucose HPLC	0,813	24	0,4666	0,8914	0,059		0,065	0,916		0,0609
Fructose HPLC	2,10	24	0,3842	0,9381	0,114		0,100	1,140		0,1127
pH-Wert, potentiometrisch	3,27	24	0,8571	0,5973	0,008		0,0476	0,161		0,0204
Gesamtsäure, acidimetr.	5,47	24	0,3138	0,9678	0,037		0,107	0,343		0,0548
Reduktone, jodometr.	5,04	24	1,0290	0,4776	0,223	0,027	0,632	0,352	0,042	0,3269
Freie SO <sub>2</sub> , jodometr.	20,26	24	0,5227	0,8538	0,408		2,061	0,198		0,9093
Gesamte SO <sub>2</sub> , jodometr.	103,20	24	0,6475	0,7602	0,866		5,357	0,162		2,2943

N = Anzahl der Messwerte, F = Prüfgröße des F-Testes, p = Irrtumswahrscheinlichkeit der Varianzanalyse

Die Varianzanalyse zeigte keine signifikanten Unterschiede zwischen den Proben. Damit ist die Homogenität nachgewiesen, sofern der Quotient  $s_r/s_z$  aus der Wiederholstandardabweichung (Fehler  $s_r$ ) und der Zielstandardabweichung ( $s_z$ ) unter dem einzuhaltenden Wert von 0,5 liegt. Eine Überschreitung dieses Höchstwertes ist für die Parameter Glucose und Fructose sowie für deren Summenwert Vergärbare Zucker gegeben. Die Untersuchungsergebnisse für diese Parameter tragen damit nicht zur Entscheidung über die Homogenität des Prüfgutes bei, ohne

jedoch einer Homogenität zu widersprechen. Die Werte des bei einer nachgewiesenen Inhomogenität zu beachtenden Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  sowie die Forderung, dass die Standardabweichung der Proben  $s_{Pr}$  unterhalb des nach Fearn und Thompson ermittelten maximal tolerierbaren Wertes (s. letzte Spalte der Tabelle 2) liegen muss, sind für die Entscheidung über eine ausreichende Homogenität des Prüfgutes FT19P02 ohne Bedeutung. Es darf von einer für die Laborvergleichsuntersuchung ausreichenden Homogenität des Prüfgutes ausgegangen werden.

Von dem Prüfgut **FT19P03** wurden insgesamt 358 Flaschen zu je 0,33 L gefüllt. Die Ziehung von 22 Proben während der Füllung erfolgte wie bei dem Prüfgut FT19P02. Für die Homogenitäts-Analysen wurde mit einem Zufallsgenerator eine zufällige Reihenfolge der Proben erstellt und in zwei Serien, die erste mit 12 und die zweite mit 10 Proben eingesetzt. Die erste Serie wurde zur Bestimmung der Relativen Dichte 20 °C/20 °C durch elektronische Densitometrie (Biegeschwinger) und des Vorhandenen Alkohols mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIR) sowie zur Ermittlung von Relativer Dichte, Vorhandenem Alkohol, Gesamtsäure, pH-Wert, Glucose, Fructose, Vergärbarem Zucker, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtigter Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) verwendet. Ferner wurden automatisiert enzymatisch Glucose, Fructose und als Summe Vergärbare Zucker bestimmt. Die zweite Serie der Proben diente der automatisierten jodometrischen Bestimmung von Freier, Gebundener und Gesamter Schwefliger Säure. Die Messungen wurden unter Wiederholbedingungen durchgeführt, wobei die ersten Messungen in der Reihenfolge der Ziehung der Proben erfolgten, während für die Wiederholung eine eigene Zufallsfolge erstellt wurde. Die Messergebnisse der Homogenitätsprüfung sind in der Tabelle 3 bis Tabelle 5 zusammengestellt.

**Tabelle 3: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P03**

Erste Probenserie Teil 1: Maßeinheit (außer Relative Dichte): g/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Rel. Dichte		Vorh. Alkohol		Glucose		Fructose		verg. Zucker	
		dens.	FTIR	NIR	FTIR	enz.	FTIR	enz.	FTIR	enz.	FTIR
1	18	1,00510	1,00530	84,63	86,27	13,160	14,732	16,410	15,052	29,6	30,123
2	23	1,00514	1,00535	84,63	86,08	12,910	14,770	16,420	14,950	29,3	30,119
3	20	1,00506	1,00536	84,55	85,91	12,760	14,778	16,550	15,187	29,3	30,231
4	3	1,00497	1,00530	84,55	85,96	12,720	14,636	16,130	15,153	28,9	30,049
5	2	1,00496	1,00529	84,55	85,74	12,690	14,582	15,660	15,069	28,4	30,190
6	15	1,00499	1,00528	84,55	85,98	12,940	14,742	16,580	15,086	29,5	30,294
7	7	1,00508	1,00536	84,63	85,91	12,860	14,725	16,390	15,170	29,3	30,154
8	4	1,00510	1,00530	84,63	85,77	12,710	14,679	16,120	15,136	28,8	30,100
9	14	1,00516	1,00531	84,63	85,91	12,660	14,582	16,250	15,148	28,9	30,190
10	10	1,00513	1,00528	84,63	85,83	12,740	14,952	16,560	15,266	29,3	30,225
11	12	1,00518	1,00525	84,63	85,35	12,640	14,648	16,480	15,020	29,1	29,984
12	13	1,00513	1,00531	84,55	85,77	12,670	14,893	15,990	14,941	28,7	30,023
13	15	1,00506	1,00531	84,55	85,96	13,100	14,729	15,940	15,079	29,0	30,360
14	3	1,00515	1,00533	84,55	85,91	12,860	14,673	16,450	15,123	29,3	30,171
15	7	1,00526	1,00530	84,55	86,12	12,350	14,518	16,220	14,978	28,6	29,788
16	10	1,00512	1,00533	84,55	85,64	13,110	14,573	16,440	15,273	29,6	30,186
17	18	1,00509	1,00532	84,55	85,82	13,010	14,658	16,070	15,132	29,1	30,299
18	12	1,00513	1,00537	84,55	85,76	13,050	14,925	16,560	15,048	29,6	30,245
19	13	1,00515	1,00537	84,47	85,84	12,810	14,607	16,170	15,203	29,0	30,151
20	14	1,00503	1,00534	84,39	85,55	12,520	14,668	16,590	15,102	29,1	30,096
21	20	1,00504	1,00531	84,39	85,83	12,380	14,785	16,280	15,074	28,7	30,251
22	2	1,00502	1,00534	84,55	85,81	13,100	14,858	16,220	15,038	29,3	30,097
23	4	1,00502	1,00527	84,63	85,46	12,890	14,897	16,430	15,117	29,3	30,168
24	23	1,00503	1,00533	84,55	85,83	12,560	14,468	16,530	15,211	29,1	30,123

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P03**

Erste Probenserie, Teil 2: Maßeinheit (außer pH-Wert): g/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	pH-Wert	Gesamt- säure	Weinsäure	Äpfelsäure	Milchsäure	Flüchtige Säure
		FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR
1	18	3,406	5,100	1,755	1,550	1,478	0,728
2	23	3,393	5,075	1,786	1,519	1,446	0,737
3	20	3,402	5,076	1,747	1,525	1,450	0,718
4	3	3,393	5,102	1,718	1,572	1,356	0,720
5	2	3,390	5,087	1,780	1,455	1,374	0,709
6	15	3,395	5,095	1,789	1,471	1,330	0,718
7	7	3,398	5,086	1,740	1,528	1,412	0,723
8	4	3,385	5,077	1,780	1,472	1,453	0,732
9	14	3,387	5,062	1,765	1,516	1,350	0,713
10	10	3,399	5,089	1,733	1,456	1,364	0,741
11	12	3,384	5,064	1,775	1,408	1,427	0,739
12	13	3,395	5,056	1,774	1,471	1,465	0,744
13	15	3,396	5,118	1,797	1,512	1,376	0,709
14	3	3,393	5,101	1,771	1,486	1,364	0,710
15	7	3,395	5,087	1,726	1,513	1,411	0,707
16	10	3,384	5,080	1,743	1,433	1,439	0,722
17	18	3,402	5,101	1,743	1,504	1,411	0,728
18	12	3,413	5,079	1,750	1,453	1,423	0,735
19	13	3,403	5,093	1,714	1,497	1,387	0,724
20	14	3,392	5,089	1,741	1,469	1,445	0,722
21	20	3,390	5,070	1,716	1,456	1,434	0,728
22	2	3,404	5,090	1,824	1,532	1,437	0,734
23	4	3,384	5,056	1,813	1,414	1,443	0,740
24	23	3,388	5,093	1,760	1,481	1,365	0,709

**Tabelle 5: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P03**

Zweite Probenserie; Maßeinheit: mg/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Freie SO <sub>2</sub>	Gebundene SO <sub>2</sub>	Gesamte SO <sub>2</sub>
1	6	46,9	73,4	120,3
2	8	46,4	74,0	120,4
3	21	44,8	73,8	118,6
4	16	46,4	74,0	120,4
5	1	47,4	75,1	122,5
6	9	46,4	74,0	120,4
7	11	46,4	74,0	120,4
8	5	46,9	74,2	121,1
9	17	46,9	74,2	121,1
10	19	46,4	74,0	120,4
11	1	48,4	73,8	122,2
12	6	47,4	73,6	121,0
13	9	46,4	74,0	120,4
14	11	46,9	74,2	121,1
15	5	47,4	74,3	121,7
16	16	46,9	74,2	121,1
17	21	45,8	73,2	119,0
18	8	46,9	74,2	121,1
19	17	46,9	74,2	121,1
20	19	47,4	73,6	121,0

Mit den Messergebnissen des Prüfgutes **FT19P03** wurde ebenso verfahren wie bei dem Prüfgut FT19P02. Die graphischen Auswertungen zeigten, wie regelmäßig beobachtet, abweichende einzelne Messergebnisse, bei denen die zweite Messung im zentralen Bereich der Streuung liegt. Ein wesentlicher Ausreißer trat jedoch nicht auf. Ferner traten wenige unterschiedlich signifikante Korrelationen der Messergebnisse zur laufenden Messnummer auf. Mäßige Korrelationen zur Probennummer ergaben sich für die Parameter Freie und Gesamte je-

doch nicht für Gebundene Schweflige Säure. Die Korrelation bei Gesamter Schwefliger Säure ist damit durch die tendenzielle Abnahme der Freien Schwefligen Säure im Füllverlauf bedingt.

Wie die Tabelle 6 mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse aufzeigt, ist bei den Parametern Freie und Gesamte Schweflige Säure ein signifikanter Unterschied zwischen den Proben und damit eine Inhomogenität nachweisbar. Die Ergebnisse der Varianzanalyse sind gültig, soweit der Wert für  $s_r/s_z$  nicht über 0,5 liegt. Die Forderung ist für enzymatisch bestimmte Glucose und die FTIR-Werte für Äpfelsäure nicht erfüllt. Auf eine Korrektur der mäßigen und schwach signifikanten Korrelation der Äpfelsäurewerte zur Messfolge wurde verzichtet, weil keine deutliche Verringerung des Wertes dieses Quotienten zu erwarten ist. Bei vorsichtiger Interpretation tragen die Messergebnisse beider Parameter nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei, widersprechen ihr aber nicht, zumal die mit FTIR gemessenen Werte für Glucose völlig unauffällig sind. Für die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure ergibt die weitere Prüfung, dass der für die Verwendung in einer Laborvergleichsuntersuchung einzuhaltende Höchstwert 0,3 für den Quotienten  $s_{Pr}/s_z$  ebensowenig überschritten wird wie der maximal zu tolerierende Wert für die Standardabweichung der Streuung zwischen den Proben.

**Tabelle 6: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P03**

	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.	1,005088	24	1,2436	0,3556	0,000068	0,000024	0,000132	0,518	0,181	0,000083
- FTIR	1,005317	24	0,4393	0,9081	0,000037		0,000132	0,283		0,0001
Vorh. Alkohol NIR	84,56	24	0,8182	0,6267	0,071		0,535	0,133		0,2246
- FTIR	85,83	24	1,5694	0,2251	0,178	0,095	0,535	0,332	0,177	0,2706
Glucose enzymat.	12,80	24	1,1461	0,4072	0,218	0,059	0,389	0,561	0,152	0,2551
- FTIR	14,71	24	0,3705	0,9447	0,155		0,4401	0,352		0,2274
Fructose enzymat.	16,31	24	1,0889	0,4404	0,235	0,049	0,483	0,485	0,102	0,2912
- FTIR	15,11	24	0,8959	0,5688	0,091		0,451	0,202		0,1995
Vergärbare Zucker, enz.	29,12	24	0,6328	0,7716	0,358		0,829	0,432		0,4699
- FTIR	30,15	24	1,2889	0,3338	0,110	0,042	0,857	0,129	0,049	0,3587
pH-Wert FTIR	3,39	24	0,8238	0,6224	0,008		0,0476	0,169		0,0205
Gesamtsäure FTIR	5,08	24	2,1613	0,1006	0,012	0,010	0,107	0,117	0,089	0,0445
Weinsäure FTIR	1,76	24	2,4086	0,0732	0,023	0,019	0,091	0,252	0,212	0,0425
Äpfelsäure FTIR	1,49	24	1,5784	0,2223	0,037	0,020	0,056	0,659	0,355	0,0407
Milchsäure FTIR	1,41	24	1,1573	0,4009	0,040	0,011	0,076	0,527	0,148	0,0479
Flüchtige Säure FTIR	0,72	24	1,2232	0,3659	0,011	0,004	0,0286	0,383	0,128	0,0153
Freie SO <sub>2</sub>	46,77	20	4,1205	0,0188	0,461	0,576	4,195	0,110	0,137	1,7865
Gebundene SO <sub>2</sub>	74,00	20	1,6340	0,2275	0,345	0,194	5,357	0,064	0,036	2,2306
Gesamte SO <sub>2</sub>	120,77	20	10,679	0,0005	0,383	0,842	5,357	0,071	0,157	2,2368

Zusammenfassend ist festzustellen, dass auch das Prüfgut FT19P03 nach den Ergebnissen der Homogenitätsprüfung uneingeschränkt für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet ist.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

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

Zur Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen für die Berechnung der Z-Scores

und damit für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 des Berichtes verwiesen.

### 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT19P02 und FT19P03

#### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT19P02 wird durch die in Tabelle 7 und für das Prüfgut FT19P03 durch die in Tabelle 8 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter belegt. In beiden Tabellen wird wie in Teil 1 das Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden dargestellt. Auf den Teil 1 wird auch hinsichtlich der Bedeutung der zur Bewertung des Gesamtergebnisses herangezogenen Größen und der Regeln zu ihrer Interpretation Bezug genommen. Eine Betrachtung des Gesamtergebnisses der FTIR-Messungen auf der Basis der Vergleichsstandardabweichungen dieses Verfahrens erfolgt im Abschnitt 3.2.

Für das **Prüfgut FT19P02** kam es nur bei 9 der 22 Datengruppen zu keinem Ergebnisausschluss. Grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte traten bei 8 Datengruppen auf, insbesondere bei den Reduktionen, drei Datengruppen der Freien Schwefligen Säure und der Gesamten Schwefligen Säure. Bei gesamter Milchsäure liegt der Gehalt nahe an der Anwendungsgrenze des überwiegend angewandten HPLC-Verfahrens. Dies dürfte auch für die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmung der Freien Schwefligen Säure zutreffen. In diesem Bereich ist nach der Erfahrung stets mit einem erhöhten Anteil stark abweichender Ergebnisse zu rechnen. Bei 5 der 8 Datengruppen kam es zu keinem weiteren Ausschluss von Laborergebnissen wegen einer Abweichung um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median. Zu mehr als einem Ausschluss führte dieses Kriterium nur bei den Parametern Fructose und pH-Wert. Die für den Gesamterfolg maßgeblichen Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  lagen bei 11 Datengruppen unter dem Richtwert 1,5. Dieser wurde bei den 6 Parametern Vergärbare Zucker, pH-Wert, Weinsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und L-Milchsäure mit Werten zwischen 1,6 und 1,9 mäßig überschritten. Bei den drei letztgenannten Parametern war zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes mäßig eingeschränkt. Bei den Parametern pH-Wert, Weinsäure und Flüchtige Säure werden erhöhte Werte des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  häufiger beobachtet, während bei den Parametern Vergärbare Zucker und L-Milchsäure ein Zusammenhang mit den recht niedrigen Gehalten gesehen werden kann. Die Werte des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  überschritten den Höchstwert 2,0 eindeutig bei den Parametern **Gesamte Milchsäure, Reduktone** sowie allen Auswertungsvarianten für **Freie Schweflige Säure**. Bei diesen Parametern war stets auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt oder nicht mehr gegeben, wie die auf über 0,4 oder sogar über 0,5 erhöhten Werte des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  ausweisen. Prüfgutübergreifend wurden die Ergebnisse für die auffälligen Parameter bereits in Teil 1 des Berichtes dargestellt und diskutiert. Für diese Parameter können **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden. Für **alle anderen Parameter** sind die erhaltenen **Z-Scores aussagekräftig**.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT19P02

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	58	57	0,99150	0,99150	0,000088	0,000012			0,000132	0,000190		0,67	0,46	0,09	0,06
Vorhandener Alkohol (g/L)	27	27	100,80	100,71	0,689	0,133	2,845	0,535	0,886		0,24	1,29	0,78	0,25	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	50	50	21,20	21,25	0,561	0,0793	0,759	0,594			0,74	0,94		0,13	
Vergärbare Zucker (g/L)	39	38	2,614	2,595	0,211	0,0342	0,127	0,113	0,584	1,66	1,87	0,36	0,30	0,06	
Glucose (g/L)	39 (1)	38	0,8576	0,8750	0,0955	0,0155	0,0505	0,0665	0,408	1,89	1,44	0,23	0,23	0,04	
Fructose (g/L)	40	36	1,735	1,700	0,132	0,0220	0,0888	0,0888	0,330	1,49	1,49	0,40	0,25	0,07	
Glycerin (g/L)	20	20	5,601	5,595	0,208	0,0466	0,244		0,348	0,85		0,60	0,19	0,13	
pH-Wert	50	48	3,425	3,430	0,0836	0,0121		0,0476	0,0493		1,76	1,70	0,25	0,24	
Gesamtsäure (g/L)	54	54	5,326	5,300	0,152	0,0206	0,233	0,107	0,145	0,65	1,42	1,05	0,19	0,14	
Weinsäure (g/L)	33	33	2,368	2,340	0,206	0,0358	0,116		0,227	1,77		0,91	0,31	0,16	
Flüchtige Säure (g/L)	26	25	0,4491	0,4510	0,0516	0,0103	0,0288	0,0286	0,0891	1,79	1,81	0,58	0,36	0,12	
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- enzymatisch, automatisiert	18	18	0,4611	0,4450	0,0409	0,0096	0,0284			1,44			0,34		
- sonst. Verfahren	8	8	0,3898	0,3864	0,0171	0,0061	0,0252			0,68			0,24		
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	13	13	2,018	2,006	0,135	0,0373	0,102	0,0688	0,218	1,32	1,96	0,62	0,54	0,17	
L-Äpfelsäure (g/L)	29 (1)	29	2,028	2,032	0,105	0,0194	0,103	0,0695		1,01	1,51		0,28		
Gesamte Milchsäure (g/L)	14 (2)	13	0,2223	0,2130	0,0353	0,0098	0,0152		0,209	2,32		0,17	0,64	0,05	
L-Milchsäure (g/L)	25	25	0,1154	0,1100	0,0400	0,0080	0,0087	0,0225		4,61	1,78		0,36		
Reduktone (mg/L)	14 (9)	14	5,386	5,000	1,66	0,444	0,628			2,64			0,71		
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
Verf. ohne Reduktoneinfluss	42 (4)	42	14,70	14,90	4,12	0,636	1,59			2,60			0,40		
Destillation + Photometrie	16 (2)	16	12,66	13,35	3,11	0,778	1,45			2,15			0,54		
- jodometrisch incl. Reduktone	40 (10)	40	13,84	14,00	3,10	0,490	1,51			2,06			0,33		
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	32 (1)	31	87,97	89,00	7,28	1,308	7,25	5,36		1,01	1,36		0,24		

## Erläuterungen zur Tabelle 7 und zur Tabelle 8 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Bei dem Prüfgut **FT19P03** war in der Auswertung bei 13 von 28 Wertegruppen kein Laborergebnis auszuschließen. Bei weiteren 12 Wertegruppen war nur jeweils ein Laborergebnis, davon in vier Fällen ein grob fehlerhafter Wert, auszuschließen. Bei dem Parameter pH-Wert wurden drei und bei L-Milchsäure zwei Laborergebnisse aufgrund eines absoluten Z-Score-Betrages über 5 sowie bei L-Milchsäure eines wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median aller Laborergebnisse ausgeschlossen. Bei dem Parameter **Reduktone** wurden 9 Laborergebnisse aufgrund des zuletzt genannten Grundes sowie ein weiteres wegen eines absoluten Z-Score-Betrages über 5 ausgeschlossen. Bei einem Anteil von insgesamt 37,5 % ausgeschlossener Laborergebnisse wurde somit bei diesem Parameter die Voraussetzung nicht erfüllt, dass für die Ermittlung gültiger Z-Scores höchstens 22,2 % der Laborergebnisse ausgeschlossen werden dürfen.

Mit 21 Wertegruppen lag bei drei Vierteln der Wertegruppen der Quotient  $s_L/s_{Ziel}$  im unauffälligen Bereich bis zu 1,5. Bei sechs Wertegruppen war der Quotient mäßig auf einen Betrag von rund 1,6 bis 2,0 erhöht und bei vier Wertegruppen zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient  $u_M/s_{Ziel}$  0,4 bzw. 0,5) mäßig eingeschränkt. Bei zusammenfassender Betrachtung wurden somit für die Mehrzahl der Parameter **gültige Z-Scores** erhalten. Nur bei dem Parameter **Reduktone** wurde der Höchstwert 2,0 des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  überschritten. Zugleich war bei einem Wert des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  von 0,6 keine hinreichende Sicherheit des Bezugswertes gegeben. Daher war **keine gültige Bewertung** der Laborleistung durch **Z-Scores** möglich.

Eine **eingeschränkte Zuverlässigkeit** des Bezugswertes in Kombination mit noch unauffälligen Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  liegt infolge geringer Ergebnisanzahl in der jeweiligen Datengruppe bei der Auswertungsvariante Weinsäure, bestimmt mit HPLC oder Ionenchromatographie (IC), und den Ergebnissen für jodometrisch bestimmte Freie Schweflige Säure, die nach Abzug der Reduktone mitgeteilt wurden, vor. Sie ist ohne Einfluss auf die Bewertung der Z-Scores, da diese Datengruppen nicht als Basis der Laborergebnismitteilungen herangezogen wurden.

Auf alle Parameter, bei denen erhöhte bzw. über dem Höchstwert liegende Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  vorliegen, ist bereits bei der Besprechung der Gesamtergebnisse im Abschnitt 4 des Teiles 1 der Berichte eingegangen worden, worauf verwiesen wird.

**Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT19P03**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s <sub>L</sub>	Labor-Stdfehler u <sub>M</sub>	Zielstandardabweichung			Quotienten					
							n. Horwitz s <sub>H</sub>	exp. herk. s <sub>exp</sub>	exp. FTIR s <sub>Ü</sub>	s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub>	s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub>	s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub>	u <sub>M</sub> /s <sub>Ziel</sub>	u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub>	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	55	54	1,00512	1,00510	0,000095	0,000013			0,000132	0,000190		0,72	0,50	0,10	0,07
Vorhandener Alkohol (g/L)	22	22	84,30	84,25	0,625	0,133	2,445	0,535	0,886		0,26	1,17	0,71	0,25	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	45 (1)	45	50,33	50,30	0,383	0,0572	1,578	0,594			0,24	0,65		0,10	
Vergärbare Zucker (g/L)	36	36	29,45	29,42	0,637	0,106197	1,001	0,837			0,64	0,76		0,13	
Glucose (g/L)	36	35	13,04	13,03	0,289	0,048908	0,501	0,395	0,408		0,58	0,73	0,71	0,12	0,12
Fructose (g/L)	36	35	16,41	16,33	0,335	0,056709	0,607	0,484			0,55	0,69		0,12	
Glycerin (g/L)	16	16	6,224	6,015	0,423	0,105704	0,260			0,348	1,63		1,21	0,41	0,30
pH-Wert	46	43	3,513	3,520	0,0705	0,0107		0,0476	0,0493			1,48	1,48	0,23	0,23
Gesamtsäure (g/L)	53	52	5,271	5,290	0,132	0,0183	0,233	0,107	0,145		0,57	1,23	0,91	0,17	0,13
Weinsäure (g/L)															
- alle herkömmlichen Verfahren	31 (1)	31	2,118	2,130	0,153	0,0275	0,108			0,227	1,42		0,67	0,26	0,12
- HPLC + IC	13 (1)	12	2,028	1,980	0,135	0,0389	0,101			0,227	1,33		0,59	0,38	0,17
Photometrie	18	18	2,155	2,150	0,109	0,0258	0,108			0,227	1,01		0,48	0,24	0,11
Flüchtige Säure (g/L) ohne SO <sub>2</sub>	24	23	0,7819	0,7850	0,0828	0,0173	0,046			0,0891	1,80		0,93	0,38	0,19
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- alle Verfahren außer FTR	32	32	0,7902	0,7950	0,0600	0,0106	0,0466				1,29			0,23	
- enzymatisch, automatisiert	18	18	0,8175	0,8200	0,0567	0,0134	0,0478				1,19			0,28	
- sonstige Verfahren ohne FTIR	13	13	0,7529	0,7501	0,0461	0,0128	0,0443				1,04			0,29	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	14	13	0,9256	0,9210	0,0786	0,0218	0,0527	0,0413	0,218		1,49	1,90	0,36	0,53	0,10
L-Äpfelsäure (g/L)	27 (1)	27	0,9381	0,9300	0,0650	0,0125	0,0532	0,0415			1,22	1,56		0,30	
Gesamte Milchsäure (g/L)	20	19	1,761	1,776	0,131	0,0300	0,0921			0,209	1,42		0,63	0,33	0,14
L-Milchsäure (g/L)	27 (1)	25	1,348	1,344	0,0754	0,0151	0,0727	0,0775			1,04	0,97		0,19	
Reduktone (mg/L)	15 (9)	14	5,081	5,000	1,40	0,375	0,628				2,23			0,60	
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
- Verf. ohne Reduktionseinfluss	45	45	38,22	38,00	6,45	0,96	3,52				1,83			0,27	
- Destillation	7	7	38,17	38,00	2,81	1,06	3,52				0,80			0,30	
- Destillation + Photometrie	17	17	39,41	38,00	6,20	1,50	3,52				1,76			0,43	
- jodometr. incl. Reduktone	40	40	40,87	40,00	4,15	0,66	3,67				1,13			0,18	
- jodometr. excl. Reduktone	10	10	38,82	37,65	4,86	1,54	3,49	3,67			1,39	1,32		0,42	
- wie vor, Basis erweitert *)	20	20	36,53	35,50	4,73	1,06	3,32	3,67			1,42	1,29		0,29	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	29	28	99,80	100,00	7,54	1,43	8,00	5,36			0,94	1,41		0,27	

\*) Basis erweitert; weitere Erläuterungen siehe Teil 1 Abschnitt 4.4.2.



### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 begründet, wurden auch für die Prüfgüter FT19P02 und FT19P03 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unter Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung der Laborergebnisse durch ein robustes Verfahren unterzogen. Hierbei werden vor allem die Standardabweichungen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens ( $s_{\text{FTIR}}$ ) als Zielstandardabweichungen und Maßstab einer möglichen Übereinstimmung der FTIR-Laborergebnisse verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT19P02 in der Tabelle 9 und für das Prüfgut FT19P03 in der Tabelle 10 zusammengefasst.

Wie bereits in Teil 1 des Berichtes für das Prüfgut FT19P01 angesprochen, weisen auch bei den Prüfgütern **FT19P02** und **FT19P03** die Messergebnisse für fast alle Parameter bei Verwendung der Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens als Zielstandardabweichung (Leistungskriterium) **erhöhte Quotienten  $s_L/s_{\text{FTIR}}$**  auf. Dies dürfte vor allem auf den Einsatz unterschiedlicher Kalibrierungen zurückzuführen sein, weil bei einheitlicher Kalibrierung Matrixeffekte für den Vergleich von FTIR-Ergebnissen untereinander nicht zur Streuung zwischen den Laboratorien beitragen. Insoweit zeigt auch dieser Befund eine mangelhafte Nutzung der Möglichkeiten des Verfahrens an.

---

#### Erläuterungen zu Tabelle 9 und Tabelle 10:

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

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

**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{\text{FTIR}}$ )** = 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 ( $s_L/s_{\text{FTIR}}$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

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

**Blau** markierte Daten sind auffällig und werden diskutiert.

**Rot** markierte Daten weisen auf die Überschreitung von Grenzen hin.

**Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT19P02**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. (S <sub>L</sub> )	Zielstdabw n. Horwitz (S <sub>H</sub> )	Zielstdabw exp. FTIR (S <sub>FTIR</sub> )	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	81	0,99171	0,99170	0,000245		0,000146		1,68	0,19
Vorhandener Alkohol (g/L)	84	100,957	101,000	1,056	2,852	0,739	0,37	1,43	0,16
Gesamtextrakt (g/L)	39	21,778	21,890	0,769	0,778	0,415	0,99	1,85	0,30
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	75	2,664	2,600	0,695	0,127	0,354	5,46	1,96	0,23
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	78	2,686	2,665	0,718	0,130	0,354	5,52	2,03	0,23
Glucose (g/L)	78	0,837	0,815	0,508	0,0475	0,288	10,68	1,76	0,20
Fructose (g/L)	79	1,836	1,800	0,498	0,0932	0,222	5,35	2,24	0,25
Glycerin (g/L)	62	5,551	5,535	0,357	0,242	0,265	1,48	1,35	0,17
pH-Wert	80	3,413	3,420	0,064		0,0188		3,42	0,38
Gesamtsäure (g/L)	83	5,490	5,480	0,176	0,240	0,0816	0,73	2,15	0,24
Weinsäure (g/L)	74	2,126	2,160	0,255	0,109	0,132	2,34	1,93	0,22
Flüchtige Säure (g/L)	76	0,4406	0,4300	0,0813	0,0276	0,0427	2,95	1,91	0,22
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	75	2,234	2,230	0,290	0,112	0,0975	2,60	2,98	0,34
Gesamte Milchsäure (g/L)	68	0,2931	0,2700	0,209	0,0186	0,0805	11,23	2,60	0,31
Freie Schweflige Säure (mg/L)	28	16,74	16,02	5,55	1,69	1,69	3,29	3,29	0,62
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	28	92,40	91,50	12,61	7,42	7,42	1,70	1,70	0,32

**Tabelle 10: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT19P03**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw n. Horwitz S <sub>H</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>FTIR</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	80	1,00507	1,00501	0,000280		0,000146		1,92	0,21
Vorhandener Alkohol (g/L)	83	85,296	85,300	1,136	2,471	0,739	0,46	1,54	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	39	50,981	51,100	0,771	1,599	0,415	0,48	1,86	0,30
Vergärbare Zucker (r)	74	29,947	29,965	0,872	1,016	0,354	0,86	2,46	0,29
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	78	29,466	29,485	0,807	1,002	0,354	0,81	2,28	0,26
Glucose (g/L)	78	13,379	13,400	0,569	0,513	0,288	1,11	1,98	0,22
Fructose (g/L)	78	16,097	16,170	0,591	0,602	0,222	0,98	2,66	0,30
Glycerin (g/L)	62	6,280	6,210	0,564	0,267	0,265	2,11	2,13	0,27
pH-Wert	79	3,466	3,470	0,0798		0,0188		4,24	0,48
Gesamtsäure (g/L)	82	5,169	5,180	0,180	0,229	0,0816	0,79	2,21	0,24
Weinsäure (g/L)	73	1,863	1,880	0,213	0,0967	0,132	2,20	1,61	0,19
Flüchtige Säure (g/L)	75	0,7138	0,7200	0,1122	0,0428	0,0427	2,62	2,63	0,30
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	71	1,094	1,100	0,383	0,0613	0,0975	6,25	3,93	0,47
Gesamte Milchsäure (g/L)	73	1,625	1,600	0,283	0,0843	0,0805	3,35	3,51	0,41
Freie Schweflige Säure (mg/L)	28	37,47	36,50	7,12	3,40	4,46	2,09	1,60	0,30
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	28	108,38	109,00	11,79	8,61	8,61	1,37	1,37	0,42

Schließlich ist auch für diese Prüfgüter von Interesse, inwieweit die Medianwerte der FTIR-Ergebnisse und der Ergebnisse der herkömmlichen Methoden übereinstimmen bzw. sich unterscheiden. Hierzu sind in Tabelle 11 und Tabelle 12 die Abweichungen der Mediane beider Ergebnisgruppen sowie die  $Z_{\bar{U}}$ -Scores wiedergegeben, die sich bei Division der Abweichung durch die zur Bewertung der Laborergebnisse verwendete Zielstandardabweichung ergeben.

**Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT19P02**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	$Z_{\bar{U}}$ - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99170	0,99150	0,000200	0,000190	1,05
Vorhandener Alkohol (g/L)	101,00	100,71	0,293	0,886	0,33
Gesamtextrakt(g/L)	21,89	21,25	0,640	0,594	1,08
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	2,600	2,595	0,005	0,584	0,01
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	2,665	2,595	0,070	0,584	0,12
Glucose (g/L)	0,8150	0,8750	-0,060	0,408	-0,15
Fructose (g/L)	1,800	1,700	0,100	0,330	0,30
Glycerin (g/L)	5,535	5,595	-0,060	0,348	-0,17
pH-Wert	3,420	3,430	-0,010	0,049	-0,20
Gesamtsäure (g/L)	5,480	5,300	0,180	0,145	1,24
Weinsäure (g/L)	2,160	2,340	-0,180	0,227	-0,79
Flüchtige Säure (g/L)	0,4300	0,4510	-0,021	0,089	-0,24
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	2,230	2,006	0,224	0,218	1,03
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,2700	0,2130	0,057	0,209	0,27
Freie Schweflige Säure (mg/L)	16,02	13,35	2,67	1,45	1,84
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	91,50	89,00	2,50	7,25	0,35

Die  $Z_{\bar{U}}$ -Scores der Mediane zeigen an, in welchem "mittleren" Ausmaß die Z-Scores der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Z-Scores der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren verschoben sind. Bei absoluten Beträgen unter eins ist die Bewertung der FTIR-Laborleistung durch die auf den Median der herkömmlichen Laborergebnisse bezogenen  $Z_{\bar{U}}$ -Scores sinnvoll, während bei absoluten Beträgen der  $Z_{\bar{U}}$ -Scores der FTIR-Medianwerte über 1,5 von erheblichen Matrixeffekten auszugehen ist. Bei entsprechenden Vergleichen ist zu berücksichtigen, dass in den Tabellen der FTIR-Laborergebnisse in der Spalte 'Z-Score, exper.' In der Regel die  $Z_{\bar{U}}$ -Scores der FTIR-Laborergebnisse ausgewiesen sind.

Ein statistisch erheblicher Unterschied der Medianwerte zeigt sich bei dem Prüfgut **FT19P02** nur für den Parameter **Freie Schweflige Säure**. Dies dürfte damit zusammenhängen, dass bei dem vorliegenden geringen Gehalt die Untergrenze des Anwendungsbereiches für das Bestimmungsverfahren erreicht ist. Weiterhin sind die absoluten Beträge der  $Z_{\bar{U}}$ -Scores für die Parameter Relative Dichte, Gesamtextrakt, Gesamtsäure und ganz geringfügig für Gesamte Äpfelsäure über den Richtwert 1,0 erhöht. Dies deutet auf relativ geringe Matrixeffekte bei dem vorliegenden Prüfgut hin. Die Z-Scores der eigenen Laborergebnisse sind damit besonders zur Bewertung der eigenen Arbeitsumgebung hinsichtlich des Gerätezustands, der Eignung der eigenen Kalibrierung und der Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung geeignet.

Bei dem Prüfgut **FT19P03** werden ebenfalls nur relativ wenige erhöhte  $Z_{\bar{U}}$ -Scores der FTIR-Medianwerte beobachtet. Über dem Richtwert 1,0 liegen mit unterschiedlichen Vorzeichen die

Z<sub>i</sub>-Scores für die Parameter Vorhandener Alkohol, Gesamtextrakt, Weinsäure und Gesamte Schweflige Säure, wobei der stärkste Matrixeffekt für den Parameter Gesamtextrakt beobachtet wird, aber noch unter dem Höchstwert 1,5 für zuverlässige Z-Scores der FTIR-Ergebnisse liegt.

Die Messergebnisse bei diesem Prüfgut sind ebenfalls zur Überprüfung der eigenen Arbeitsumgebung geeignet.

Bei unbefriedigenden Laborergebnissen ist insbesondere zu prüfen, ob der Matrixeffekt durch den Einsatz einer geeigneteren Kalibrierung behoben werden kann. Außerdem ist bei den einzelnen Säuren des Weines als weitere Ursache in Betracht zu ziehen, dass eine Slope-Interzept-Korrektur erforderlich sein kann, die wegen des damit verbundenen Aufwandes häufig unterlassen wird.

**Tabelle 12: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT19P03**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,005010	1,00510	-0,000090	0,000190	-0,47
Vorhandener Alkohol (g/L)	85,30	84,25	1,055	0,886	1,19
Gesamtextrakt (g/L)	51,10	50,30	0,800	0,594	1,35
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	29,97	29,42	0,540	0,584	0,92
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	29,48	29,42	0,060	0,584	0,10
Glucose (g/L)	13,40	13,03	0,370	0,408	0,91
Fructose (g/L)	16,17	16,33	-0,164	0,330	-0,50
Glycerin (g/L)	6,210	6,015	0,195	0,348	0,56
pH-Wert	3,470	3,520	-0,050	0,049	-1,01
Gesamtsäure (g/L)	5,180	5,290	-0,110	0,145	-0,76
Weinsäure (g/L)	1,880	2,130	-0,250	0,227	-1,10
Flüchtige Säure (g/L)	0,7200	0,7850	-0,065	0,089	-0,73
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	1,1000	0,9210	0,179	0,218	0,82
Gesamte Milchsäure (g/L)	1,600	1,776	-0,176	0,209	-0,84
Freie Schweflige Säure (mg/L)	36,50	38,00	-1,50	3,52	-0,43
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	109,00	100,00	9,00	8,00	1,13

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT19P02

### 4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99144	-0,000060	-0,45	
02	LwK 8.1	0,99147	-0,000030	-0,23	
04	LwK 8.4	0,99144	-0,000060	-0,45	
05	LwK 8.4	0,99144	-0,000060	-0,45	
06	LwK 8.4	0,99141	-0,000090	-0,68	
08	LwK 8.1	0,99140	-0,000100	-0,76	
09	LwK 8.4	0,99154	0,000040	0,30	
10	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
11	LwK 8.4	0,99140	-0,000100	-0,76	
12	LwK 8.4	0,99140	-0,000100	-0,76	
14	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
15	LwK 8.4	0,99151	0,000010	0,08	
17	LwK 8.4	0,99140	-0,000100	-0,76	
18	LwK 8.4	0,99140	-0,000100	-0,76	
20	LwK 8.4	0,99157	0,000070	0,53	
21	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
22	LwK 8.4	0,99154	0,000040	0,30	
23	LwK 8.4	0,99144	-0,000060	-0,45	
25	LwK 8.4	0,99147	-0,000030	-0,23	
26	LwK 8.4	0,99140	-0,000100	-0,76	
27	LwK 8.4	0,99148	-0,000020	-0,15	
29	LwK 8.4	0,99145	-0,000050	-0,38	
31	LwK 8.4	0,99152	0,000020	0,15	
34	LwK 8.4	0,99148	-0,000020	-0,15	
36	LwK 8.4	0,99141	-0,000090	-0,68	
37	LwK 8.3	0,99134	-0,000160	-1,21	
38	LwK 8.4	0,99161	0,000110	0,83	
39	LwK 8.4	0,99145	-0,000050	-0,38	
40	LwK 8.4	0,99134	-0,000160	-1,21	
41	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	0,99147	-0,000030	-0,23	
43	LwK 8.4	0,99145	-0,000050	-0,38	
44	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
45	LwK 8.4	0,99152	0,000020	0,15	
46	LwK 8.4	0,99145	-0,000050	-0,38	
48	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
49	LwK 8.4	0,99152	0,000020	0,15	
50	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
52	LwK 8.4	0,99147	-0,000031	-0,23	
53	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
55	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
56	LwK 8.4	0,99138	-0,000120	-0,91	
59	LwK 8.4	0,99152	0,000020	0,15	
60	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
61	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
63	LwK 8.4	0,99142	-0,000080	-0,61	
65	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
66	LwK 8.4	0,99180	0,000300	2,27	
70	LwK 8.4	0,99151	0,000010	0,08	
74	LwK 8.4	0,98148	-0,010020	-75,91	(**)
75	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	
81	LwK 8.4	0,99146	-0,000040	-0,30	
82	LwK 8.4	0,99168	0,000180	1,36	
83	LwK 8.2	0,99150	0,000000	0,00	
85	LwK 8.4	0,99170	0,000200	1,52	
86	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
87	LwK 8.4	0,99150	0,000000	0,00	
106	LwK 8.4	0,99160	0,000100	0,76	

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

## 4.1.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
202	FTIR	0,99145	-0,000050	-0,26	
203	FTIR	0,99182	0,000320	1,68	
204	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
205	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
206	FTIR	0,99157	0,000070	0,37	
207	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
208	FTIR	0,99194	0,000440	2,32	
209	FTIR	0,99158	0,000080	0,42	
210	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
211	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
212	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
214	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
215	FTIR	0,99140	-0,000100	-0,53	
216	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
217	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
218	FTIR	0,99158	0,000080	0,42	
219	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
220	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
221	FTIR	0,99166	0,000160	0,84	
222	FTIR	0,99120	-0,000300	-1,58	
223	FTIR	0,99140	-0,000100	-0,53	
224	FTIR	0,99140	-0,000100	-0,53	
225	FTIR	0,99175	0,000250	1,32	
226	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
227	FTIR	0,99163	0,000130	0,68	
228	FTIR	0,99170	0,000200	1,05	
229	FTIR	0,99146	-0,000040	-0,21	
231	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
232	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
234	FTIR	0,99161	0,000110	0,58	
235	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
236	FTIR	0,99151	0,000010	0,05	
237	FTIR	0,99192	0,000420	2,21	
240	FTIR	0,99162	0,000120	0,63	
241	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
242	FTIR	0,99164	0,000140	0,74	
243	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
244	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
245	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
247	FTIR	0,99176	0,000260	1,37	
249	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
250	FTIR	0,99220	0,000700	3,68	
251	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
252	FTIR	0,99159	0,000090	0,47	
254	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
255	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
256	FTIR	0,99174	0,000240	1,26	
257	FTIR	0,99170	0,000200	1,05	
258	FTIR	0,99090	-0,000600	-3,16	
259	FTIR	0,99187	0,000370	1,95	
260	FTIR	0,99170	0,000200	1,05	
261	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
262	FTIR	0,99220	0,000700	3,68	
263	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
264	FTIR	0,99125	-0,000250	-1,32	
265	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
266	FTIR	0,99180	0,000300	1,58	
267	FTIR	0,99140	-0,000100	-0,53	
268	FTIR	0,99148	-0,000020	-0,11	
269	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
270	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
271	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
272	FTIR	0,99135	-0,000150	-0,79	
273	FTIR	0,99164	0,000140	0,74	
275	FTIR	0,99210	0,000600	3,16	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
277	FTIR	0,99150	0,000000	0,00	
278	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
279	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
280	FTIR	0,99220	0,000700	3,68	
281	FTIR	0,99190	0,000400	2,11	
282	FTIR	0,99200	0,000500	2,63	
283	FTIR	0,99170	0,000200	1,05	
284	FTIR	0,99140	-0,000100	-0,53	
285	FTIR	0,99161	0,000110	0,58	
287	FTIR	0,99260	0,001100	5,79	(**)
288	FTIR	0,99310	0,001600	8,42	(**)
320	FTIR	0,99160	0,000100	0,53	
337	FTIR	0,99194	0,000440	2,32	
365	FTIR	0,99170	0,000200	1,05	

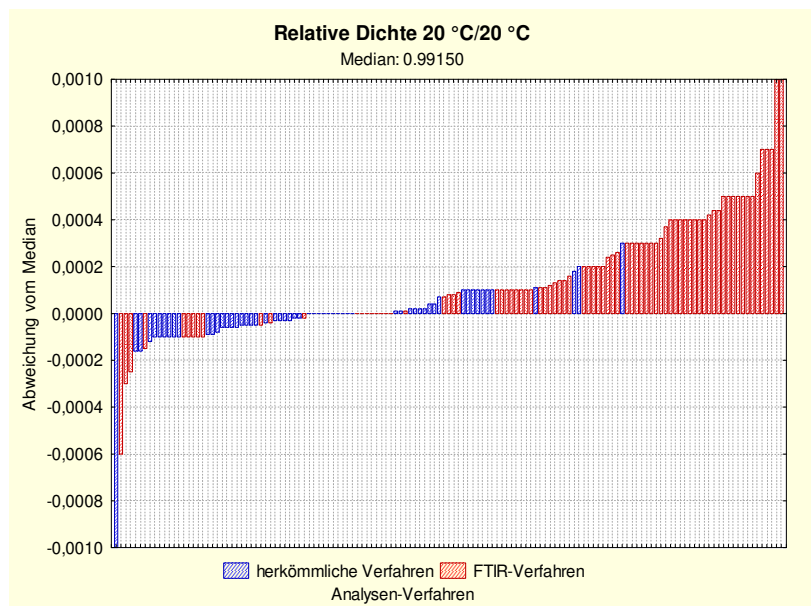
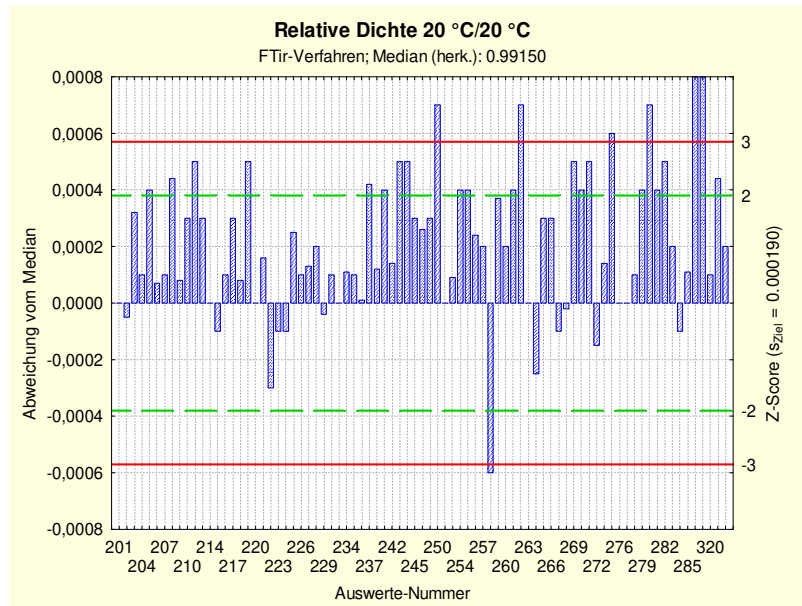
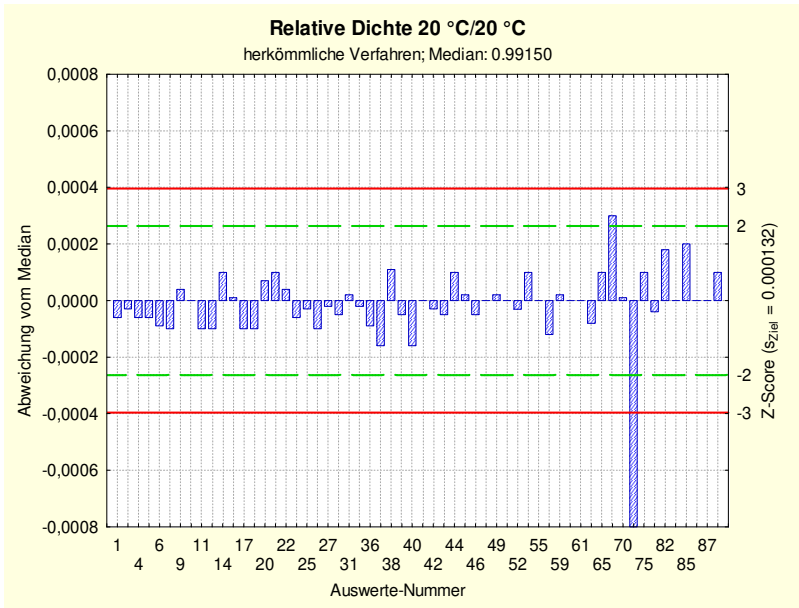
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.1.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	58	57
Minimalwert	0,98148	0,99134
Mittelwert	0,991324	0,991496
Median	0,991500	0,991500
Maximalwert	0,99180	0,99180
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,001318	0,000088
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000173	0,000012
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	9,99	0,67
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	6,94	0,46
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	1,31	0,09
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,91	0,06

**4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	3	0,99144	0,000040
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99150	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	0,99134	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	53	0,99150	0,000083
	herkömmliche Verfahren	58	0,99149	0,000083
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	0,99171	0,000245





## 4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 4.2.1 Herkömmliche Laboreergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	100,60	-0,107	-0,04	-0,20	
02	LwK 2.4	100,17	-0,537	-0,19	-1,00	
04	LwK 2.1	101,10	0,395	0,14	0,74	
05	LwK 2.4	100,27	-0,437	-0,15	-0,82	
06	LwK 2.9	101,26	0,553	0,19	1,03	
08	LwK 2.4	101,50	0,793	0,28	1,48	
09	LwK 2.1	101,50	0,793	0,28	1,48	
10	LwK 2.1	99,80	-0,907	-0,32	-1,70	
11	LwK 2.1	101,25	0,543	0,19	1,01	
12	LwK 2.9	101,70	0,993	0,35	1,86	
14	LwK 2.9	101,73	1,023	0,36	1,91	
15	LwK 2.9	102,10	1,393	0,49	2,60	
17	LwK 2.9	101,90	1,193	0,42	2,23	
18	LwK 2.1	102,31	1,603	0,56	3,00	
20	LwK 2.9	101,29	0,583	0,20	1,09	
21	LwK 2.7	101,30	0,593	0,21	1,11	
22	LwK 2.9	101,20	0,493	0,17	0,92	
23	LwK 2.5	100,70	-0,007	-0,00	-0,01	
25	LwK 2.9	101,26	0,553	0,19	1,03	
26	LwK 2.4	101,40	0,693	0,24	1,30	
27	LwK 2.5	98,80	-1,907	-0,67	-3,56	
29	LwK 2.1	100,44	-0,267	-0,09	-0,50	
31	LwK 2.9	101,10	0,393	0,14	0,73	
35	LwK 2.9	100,90	0,193	0,07	0,36	
37	LwK 2.2	99,30	-1,407	-0,49	-2,63	
38	LwK 2.9	101,45	0,743	0,26	1,39	
39	LwK 2.4	101,30	0,593	0,21	1,11	
40	LwK 2.4	101,40	0,693	0,24	1,30	
41	LwK 2.9	101,13	0,423	0,15	0,79	
42	LwK 2.4	100,80	0,093	0,03	0,17	
43	LwK 2.9	101,20	0,493	0,17	0,92	
44	LwK 2.1	100,40	-0,307	-0,11	-0,57	
45	LwK 2.9	99,80	-0,907	-0,32	-1,70	
46	LwK 2.5	100,70	-0,007	-0,00	-0,01	
48	LwK 2.4	100,60	-0,107	-0,04	-0,20	
49	LwK 2.4	101,50	0,793	0,28	1,48	
50	LwK 2.9	101,30	0,593	0,21	1,11	
52	LwK 2.9	101,80	1,093	0,38	2,04	
53	LwK 2.9	101,66	0,953	0,33	1,78	
55	LwK 2.1	100,52	-0,187	-0,07	-0,35	
56	LwK 2.9	101,10	0,393	0,14	0,73	
59	LwK 2.9	101,84	1,133	0,40	2,12	
60	LwK 2.1	99,20	-1,507	-0,53	-2,82	
61	LwK 2.9	101,20	0,493	0,17	0,92	
63	LwK 2.9	101,91	1,203	0,42	2,25	
65	LwK 2.5	101,38	0,673	0,24	1,26	
66	LwK 2.5	101,49	0,783	0,28	1,46	
70	LwK 2.9	102,23	1,523	0,54	2,85	
74	LwK 2.1	100,71	0,000	0,00	0,00	
75	LwK 2.9	102,00	1,293	0,45	2,42	
81	LwK 2.4	101,70	0,993	0,35	1,86	
82	LwK 2.1	99,50	-1,207	-0,42	-2,26	
83	LwK 2.2	102,90	2,193	0,77	4,10	
85	LwK 2.3	101,00	0,293	0,10	0,55	
86	LwK 2.9	101,60	0,893	0,31	1,67	
87	LwK 2.9	101,34	0,631	0,22	1,18	
92	LwK 2.4	100,86	0,153	0,05	0,29	
93	LwK 2.1	100,60	-0,107	-0,04	-0,20	
97	LwK 2.1	100,90	0,193	0,07	0,36	
99	LwK 2.9	100,89	0,183	0,06	0,34	
102	LwK 2.9	101,00	0,293	0,10	0,55	

**Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
103	LwK 2.4	100,59	-0,117	-0,04	-0,22	
106	LwK 2.5	101,11	0,403	0,14	0,75	
107	LwK 2.4	100,58	-0,127	-0,04	-0,24	
108	LwK 2.9	102,10	1,393	0,49	2,60	
111	NMR	100,35	-0,354	-0,12	-0,66	
112	NMR	96,53	-4,176	-1,47	-7,81	(**)
113	NMR	100,81	0,105	0,04	0,20	
114	NMR	94,66	-6,049	-2,13	-11,31	(**)
116	NMR	100,58	-0,124	-0,04	-0,23	

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

**4.2.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	100,30	-0,407	-0,14	-0,46	
202	LwK 2.8	102,80	2,093	0,74	2,36	
203	LwK 2.8	100,37	-0,337	-0,12	-0,38	
204	LwK 2.8	101,10	0,395	0,14	0,45	
205	LwK 2.8	100,50	-0,207	-0,07	-0,23	
206	LwK 2.8	101,29	0,583	0,20	0,66	
207	LwK 2.8	99,60	-1,107	-0,39	-1,25	
208	LwK 2.8	100,30	-0,407	-0,14	-0,46	
209	LwK 2.8	101,00	0,293	0,10	0,33	
210	LwK 2.8	99,00	-1,707	-0,60	-1,93	
211	LwK 2.8	99,50	-1,207	-0,42	-1,36	
212	LwK 2.8	102,60	1,893	0,67	2,14	
214	LwK 2.8	102,40	1,693	0,59	1,91	
215	LwK 2.8	99,90	-0,807	-0,28	-0,91	
216	LwK 2.8	102,78	2,073	0,73	2,34	
217	LwK 2.8	101,90	1,193	0,42	1,35	
218	LwK 2.8	101,40	0,693	0,24	0,78	
219	LwK 2.8	102,10	1,393	0,49	1,57	
220	LwK 2.8	101,10	0,393	0,14	0,44	
221	LwK 2.8	100,80	0,093	0,03	0,10	
222	LwK 2.8	101,50	0,793	0,28	0,90	
223	LwK 2.8	101,60	0,893	0,31	1,01	
224	LwK 2.8	99,74	-0,967	-0,34	-1,09	
225	LwK 2.8	102,32	1,613	0,57	1,82	
226	LwK 2.8	99,50	-1,207	-0,42	-1,36	
227	LwK 2.8	101,24	0,533	0,19	0,60	
228	LwK 2.8	100,30	-0,407	-0,14	-0,46	
229	LwK 2.8	100,76	0,053	0,02	0,06	
231	LwK 2.8	99,80	-0,907	-0,32	-1,02	
232	LwK 2.8	100,50	-0,207	-0,07	-0,23	
234	LwK 2.8	102,70	1,993	0,70	2,25	
235	LwK 2.8	100,50	-0,207	-0,07	-0,23	
236	LwK 2.8	102,10	1,393	0,49	1,57	
237	LwK 2.8	99,43	-1,277	-0,45	-1,44	
240	LwK 2.8	102,20	1,493	0,52	1,69	
241	LwK 2.8	101,00	0,293	0,10	0,33	
242	LwK 2.8	100,56	-0,147	-0,05	-0,17	
243	LwK 2.8	100,30	-0,407	-0,14	-0,46	
244	LwK 2.8	101,87	1,163	0,41	1,31	
245	LwK 2.8	101,60	0,893	0,31	1,01	
246	LwK 2.8	101,10	0,393	0,14	0,44	
247	LwK 2.8	101,09	0,383	0,13	0,43	
248	LwK 2.8	100,50	-0,207	-0,07	-0,23	
249	LwK 2.8	100,90	0,193	0,07	0,22	
250	LwK 2.8	101,21	0,503	0,18	0,57	
251	LwK 2.8	100,40	-0,307	-0,11	-0,35	
252	LwK 2.8	101,50	0,793	0,28	0,90	
254	LwK 2.8	101,00	0,293	0,10	0,33	
255	LwK 2.8	101,10	0,393	0,14	0,44	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
256	LwK 2.8	99,50	-1,207	-0,42	-1,36	
257	LwK 2.8	100,40	-0,307	-0,11	-0,35	
258	LwK 2.8	102,30	1,593	0,56	1,80	
259	LwK 2.8	101,68	0,973	0,34	1,10	
260	LwK 2.8	99,90	-0,807	-0,28	-0,91	
261	LwK 2.8	101,00	0,293	0,10	0,33	
262	LwK 2.8	100,20	-0,507	-0,18	-0,57	
263	LwK 2.8	103,50	2,793	0,98	3,15	
264	LwK 2.8	103,50	2,793	0,98	3,15	
265	LwK 2.8	100,30	-0,407	-0,14	-0,46	
266	LwK 2.8	101,49	0,783	0,28	0,88	
267	LwK 2.8	100,70	-0,007	-0,00	-0,01	
268	LwK 2.8	101,38	0,673	0,24	0,76	
269	LwK 2.8	100,10	-0,607	-0,21	-0,69	
270	LwK 2.8	100,90	0,193	0,07	0,22	
271	LwK 2.8	102,24	1,533	0,54	1,73	
272	LwK 2.8	100,80	0,093	0,03	0,10	
273	LwK 2.8	100,79	0,083	0,03	0,09	
275	LwK 2.8	101,00	0,293	0,10	0,33	
276	LwK 2.8	99,50	-1,207	-0,42	-1,36	
277	LwK 2.8	99,76	-0,947	-0,33	-1,07	
278	LwK 2.8	101,29	0,583	0,20	0,66	
279	LwK 2.8	103,00	2,293	0,81	2,59	
280	LwK 2.8	99,50	-1,207	-0,42	-1,36	
281	LwK 2.8	101,58	0,868	0,31	0,98	
282	LwK 2.8	100,80	0,093	0,03	0,10	
283	LwK 2.8	98,86	-1,847	-0,65	-2,08	
284	LwK 2.8	102,70	1,993	0,70	2,25	
285	LwK 2.8	101,30	0,593	0,21	0,67	
287	LwK 2.8	100,80	0,093	0,03	0,10	
288	LwK 2.8	101,37	0,663	0,23	0,75	
311	LwK 2.8	101,30	0,593	0,21	0,67	
320	LwK 2.8	99,40	-1,307	-0,46	-1,48	
337	LwK 2.8	99,27	-1,437	-0,51	-1,62	
365	LwK 2.8	100,80	0,093	0,03	0,10	

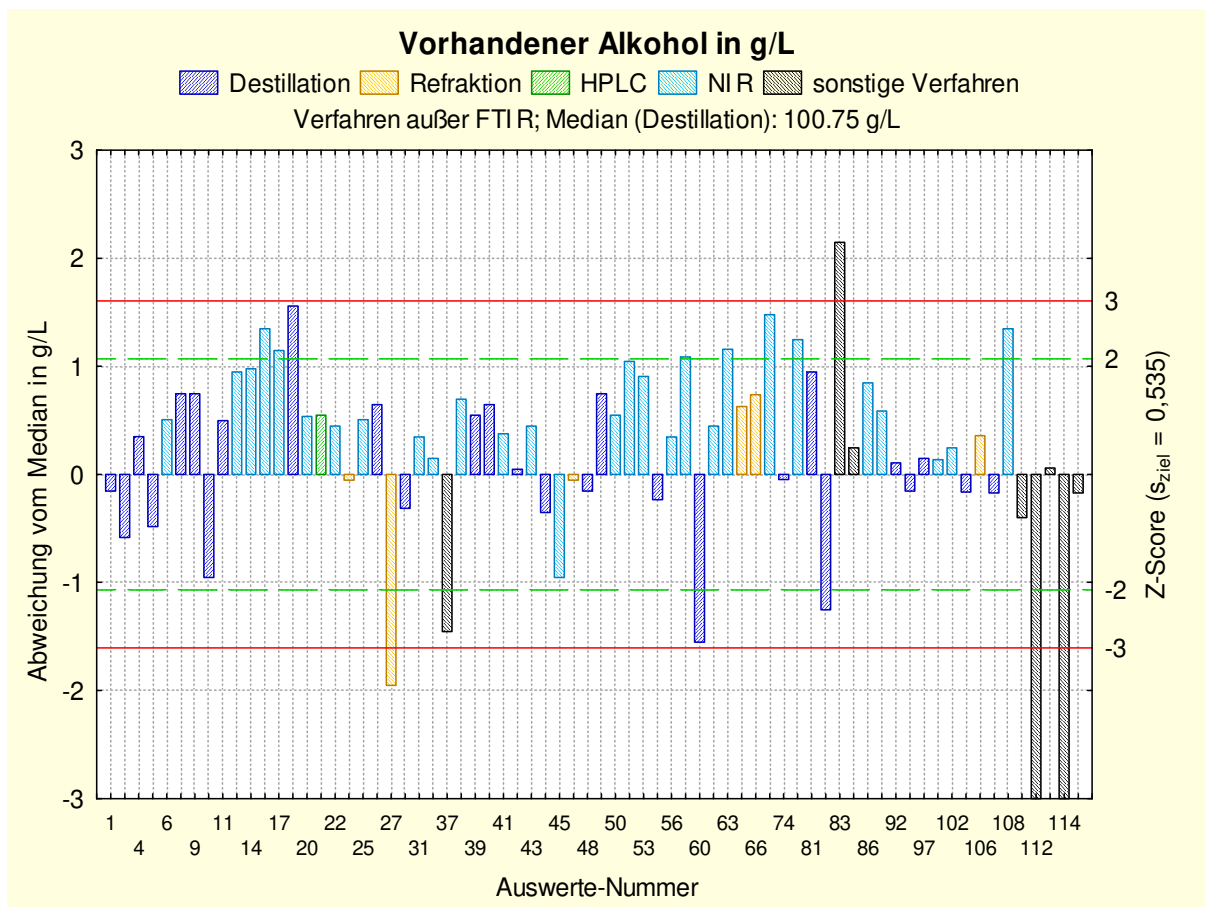
Rot markierte Werte wurden mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet

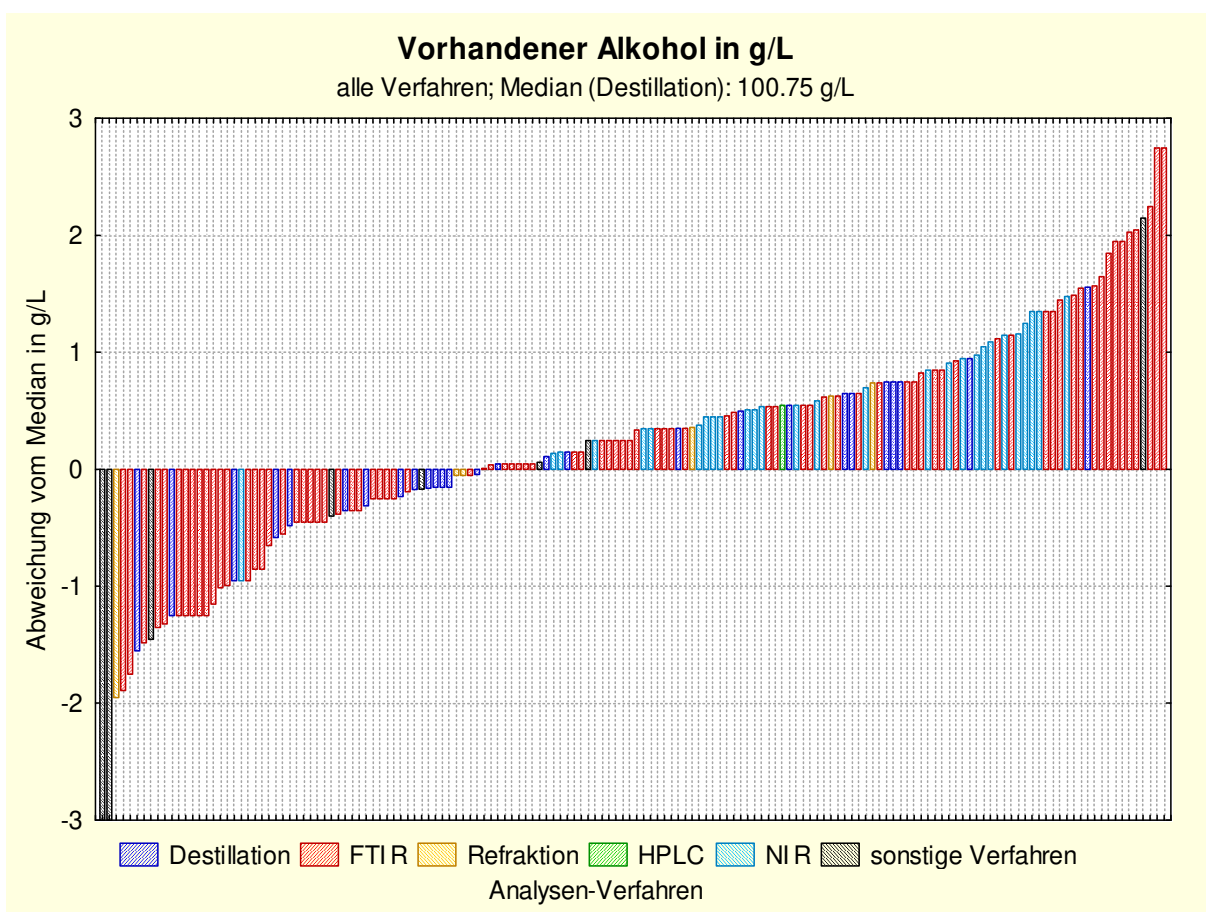
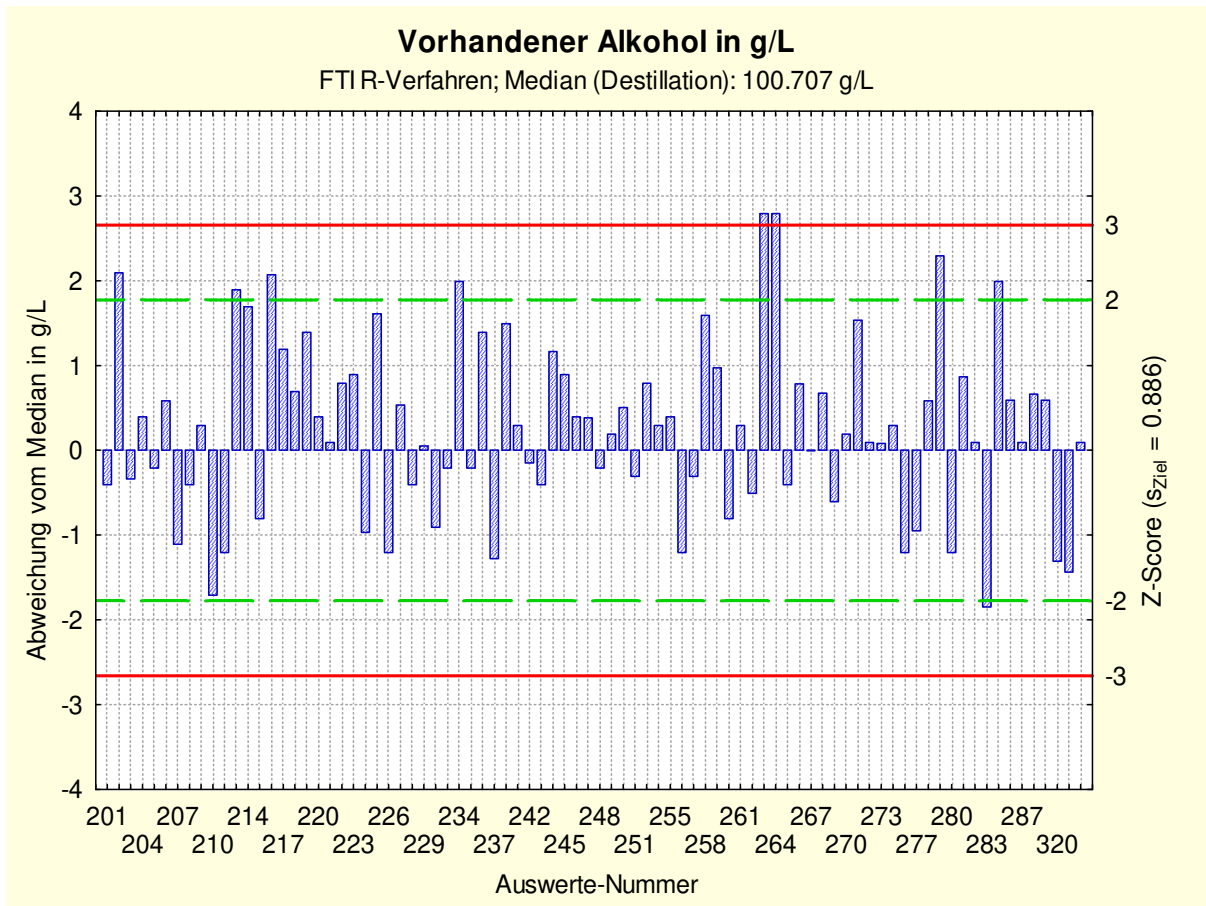
**4.2.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	27
Minimalwert	99,20
Mittelwert	100,796
Median	100,707
Maximalwert	102,31
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,689
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,133
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,845
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,24
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,29
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,78
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,05
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,25
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,15

**4.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	14	100,612	0,782
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	13	100,975	0,584
	Destillationsverfahren	27	100,814	0,650
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	101,100	2,887
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr.Rebelein	1	101,000	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	100,873	0,677
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	1	101,300	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	100,957	1,056
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	28	101,456	0,455
NMR	<sup>1</sup> H- Kernresonanzspektroskopie	5	98,790	3,012





### 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	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
02	Lwk 3.3	20,70	-0,55	-0,72	-0,93	
05	Lwk 3.3	20,85	-0,40	-0,53	-0,67	
06	Lwk 3.3	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
08	LwK 3.1	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
09	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
10	Lwk 3.3	20,70	-0,55	-0,72	-0,93	
11	LwK 3.2	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
12	Lwk 3.3	21,30	0,05	0,07	0,08	
14	Lwk 3.3	22,20	0,95	1,25	1,60	
15	Lwk 3.3	21,70	0,45	0,59	0,76	
17	Lwk 3.3	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
18	Lwk 3.3	21,50	0,25	0,33	0,42	
20	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
21	Lwk 3.3	18,70	-2,55	-3,36	-4,29	
22	Lwk 3.3	21,40	0,15	0,20	0,25	
23	Lwk 3.3	20,90	-0,35	-0,46	-0,59	
25	Lwk 3.3	21,30	0,05	0,07	0,08	
26	Lwk 3.3	21,09	-0,16	-0,21	-0,26	
27	Lwk 3.3	20,50	-0,75	-0,99	-1,26	
29	LwK 3.2	20,90	-0,35	-0,46	-0,59	
31	Lwk 3.3	21,40	0,15	0,20	0,25	
35	Lwk 3.3	21,50	0,25	0,33	0,42	
37	Lwk 3.3	20,10	-1,15	-1,52	-1,94	
38	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
39	Lwk 3.3	21,30	0,05	0,07	0,08	
40	Lwk 3.3	20,90	-0,35	-0,46	-0,59	
41	Lwk 3.3	21,30	0,05	0,07	0,08	
42	Lwk 3.3	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
43	Lwk 3.3	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
44	Lwk 3.3	21,00	-0,25	-0,33	-0,42	
45	Lwk 3.3	20,40	-0,85	-1,12	-1,43	
48	Lwk 3.3	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
49	Lwk 3.3	21,50	0,25	0,33	0,42	
50	Lwk 3.3	21,30	0,05	0,07	0,08	
52	Lwk 3.3	21,50	0,25	0,33	0,42	
53	Lwk 3.3	21,70	0,45	0,59	0,76	
55	Lwk 3.3	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
56	Lwk 3.3	21,00	-0,25	-0,33	-0,42	
59	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
60	LwK 3.2	20,60	-0,65	-0,86	-1,09	
61	Lwk 3.3	21,40	0,15	0,20	0,25	
63	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
75	Lwk 3.3	21,80	0,55	0,72	0,93	
81	Lwk 3.3	21,00	-0,25	-0,33	-0,42	
82	LwK 3.2	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
83	Lwk 3.3	21,90	0,65	0,86	1,09	
85	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
86	Lwk 3.3	21,50	0,25	0,33	0,42	
108	Lwk 3.3	22,40	1,15	1,52	1,94	

#### 4.3.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	21,11	-0,14	-0,18	-0,24	
202	FTIR (gemessen)	21,10	-0,15	-0,20	-0,25	
203	FTIR (gemessen)	22,75	1,50	1,98	2,53	
205	FTIR (gemessen)	20,28	-0,97	-1,28	-1,63	
208	FTIR (gemessen)	22,00	0,75	0,99	1,26	
210	FTIR (gemessen)	21,40	0,15	0,20	0,25	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
214	k. A.	21,60	0,35	0,46	0,59	
215	FTIR (gemessen)	20,60	-0,65	-0,86	-1,09	
216	FTIR (gemessen)	21,89	0,64	0,84	1,08	
217	FTIR (gemessen)	21,90	0,65	0,86	1,09	
218	FTIR (gemessen)	22,16	0,91	1,20	1,53	
220	FTIR (gemessen)	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
221	FTIR (gemessen)	24,60	3,35	4,41	5,64	(**)
223	Lwk 3.3 (herk.)	22,00	0,75	0,99	1,26	
227	FTIR (gemessen)	21,66	0,41	0,54	0,69	
229	FTIR (gemessen)	22,09	0,84	1,11	1,41	
232	k. A.	21,86	0,61	0,80	1,03	
236	Lwk 3.3	21,60	0,35	0,46	0,59	
237	FTIR (gemessen)	21,87	0,62	0,82	1,04	
240	FTIR (gemessen)	21,70	0,45	0,59	0,76	
244	FTIR (gemessen)	22,84	1,59	2,10	2,68	
247	FTIR (gemessen)	21,43	0,18	0,24	0,30	
251	FTIR (gemessen)	22,10	0,85	1,12	1,43	
252	dens/FTIR	21,60	0,35	0,46	0,59	
254	FTIR (gemessen)	21,70	0,45	0,59	0,76	
255	FTIR (gemessen)	22,30	1,05	1,38	1,77	
258	Lwk 3.3	20,20	-1,05	-1,38	-1,77	
259	Lwk 3.3	22,50	1,25	1,65	2,10	
260	FTIR-Basis	21,40	0,15	0,20	0,25	
262	FTIR (gemessen)	21,90	0,65	0,86	1,09	
263	FTIR (gemessen)	22,20	0,95	1,25	1,60	
264	FTIR (gemessen)	20,50	-0,75	-0,99	-1,26	
265	FTIR (gemessen)	21,80	0,55	0,72	0,93	
268	FTIR (gemessen)	22,12	0,87	1,15	1,46	
269	FTIR (gemessen)	22,10	0,85	1,12	1,43	
270	FTIR (gemessen)	22,80	1,55	2,04	2,61	
271	FTIR (gemessen)	20,88	-0,37	-0,49	-0,62	
272	FTIR (gemessen)	20,80	-0,45	-0,59	-0,76	
273	k. A.	21,40	0,15	0,20	0,25	
275	FTIR (gemessen)	22,90	1,65	2,17	2,78	
279	FTIR (gemessen)	22,30	1,05	1,38	1,77	
280	k. A.	23,00	1,75	2,31	2,95	
282	FTIR (gemessen)	21,90	0,65	0,86	1,09	
283	FTIR (gemessen)	18,90	-2,35	-3,10	-3,96	
284	FTIR (gemessen)	21,70	0,45	0,59	0,76	
285	FTIR (gemessen)	21,20	-0,05	-0,07	-0,08	
287	FTIR (gemessen)	24,30	3,05	4,02	5,13	(**)
288	k. A.	25,70	4,45	5,86	7,49	(**)
320	FTIR (gemessen)	21,00	-0,25	-0,33	-0,42	
337	FTIR (gemessen)	21,92	0,67	0,88	1,13	

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

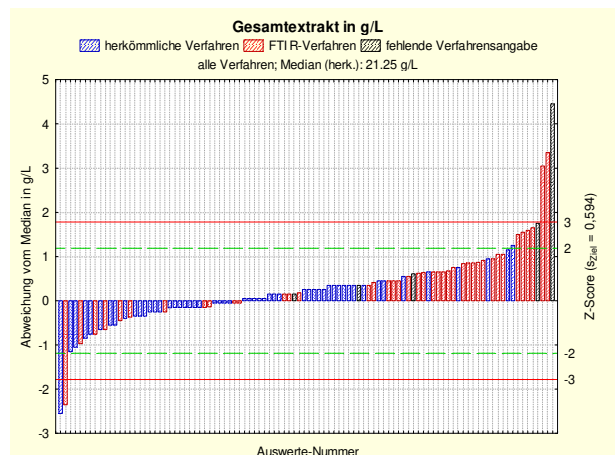
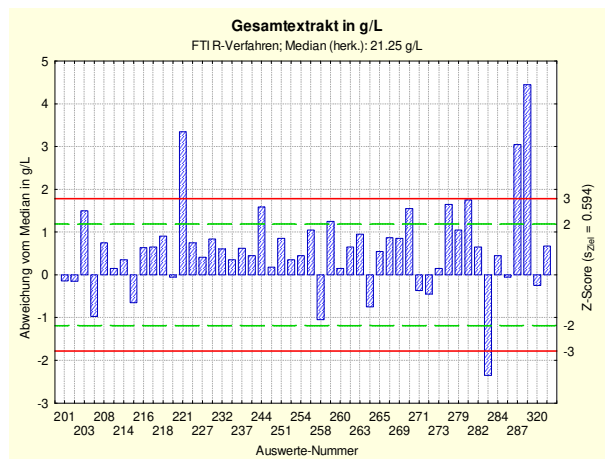
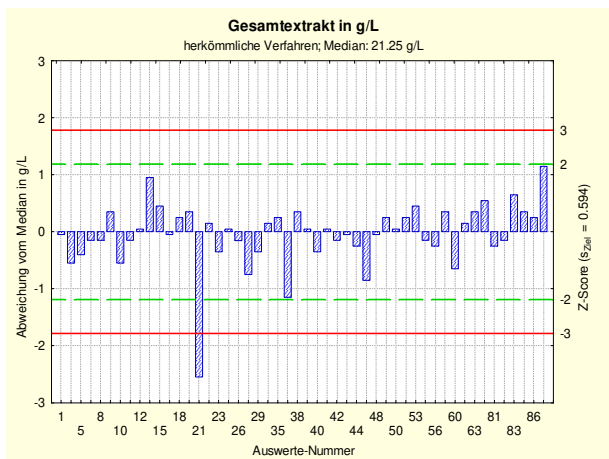
**4.3.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	50
Minimalwert	18,7
Mittelwert	21,20
Median	21,25
Maximalwert	22,4
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,561
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,079
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,759
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,565)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,74
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,94
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,99)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,13
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,14)

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

**4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	21,100	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	5	20,984	0,262
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	44	21,281	0,415
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	39	21,778	0,769
dens/FTIR	Berechnung nach Tabarie auf Basis densitometr. Dichte + FTIR-Alkohol	1	21,600	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	1	21,400	
k. A.	keine Verfahrensangabe	5	22,688	2,014





## 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
01	LwK 4.5	2,62	0,025	0,20	0,22	
02	LwK 4.5	2,64	0,045	0,35	0,40	
05	LwK 4.5	2,66	0,065	0,51	0,58	
06	LwK 4.5	2,52	-0,075	-0,59	-0,66	
08	LwK 4.5	2,54	-0,055	-0,43	-0,49	
09	LwK 4.7	2,63	0,035	0,28	0,31	
10	LwK 4.1	2,00	-0,595	-4,68	-5,27	(***)
11	LwK 4.7	2,60	0,005	0,04	0,04	
12	LwK 4.5	2,60	0,005	0,04	0,04	
14	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
15	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
18	LwK 4.5	2,54	-0,055	-0,43	-0,49	
20	LwK 4.7	2,64	0,045	0,35	0,40	
21	LwK 4.7	2,59	-0,005	-0,04	-0,04	
22	LwK 4.7	2,70	0,105	0,83	0,93	
23	LwK 4.4	3,10	0,505	3,97	4,47	
25	LwK 4.5	2,52	-0,075	-0,59	-0,66	
26	LwK 4.7	3,05	0,455	3,58	4,03	
27	LwK 4.4	3,00	0,405	3,18	3,59	
29	LwK 4.5	3,07	0,475	3,74	4,20	
31	LwK 4.5	2,40	-0,195	-1,53	-1,73	
35	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
37	LwK 4.3	2,63	0,035	0,28	0,31	
38	LwK 4.5	3,16	0,565	4,44	5,00	
39	LwK 4.7	2,62	0,025	0,20	0,22	
40	LwK 4.5	2,70	0,106	0,83	0,94	
41	LwK 4.5	2,41	-0,185	-1,45	-1,64	
42	LwK 4.5	2,58	-0,020	-0,16	-0,18	
43	LwK 4.4	2,90	0,305	2,40	2,70	
44	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
45	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
48	LwK 4.5	2,47	-0,125	-0,98	-1,11	
49	LwK 4.4	3,20	0,605	4,76	5,36	(***)
50	LwK 4.5	2,64	0,045	0,35	0,40	
52	LwK 4.5	2,50	-0,095	-0,75	-0,84	
53	LwK 4.5	2,60	0,005	0,04	0,04	
55	LwK 4.5	2,24	-0,355	-2,79	-3,14	
56	LwK 4.5	2,63	0,035	0,28	0,31	
59	LwK 4.7	3,01	0,415	3,26	3,67	
60	LwK 4.4	3,25	0,655	5,15	5,80	(***)
61	LwK 4.5	2,40	-0,195	-1,53	-1,73	
63	LwK 4.5	2,56	-0,035	-0,28	-0,31	
65	LwK 4.4	2,70	0,105	0,83	0,93	
70	LwK 4.5	2,63	0,035	0,28	0,31	
74	LwK 4.4	4,15	1,555	12,23	13,77	(*)
75	LwK 4.4	3,00	0,405	3,18	3,59	
80	LwK 4.4	3,20	0,605	4,76	5,36	(***)
81	LwK 4.7	3,10	0,505	3,97	4,47	
82	LwK 4.5	3,75	1,155	9,08	10,22	(**)
83	LwK 4.3	2,76	0,165	1,30	1,46	
85	LwK 4.4	2,40	-0,195	-1,53	-1,73	
86	LwK 4.4	2,80	0,205	1,61	1,81	
97	LwK 4.7	2,25	-0,341	-2,68	-3,02	
106	LwK 4.4	2,20	-0,395	-3,11	-3,50	
108	LwK 4.4	2,90	0,305	2,40	2,70	
111	NMR	1,97	-0,625	-4,92	-5,54	(***)
112	NMR	2,13	-0,464	-3,65	-4,11	
113	NMR	2,22	-0,375	-2,95	-3,32	
114	NMR	2,20	-0,393	-3,09	-3,48	
115	NMR	3,11	0,515	4,05	4,56	
116	NMR	2,24	-0,359	-2,82	-3,18	

Erläuterungen zu dieser Tabelle folgen am Fuß der folgenden Tabelle

**4.4.2 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	2,55	-0,050	-0,39	-0,09	
205	LwK 4.8	1,96	-0,640	-5,02	-1,10	
206	LwK 4.8	2,33	-0,270	-2,12	-0,46	
207	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
208	LwK 4.8	2,47	-0,130	-1,02	-0,22	
209	LwK 4.8	2,20	-0,400	-3,14	-0,68	
210	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
211	LwK 4.8	3,21	0,610	4,79	1,04	
212	LwK 4.8	2,92	0,320	2,51	0,55	
214	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
215	LwK 4.8	1,90	-0,700	-5,50	-1,20	
216	LwK 4.8	3,27	0,670	5,26	1,15	
217	LwK 4.8	1,17	-1,430	-11,23	-2,45	
219	LwK 4.8	3,80	1,200	9,42	2,05	
220	LwK 4.8	3,56	0,960	7,54	1,64	
222	LwK 4.8	2,94	0,340	2,67	0,58	
223	LwK 4.8	3,20	0,600	4,71	1,03	
224	LwK 4.8	3,60	1,000	7,85	1,71	
225	LwK 4.8	3,16	0,560	4,40	0,96	
226	LwK 4.8	2,30	-0,300	-2,36	-0,51	
227	LwK 4.8	3,38	0,780	6,12	1,34	
228	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
229	LwK 4.8	2,90	0,300	2,36	0,51	
231	LwK 4.8	3,60	1,000	7,85	1,71	
232	LwK 4.8	1,77	-0,830	-6,52	-1,42	
234	LwK 4.8	2,60	0,000	0,00	0,00	
235	LwK 4.8	2,50	-0,100	-0,79	-0,17	
236	LwK 4.8	2,10	-0,500	-3,93	-0,86	
237	LwK 4.8	2,56	-0,040	-0,31	-0,07	
240	LwK 4.8	3,41	0,810	6,36	1,39	
241	LwK 4.8	0,50	-2,100	-16,49	-3,60	
242	LwK 4.8	2,89	0,290	2,28	0,50	
243	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
244	LwK 4.8	2,89	0,290	2,28	0,50	
245	LwK 4.8	3,71	1,110	8,71	1,90	
246	LwK 4.8	1,80	-0,800	-6,28	-1,37	
247	LwK 4.8	3,01	0,410	3,22	0,70	
248	LwK 4.8	2,34	-0,260	-2,04	-0,45	
249	LwK 4.8	3,70	1,100	8,64	1,88	
250	LwK 4.8	2,22	-0,380	-2,98	-0,65	
251	LwK 4.8	1,92	-0,680	-5,34	-1,16	
252	LwK 4.8	3,02	0,420	3,30	0,72	
254	LwK 4.8	3,60	1,000	7,85	1,71	
255	LwK 4.8	2,50	-0,100	-0,79	-0,17	
256	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
257	LwK 4.8	3,46	0,860	6,75	1,47	
258	LwK 4.8	3,53	0,930	7,30	1,59	
259	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
260	LwK 4.8	2,60	0,000	0,00	0,00	
261	LwK 4.8	1,60	-1,000	-7,85	-1,71	
262	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
263	LwK 4.8	2,54	-0,060	-0,47	-0,10	
264	LwK 4.8	1,50	-1,100	-8,64	-1,88	
265	LwK 4.8	1,80	-0,800	-6,28	-1,37	
266	LwK 4.8	2,13	-0,470	-3,69	-0,80	
267	LwK 4.8	2,10	-0,500	-3,93	-0,86	
268	LwK 4.8	3,10	0,500	3,93	0,86	
269	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
270	LwK 4.8	3,41	0,810	6,36	1,39	
271	LwK 4.8	1,82	-0,780	-6,12	-1,34	
272	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
273	LwK 4.8	2,52	-0,080	-0,63	-0,14	
275	LwK 4.8	3,22	0,620	4,87	1,06	
276	LwK 4.8	2,90	0,300	2,36	0,51	
277	LwK 4.8	3,27	0,670	5,26	1,15	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
279	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
280	LwK 4.8	1,66	-0,940	-7,38	-1,61	
281	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
282	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
283	LwK 4.8	2,00	-0,600	-4,71	-1,03	
284	LwK 4.8	2,50	-0,100	-0,79	-0,17	
285	LwK 4.8	24,20	21,600	169,58	36,99	(*)
320	LwK 4.8	1,58	-1,020	-8,01	-1,75	
337	LwK 4.8	2,59	-0,010	-0,08	-0,02	
365	LwK 4.8	2,10	-0,500	-3,93	-0,86	

Erläuterungen zu den Tabellen der Abschnitte 4.4.1 und 4.4.2:

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

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

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

**4.4.3 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	2,58	-0,020	-0,16	-0,03	
202	LwK 4.8	2,54	-0,055	-0,43	-0,09	
203	LwK 4.8	2,81	0,210	1,65	0,36	
204	LwK 4.8	1,65	-0,950	-7,46	-1,63	
205	LwK 4.8	1,96	-0,640	-5,02	-1,10	
207	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
208	LwK 4.8	2,47	-0,130	-1,02	-0,22	
209	LwK 4.8	2,20	-0,400	-3,14	-0,68	
210	LwK 4.8	2,90	0,300	2,36	0,51	
211	LwK 4.8	2,80	0,200	1,57	0,34	
212	LwK 4.8	3,50	0,900	7,07	1,54	
214	LwK 4.8	2,60	0,000	0,00	0,00	
215	LwK 4.8	1,90	-0,700	-5,50	-1,20	
216	LwK 4.8	1,29	-1,310	-10,28	-2,24	
217	LwK 4.8	3,16	0,560	4,40	0,96	
218	LwK 4.8	2,19	-0,410	-3,22	-0,70	
219	LwK 4.8	3,80	1,200	9,42	2,05	
220	LwK 4.8	1,96	-0,640	-5,02	-1,10	
221	LwK 4.8	3,43	0,830	6,52	1,42	
222	LwK 4.8	3,30	0,700	5,50	1,20	
223	LwK 4.8	3,60	1,000	7,85	1,71	
224	LwK 4.8	5,22	2,620	20,57	4,49	
225	LwK 4.8	3,16	0,560	4,40	0,96	
226	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
227	LwK 4.8	2,35	-0,250	-1,96	-0,43	
228	LwK 4.8	2,55	-0,050	-0,39	-0,09	
229	LwK 4.8	2,39	-0,210	-1,65	-0,36	
231	LwK 4.8	3,30	0,700	5,50	1,20	
232	LwK 4.8	1,58	-1,020	-8,01	-1,75	
234	LwK 4.8	2,96	0,360	2,83	0,62	
235	LwK 4.8	2,50	-0,100	-0,79	-0,17	
236	LwK 4.8	3,10	0,500	3,93	0,86	
237	LwK 4.8	4,53	1,930	15,15	3,30	
240	LwK 4.8	2,41	-0,190	-1,49	-0,33	
241	LwK 4.8	1,06	-1,540	-12,09	-2,64	
242	LwK 4.8	2,40	-0,200	-1,57	-0,34	
243	LwK 4.8	3,15	0,550	4,32	0,94	
244	LwK 4.8	2,84	0,240	1,88	0,41	
245	LwK 4.8	2,60	0,000	0,00	0,00	
246	LwK 4.8	1,80	-0,800	-6,28	-1,37	
247	LwK 4.8	2,99	0,390	3,06	0,67	
249	LwK 4.8	4,60	2,000	15,70	3,42	
251	LwK 4.8	1,92	-0,680	-5,34	-1,16	
252	LwK 4.8	3,02	0,420	3,30	0,72	
254	LwK 4.8	2,60	-0,000	-0,00	-0,00	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
256	LwK 4.8	2,80	0,200	1,57	0,34	
257	LwK 4.8	2,16	-0,440	-3,45	-0,75	
258	LwK 4.8	3,74	1,140	8,95	1,95	
259	LwK 4.8	1,80	-0,800	-6,28	-1,37	
260	LwK 4.8	2,20	-0,400	-3,14	-0,68	
261	LwK 4.8	3,50	0,900	7,07	1,54	
262	LwK 4.8	3,90	1,300	10,21	2,23	
263	LwK 4.8	2,85	0,250	1,96	0,43	
264	LwK 4.8	1,50	-1,100	-8,64	-1,88	
265	LwK 4.8	3,10	0,500	3,93	0,86	
266	LwK 4.8	2,13	-0,470	-3,69	-0,80	
267	LwK 4.8	2,60	0,000	0,00	0,00	
268	LwK 4.8	1,99	-0,610	-4,79	-1,04	
269	LwK 4.8	3,30	0,700	5,50	1,20	
271	LwK 4.8	2,23	-0,370	-2,90	-0,63	
272	LwK 4.8	2,63	0,030	0,24	0,05	
273	LwK 4.8	2,78	0,180	1,41	0,31	
275	LwK 4.8	3,05	0,450	3,53	0,77	
276	LwK 4.8	1,60	-1,000	-7,85	-1,71	
277	LwK 4.8	3,27	0,670	5,26	1,15	
278	LwK 4.8	2,81	0,210	1,65	0,36	
279	LwK 4.8	1,80	-0,800	-6,28	-1,37	
280	LwK 4.8	2,89	0,290	2,28	0,50	
281	LwK 4.8	3,51	0,910	7,14	1,56	
282	LwK 4.8	2,70	0,100	0,79	0,17	
284	LwK 4.8	2,50	-0,100	-0,79	-0,17	
285	LwK 4.8	5,78	3,180	24,97	5,45	(*)
287	LwK 4.8	2,51	-0,090	-0,71	-0,15	
288	LwK 4.8	3,00	0,400	3,14	0,68	
311	LwK 4.8	1,27	-1,330	-10,44	-2,28	
320	LwK 4.8	2,08	-0,520	-4,08	-0,89	
337	LwK 4.8	3,28	0,680	5,34	1,16	
365	LwK 4.8	3,10	0,500	3,93	0,86	

Die Werte dieser Tabelle wurden vom Auswerter aus den FTIR-Werten für Glucose und Fructose berechnet.  
 (\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab.

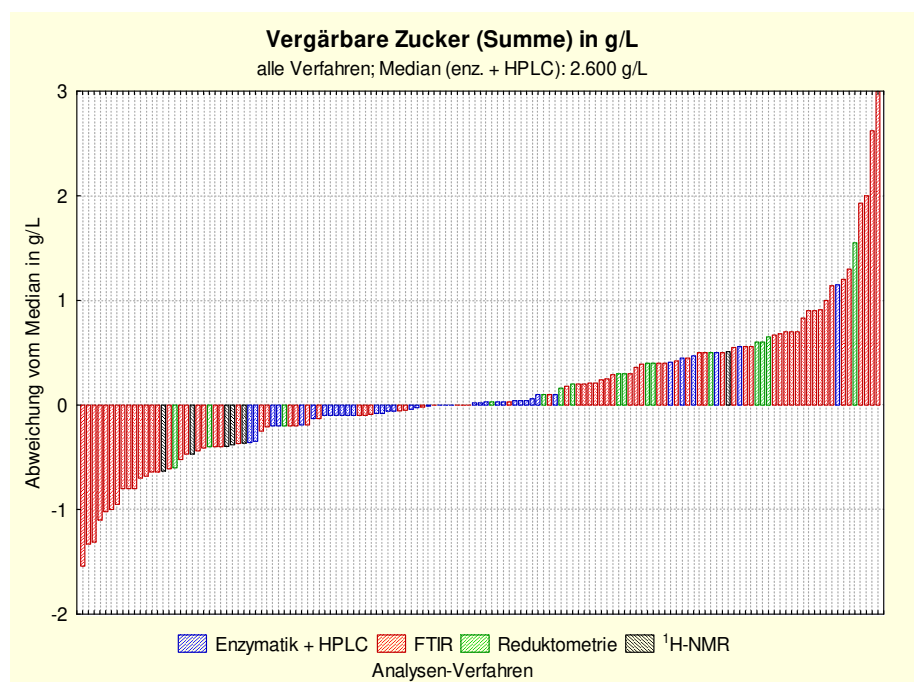
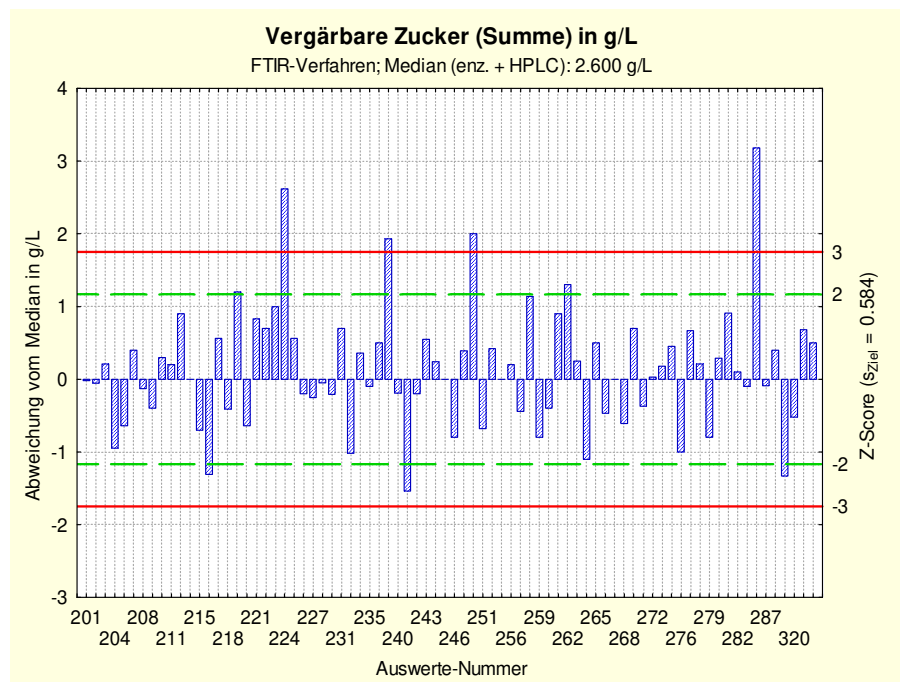
**4.4.4 Deskriptive Ergebnisse**

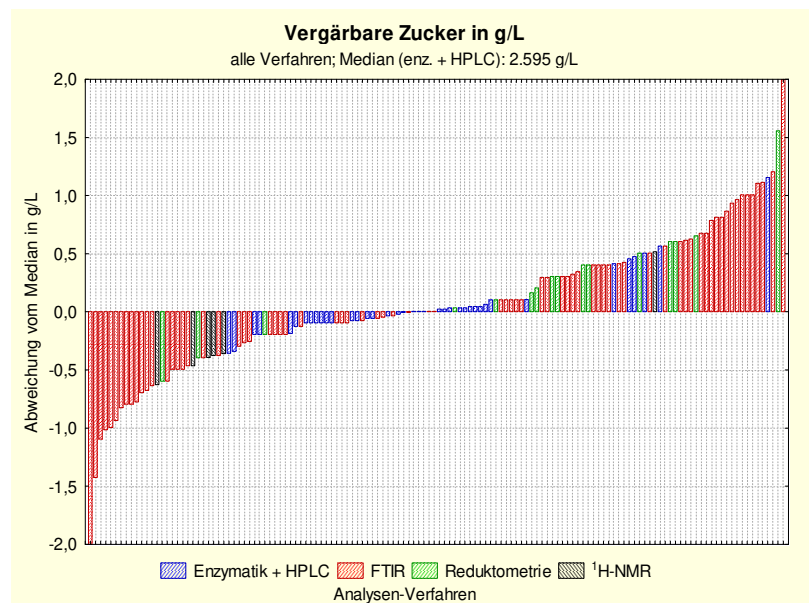
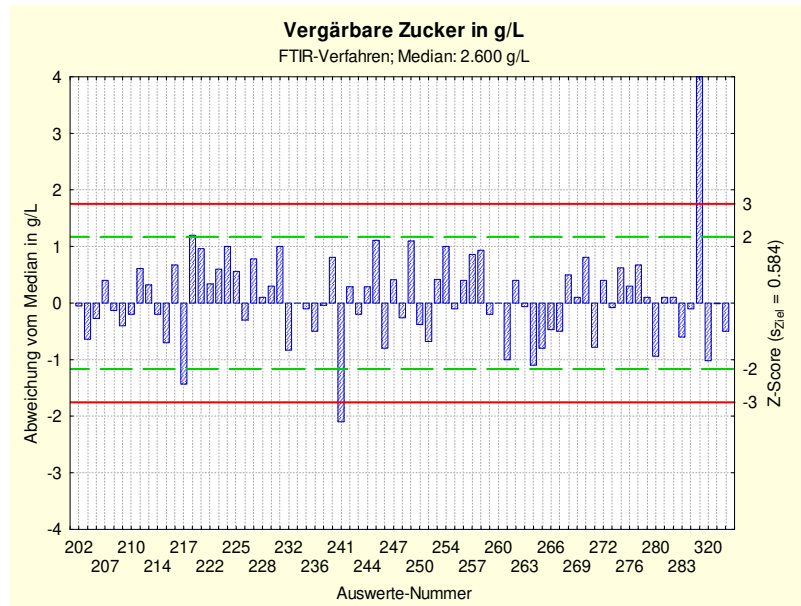
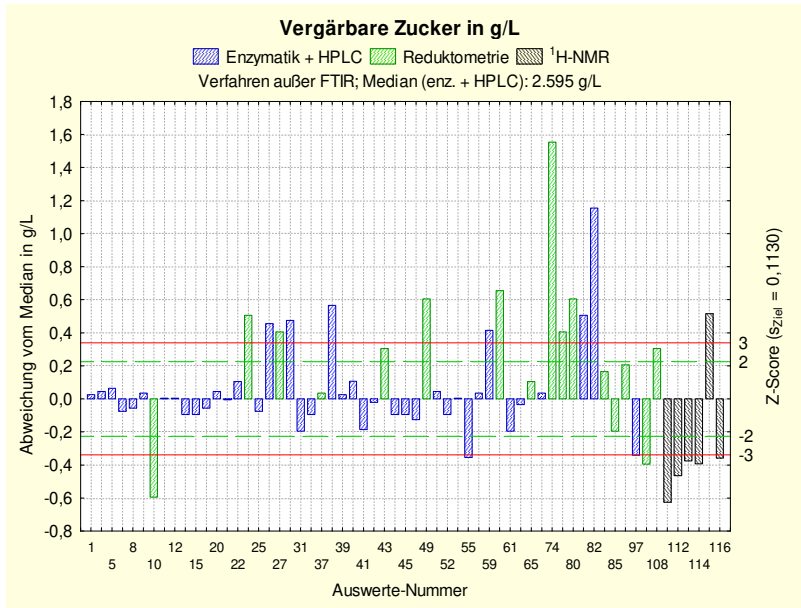
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L] nur enzymatische und HPLC-Verfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	39	38
Minimalwert	2,24	2,24
Mittelwert	2,643	2,614
Median	2,600	2,595
Maximalwert	3,75	3,16
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,276	0,211
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,044	0,034
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,127	0,127
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk_c}$ )	0,113	0,113
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	0,584	0,584
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,17	1,66
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk_c}$ )	2,44	1,87
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	0,47	0,36
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,35	0,27
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk_c}$ )	0,39	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	0,08	0,06

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

**4.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	2,000	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	2,695	0,104
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	13	2,952	0,357
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	29	2,560	0,114
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	2,717	0,269
	enzymatische und HPLC-Verfahren	39	2,590	0,140
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie Basis: Vergärbare Zucker(r) Basis: Vergärbare Zucker(S)	75	2,664	0,695
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,211	0,186





## 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	0,870	-0,005	-0,10	-0,08	
02	enzymat., autom.	0,990	0,115	2,28	1,73	
04	enzymat., autom.	0,910	0,035	0,69	0,53	
05	enzymat., autom.	0,900	0,025	0,50	0,38	
08	enzymat. Hand	0,880	0,005	0,10	0,08	
09	HPLC	0,990	0,115	2,28	1,73	
10	enzymat., autom.	0,770	-0,105	-2,08	-1,58	
11	HPLC	0,700	-0,175	-3,47	-2,63	
12	enzymat., autom.	0,800	-0,075	-1,49	-1,13	
14	enzymat., autom.	0,820	-0,055	-1,09	-0,83	
15	enzymat., autom.	0,900	0,025	0,50	0,38	
18	enzymat., autom.	0,880	0,005	0,10	0,08	
20	HPLC	0,660	-0,215	-4,26	-3,23	
21	HPLC	0,660	-0,215	-4,26	-3,23	
22	HPLC	0,700	-0,175	-3,47	-2,63	
25	enzymat., autom.	0,890	0,015	0,30	0,23	
26	HPLC	0,850	-0,025	-0,50	-0,38	
29	enzymat., autom.	0,770	-0,105	-2,08	-1,58	
31	enzymat., autom.	0,830	-0,045	-0,89	-0,68	
35	enzymat., autom.	0,800	-0,075	-1,49	-1,13	
38	enzymat., autom.	0,890	0,015	0,30	0,23	
39	HPLC	0,740	-0,135	-2,67	-2,03	
40	enzymat., autom.	0,868	-0,007	-0,14	-0,11	
41	enzymat., autom.	0,760	-0,115	-2,28	-1,73	
42	enzymat., autom.	0,885	0,010	0,20	0,15	
44	enzymat., autom.	0,860	-0,015	-0,30	-0,23	
45	enzymat., autom.	0,900	0,025	0,50	0,38	
48	enzymat., autom.	0,857	-0,018	-0,36	-0,27	
50	enzymat., autom.	0,920	0,045	0,89	0,68	
52	enzymat., autom.	0,880	0,005	0,10	0,08	
53	enzymat., autom.	0,870	-0,005	-0,10	-0,08	
56	enzymat., autom.	0,920	0,045	0,89	0,68	
59	HPLC	1,050	0,175	3,47	2,63	
61	HPLC	0,800	-0,075	-1,49	-1,13	
63	enzymat. Hand	0,908	0,033	0,65	0,50	
70	enzymat., autom.	0,920	0,045	0,89	0,68	
81	HPLC	1,100	0,225	4,46	3,38	
82	enzymat. Hand	1,550	0,675	13,37	10,15	(*)
89	HPLC	0,890	0,015	0,30	0,23	
97	HPLC	0,530	-0,345	-6,83	-5,19	(**)
111	NMR	< 0,5				
112	NMR	0,529	-0,346	-6,85	-5,20	(***)
113	NMR	0,559	-0,316	-6,25	-4,75	
114	NMR	< 0,5				
115	NMR	0,960	0,085	1,68	1,28	
116	NMR	< 0,5				

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

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

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

### 4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Keine Berechnung von Z-Scores, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereiches.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,850	-0,025			
202	FTIR	0,805	-0,070			
203	FTIR	0,780	-0,095			
204	FTIR	0,400	-0,475			(*)
205	FTIR	0,730	-0,145			

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
207	FTIR	1,400	0,525			(*)
208	FTIR	0,630	-0,245			
209	FTIR	0,900	0,025			
210	FTIR	0,700	-0,175			
211	FTIR	1,320	0,445			(*)
212	FTIR	1,180	0,305			
214	FTIR	1,100	0,225			
215	FTIR	0,700	-0,175			
216	FTIR	0,230	-0,645			(*)
217	FTIR	1,090	0,215			
218	FTIR	0,160	-0,715			(*)
219	FTIR	1,600	0,725			(*)
220	FTIR	0,320	-0,555			(*)
221	FTIR	1,240	0,365			
222	FTIR	0,600	-0,275			
223	FTIR	1,100	0,225			
224	FTIR	2,450	1,575			(*)
225	FTIR	1,290	0,415			
226	FTIR	0,900	0,025			
227	FTIR	1,090	0,215			
228	FTIR	0,930	0,055			
229	FTIR	0,590	-0,285			
231	FTIR	1,200	0,325			
232	FTIR	-0,190	-1,065			(*)
234	FTIR	1,010	0,135			
235	FTIR	0,900	0,025			
236	FTIR	1,400	0,525			(*)
237	FTIR	2,960	2,085			(*)
240	FTIR	0,830	-0,045			
241	FTIR	-0,040	-0,915			(*)
242	FTIR	0,400	-0,475			(*)
243	FTIR	0,940	0,065			
244	FTIR	0,560	-0,315			
245	FTIR	0,820	-0,055			
246	FTIR	0,100	-0,775			(*)
247	FTIR	1,100	0,225			
249	FTIR	1,800	0,925			(*)
250	FTIR	< 0,5				
251	FTIR	0,230	-0,645			(*)
252	FTIR	0,800	-0,075			
254	FTIR	1,400	0,525			(*)
256	FTIR	1,100	0,225			
257	FTIR	0,810	-0,065			
258	FTIR	1,370	0,495			(*)
259	FTIR	0,100	-0,775			(*)
260	FTIR	1,100	0,225			
261	FTIR	1,800	0,925			(*)
262	FTIR	1,800	0,925			(*)
263	FTIR	0,810	-0,065			
264	FTIR	0,400	-0,475			(*)
265	FTIR	0,900	0,025			
266	FTIR	0,360	-0,515			(*)
267	FTIR	0,600	-0,275			
268	FTIR	0,610	-0,265			
269	FTIR	0,800	-0,075			
271	FTIR	1,240	0,365			
272	FTIR	0,030	-0,845			(*)
273	FTIR	0,790	-0,085			
275	FTIR	0,270	-0,605			(*)
276	FTIR	0,500	-0,375			
277	FTIR	0,980	0,105			
278	FTIR	0,760	-0,115			
279	FTIR	0,100	-0,775			(*)
280	FTIR	1,760	0,885			(*)
281	FTIR	1,270	0,395			

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



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
282	FTIR	1,100	0,225			
284	FTIR	0,600	-0,275			
285	FTIR	3,200	2,325			(*)
287	FTIR	0,230	-0,645			(*)
288	FTIR	0,930	0,055			
311	FTIR	-0,260	-1,135			(*)
320	FTIR	0,270	-0,605			(*)
337	FTIR	0,540	-0,335			
365	FTIR	0,800	-0,075			

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

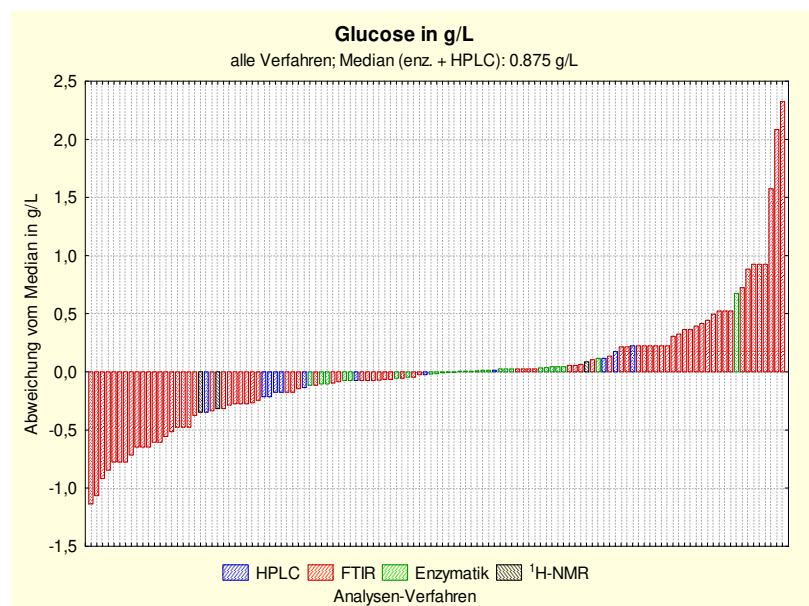
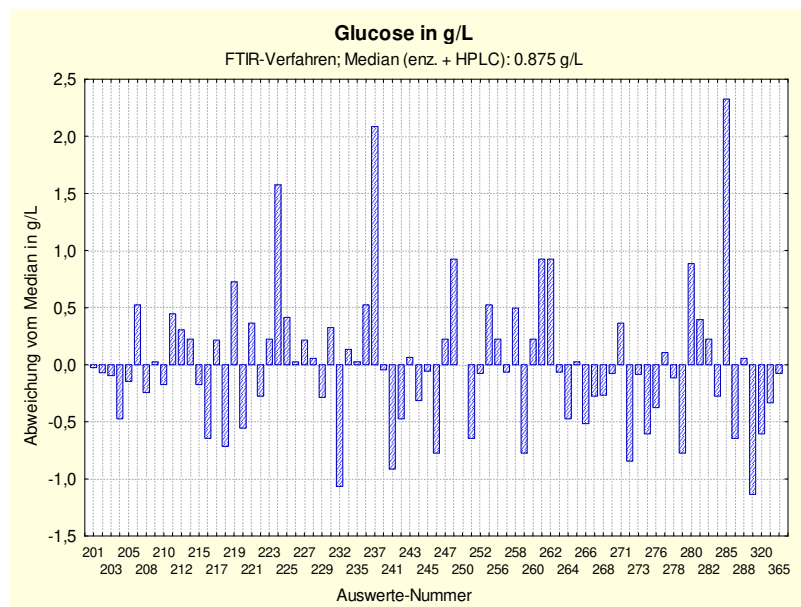
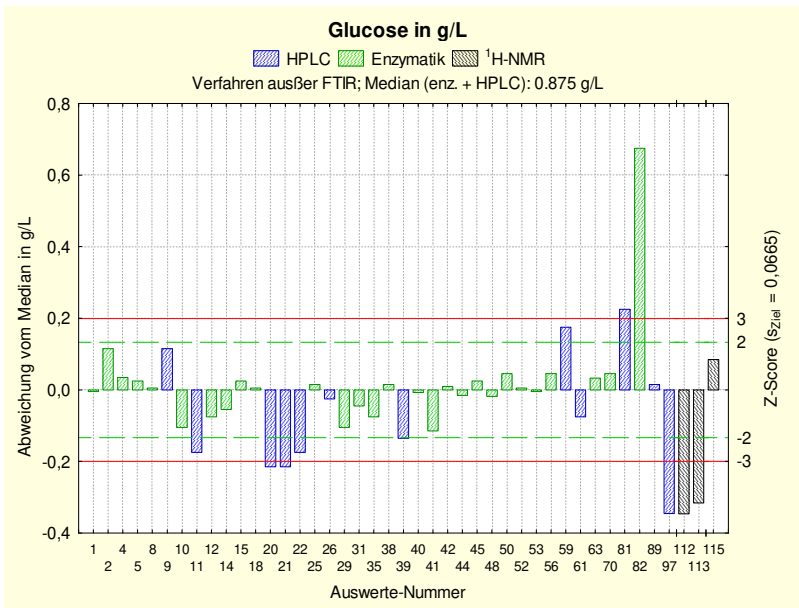
**4.5.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	39	38
Minimalwert	0,53	0,66
Mittelwert	0,849	0,858
Median	0,870	0,875
Maximalwert	1,10	1,10
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,108	0,096
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,017	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,050	0,051
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,066	0,067
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,408	0,408
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,15	1,89
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,62	1,44
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,26	0,24
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,34	0,31
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,26	0,23
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,04	0,04

<sup>\*)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden wegen Unterschreitung des Anwendungsbereiches nicht bewertet.

**4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	0,802	0,191
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	24	0,868	0,054
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	4	1,042	0,355
	herkömmliche Verfahren	40	0,858	0,092
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,837	0,508
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	3	0,661	0,230



## 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	1,75	0,050	0,56	0,56	
02	enzymat., autom.	1,66	-0,040	-0,45	-0,45	
04	enzymat., autom.	1,69	-0,010	-0,11	-0,11	
05	enzymat., autom.	1,75	0,050	0,56	0,56	
08	enzymat. Hand	1,66	-0,040	-0,45	-0,45	
09	HPLC	1,64	-0,060	-0,68	-0,68	
10	enzymat., autom.	1,50	-0,200	-2,25	-2,25	
11	HPLC	1,90	0,200	2,25	2,25	
12	enzymat., autom.	1,70	0,000	0,00	0,00	
14	enzymat., autom.	1,68	-0,020	-0,23	-0,23	
15	enzymat., autom.	1,70	0,000	0,00	0,00	
18	enzymat., autom.	1,66	-0,040	-0,45	-0,45	
20	HPLC	1,98	0,280	3,15	3,15	
21	HPLC	1,93	0,230	2,59	2,59	
22	HPLC	2,00	0,300	3,38	3,38	
25	enzymat., autom.	1,63	-0,070	-0,79	-0,79	
26	HPLC	2,20	0,500	5,63	5,63	(**)
29	enzymat., autom.	2,22	0,520	5,86	5,86	(**)
31	enzymat., autom.	1,61	-0,086	-0,97	-0,97	
35	enzymat., autom.	1,70	0,000	0,00	0,00	
38	enzymat., autom.	2,27	0,570	6,42	6,42	(**)
39	HPLC	1,88	0,180	2,03	2,03	
40	enzymat., autom.	1,84	0,140	1,58	1,58	
41	enzymat., autom.	1,66	-0,040	-0,45	-0,45	
42	enzymat., autom.	1,69	-0,010	-0,11	-0,11	
44	enzymat., autom.	1,60	-0,100	-1,13	-1,13	
45	enzymat., autom.	1,70	0,000	0,00	0,00	
48	enzymat., autom.	1,62	-0,083	-0,93	-0,93	
50	enzymat., autom.	1,72	0,020	0,23	0,23	
52	enzymat., autom.	1,62	-0,080	-0,90	-0,90	
53	enzymat., autom.	1,68	-0,020	-0,23	-0,23	
56	enzymat., autom.	1,71	0,010	0,11	0,11	
59	HPLC	1,96	0,260	2,93	2,93	
61	HPLC	1,98	0,280	3,15	3,15	
63	enzymat. Hand	1,65	-0,049	-0,55	-0,55	
70	enzymat., autom.	1,71	0,010	0,11	0,11	
81	HPLC	2,00	0,300	3,38	3,38	
82	enzymat. Hand	2,21	0,510	5,74	5,74	(**)
89	HPLC	1,59	-0,110	-1,24	-1,24	
97	HPLC	1,72	0,024	0,27	0,27	
111	NMR	1,54	-0,160	-1,80	-1,80	
112	NMR	1,66	-0,043	-0,48	-0,48	
113	NMR	1,66	-0,040	-0,45	-0,45	
114	NMR	1,73	0,030	0,34	0,34	
115	NMR	2,15	0,450	5,07	5,07	(***)
116	NMR	1,77	0,068	0,77	0,77	

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

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

### 4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,73	0,030	0,34	0,09	
202	FTIR	1,74	0,040	0,45	0,12	
203	FTIR	2,03	0,330	3,72	1,00	
204	FTIR	1,25	-0,450	-5,07	-1,36	
205	FTIR	1,23	-0,470	-5,29	-1,42	
207	FTIR	1,60	-0,100	-1,13	-0,30	
208	FTIR	1,84	0,140	1,58	0,42	
209	FTIR	1,30	-0,400	-4,51	-1,21	
210	FTIR	2,20	0,500	5,63	1,52	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
211	FTIR	1,48	-0,220	-2,48	-0,67	
212	FTIR	2,32	0,620	6,98	1,88	
214	FTIR	1,50	-0,200	-2,25	-0,61	
215	FTIR	1,20	-0,500	-5,63	-1,52	
216	FTIR	1,06	-0,640	-7,21	-1,94	
217	FTIR	2,07	0,370	4,17	1,12	
218	FTIR	2,03	0,330	3,72	1,00	
219	FTIR	2,20	0,500	5,63	1,52	
220	FTIR	1,64	-0,060	-0,68	-0,18	
221	FTIR	2,19	0,490	5,52	1,48	
222	FTIR	2,70	1,000	11,26	3,03	
223	FTIR	2,50	0,800	9,01	2,42	
224	FTIR	2,77	1,070	12,05	3,24	
225	FTIR	1,87	0,170	1,91	0,52	
226	FTIR	1,50	-0,200	-2,25	-0,61	
227	FTIR	1,26	-0,440	-4,96	-1,33	
228	FTIR	1,62	-0,080	-0,90	-0,24	
229	FTIR	1,80	0,100	1,13	0,30	
231	FTIR	2,10	0,400	4,51	1,21	
232	FTIR	1,77	0,070	0,79	0,21	
234	FTIR	1,95	0,250	2,82	0,76	
235	FTIR	1,60	-0,100	-1,13	-0,30	
236	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
237	FTIR	1,57	-0,130	-1,46	-0,39	
240	FTIR	1,58	-0,120	-1,35	-0,36	
241	FTIR	1,10	-0,600	-6,76	-1,82	
242	FTIR	2,00	0,300	3,38	0,91	
243	FTIR	2,21	0,510	5,74	1,55	
244	FTIR	2,28	0,580	6,53	1,76	
245	FTIR	1,78	0,080	0,90	0,24	
246	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
247	FTIR	1,89	0,190	2,14	0,58	
249	FTIR	2,80	1,100	12,39	3,33	
250	FTIR	1,40	-0,300	-3,38	-0,91	
251	FTIR	1,69	-0,010	-0,11	-0,03	
252	FTIR	2,22	0,520	5,86	1,58	
254	FTIR	1,20	-0,500	-5,63	-1,52	
256	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
257	FTIR	1,35	-0,350	-3,94	-1,06	
258	FTIR	2,37	0,670	7,55	2,03	
259	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
260	FTIR	1,10	-0,600	-6,76	-1,82	
261	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
262	FTIR	2,10	0,400	4,51	1,21	
263	FTIR	2,04	0,340	3,83	1,03	
264	FTIR	1,10	-0,600	-6,76	-1,82	
265	FTIR	2,20	0,500	5,63	1,52	
266	FTIR	1,77	0,070	0,79	0,21	
267	FTIR	2,00	0,300	3,38	0,91	
268	FTIR	1,38	-0,320	-3,60	-0,97	
269	FTIR	2,50	0,800	9,01	2,42	
271	FTIR	0,99	-0,710	-8,00	-2,15	
272	FTIR	2,60	0,900	10,14	2,73	
273	FTIR	1,99	0,290	3,27	0,88	
275	FTIR	2,78	1,080	12,16	3,27	
276	FTIR	1,10	-0,600	-6,76	-1,82	
277	FTIR	2,29	0,590	6,65	1,79	
278	FTIR	2,05	0,350	3,94	1,06	
279	FTIR	1,70	0,000	0,00	0,00	
280	FTIR	1,13	-0,570	-6,42	-1,73	
281	FTIR	2,24	0,540	6,08	1,64	
282	FTIR	1,60	-0,100	-1,13	-0,30	
284	FTIR	1,90	0,200	2,25	0,61	
285	FTIR	2,58	0,880	9,91	2,67	
287	FTIR	2,28	0,580	6,53	1,76	
288	FTIR	2,07	0,370	4,17	1,12	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
311	FTIR	1,53	-0,170	-1,91	-0,52	
320	FTIR	1,81	0,110	1,24	0,33	
337	FTIR	2,74	1,040	11,71	3,15	
365	FTIR	2,30	0,600	6,76	1,82	

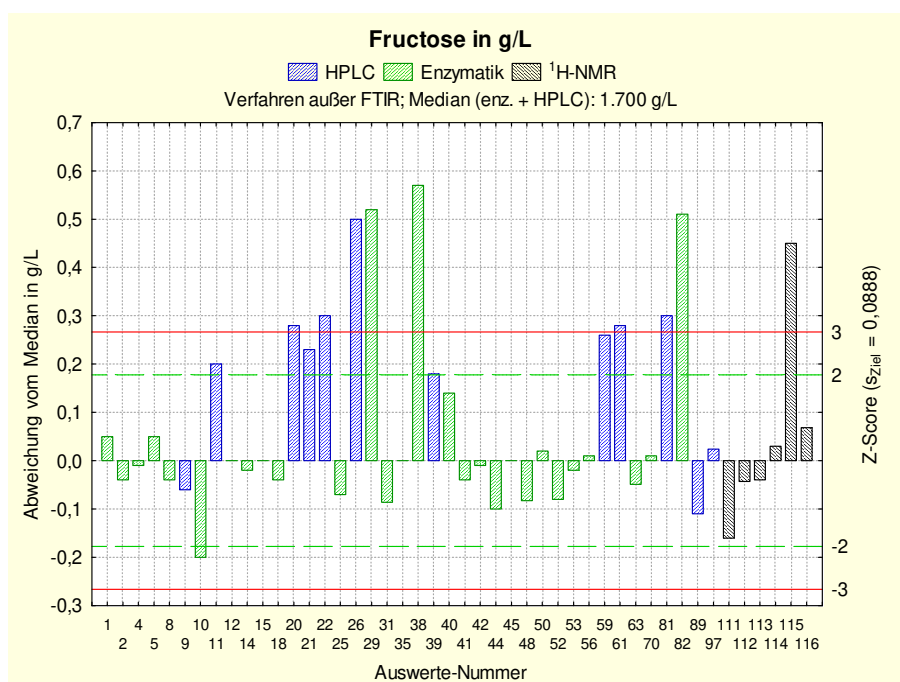
**4.6.3 Deskriptive Ergebnisse**

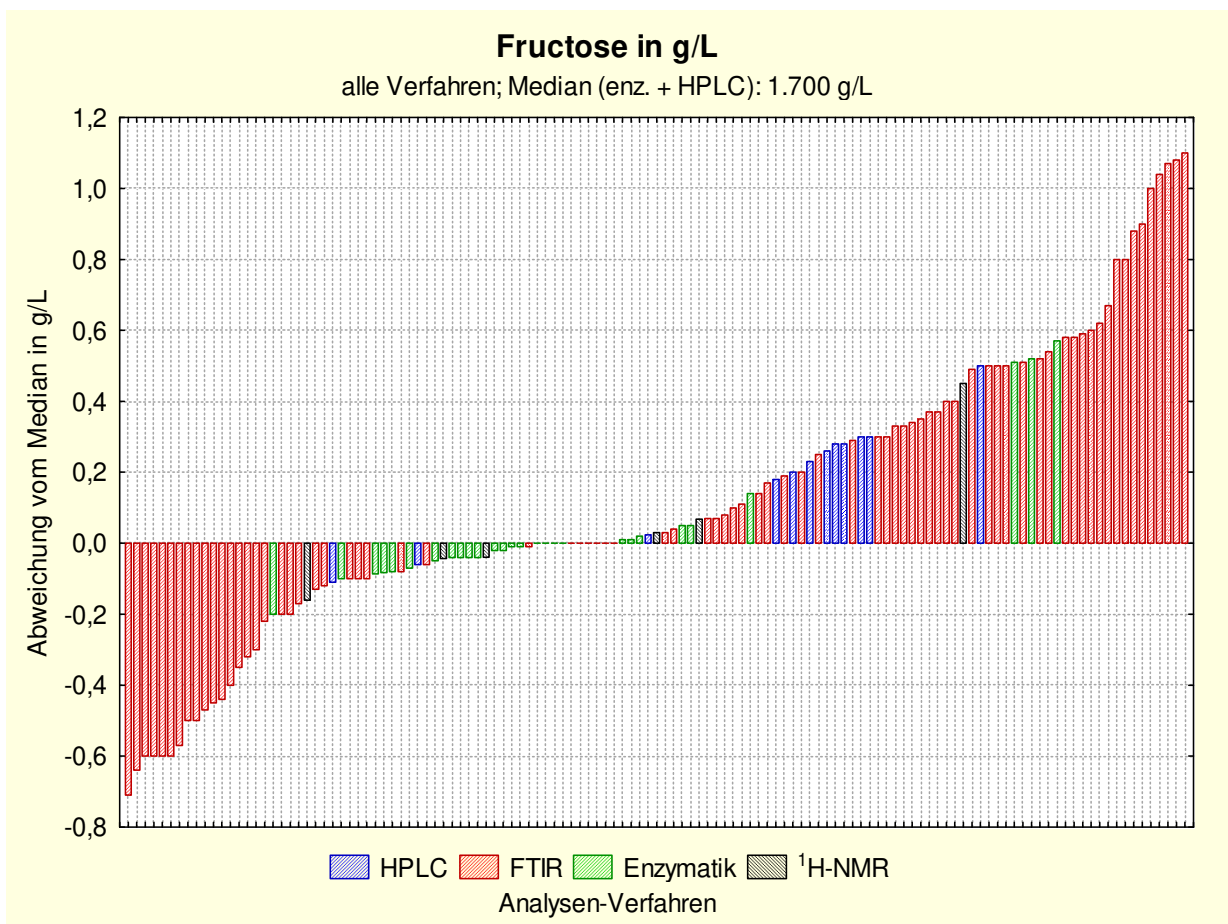
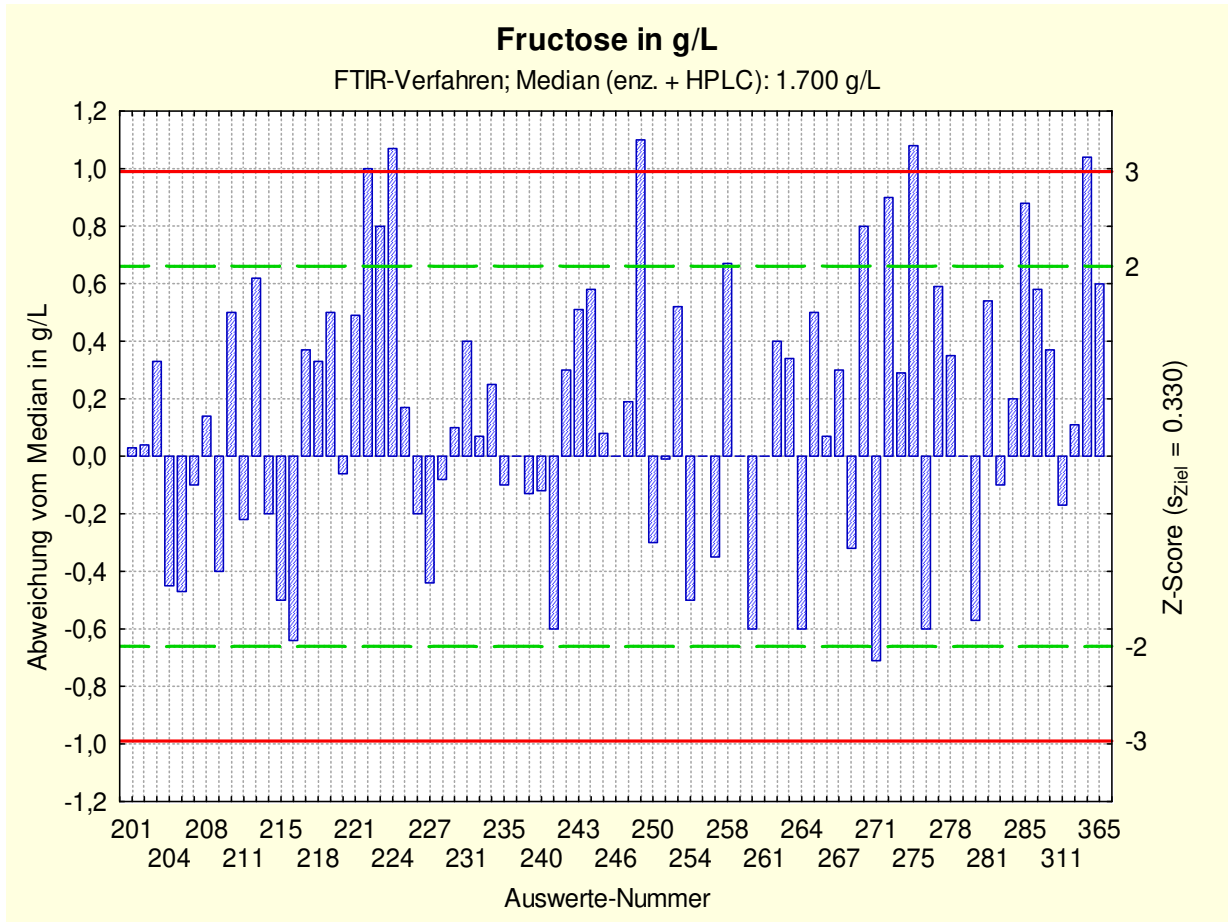
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	40	36
Minimalwert	1,50	1,50
Mittelwert	1,784	1,735
Median	1,700	1,700
Maximalwert	2,27	2,00
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,195	0,132
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,031	0,022
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,089	0,089
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,089	0,089
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,330	0,330
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,19	1,49
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,19	1,49
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,59	0,40
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,35	0,25
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,35	0,25
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,09	0,07

<sup>\*)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s<sub>exp herk</sub> bewertet.

**4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	1,901	0,179
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	24	1,684	0,059
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	4	1,813	0,290
	herkömmliche Verfahren	40	1,760	0,167
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	1,836	0,498
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,719	0,153





## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,55	-0,045	-0,18	
02	enzymat. Hand	5,33	-0,265	-1,08	
04	enzymat. autom.	5,67	0,075	0,31	
05	enzymat. autom.	5,61	0,015	0,06	
09	enzymat. autom.	6,09	0,495	2,03	
10	enzymat. Hand	5,54	-0,055	-0,23	
11	HPLC	5,75	0,155	0,63	
14	enzymat. autom.	5,53	-0,065	-0,27	
21	HPLC	5,38	-0,215	-0,88	
22	HPLC	5,50	-0,095	-0,39	
26	HPLC	5,70	0,105	0,43	
39	HPLC	5,73	0,135	0,55	
56	enzymat. autom.	5,67	0,075	0,31	
59	enzymat. autom.	5,60	0,005	0,02	
61	HPLC	5,59	-0,005	-0,02	
63	enzymat. Hand	5,11	-0,486	-1,99	
81	HPLC	5,80	0,205	0,84	
82	enzymat. Hand	5,57	-0,025	-0,10	
92	enzymat. Hand	5,43	-0,165	-0,68	
97	HPLC	5,87	0,275	1,13	
111	NMR	5,56	-0,035	-0,14	
112	NMR	5,17	-0,420	-1,72	
113	NMR	5,46	-0,133	-0,55	
114	NMR	5,83	0,231	0,95	
115	NMR	6,02	0,425	1,74	
116	NMR	5,54	-0,057	-0,23	

### 4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,63	0,035	0,14	0,10	
202	FTIR	5,38	-0,215	-0,88	-0,62	
203	FTIR	5,52	-0,075	-0,31	-0,22	
205	FTIR	5,42	-0,175	-0,72	-0,50	
206	FTIR	5,65	0,055	0,23	0,16	
207	FTIR	5,10	-0,495	-2,03	-1,42	
208	FTIR	5,70	0,105	0,43	0,30	
210	FTIR	5,77	0,175	0,72	0,50	
211	FTIR	5,55	-0,045	-0,18	-0,13	
212	FTIR	5,37	-0,225	-0,92	-0,65	
214	FTIR	5,50	-0,095	-0,39	-0,27	
215	FTIR	5,47	-0,125	-0,51	-0,36	
216	FTIR	5,60	0,005	0,02	0,01	
217	FTIR	3,79	-1,805	-7,39	-5,19	(**)
218	FTIR	4,80	-0,795	-3,25	-2,28	
220	FTIR	6,18	0,585	2,40	1,68	
221	FTIR	5,41	-0,185	-0,76	-0,53	
223	FTIR	5,20	-0,395	-1,62	-1,14	
224	FTIR	5,48	-0,115	-0,47	-0,33	
226	FTIR	5,90	0,305	1,25	0,88	
227	FTIR	5,71	0,115	0,47	0,33	
228	FTIR	5,85	0,255	1,04	0,73	
229	FTIR	5,42	-0,175	-0,72	-0,50	
231	FTIR	4,93	-0,665	-2,72	-1,91	
232	FTIR	5,26	-0,335	-1,37	-0,96	
234	FTIR	5,76	0,165	0,68	0,47	
236	FTIR	5,00	-0,595	-2,44	-1,71	
237	FTIR	6,09	0,495	2,03	1,42	
240	FTIR	5,50	-0,095	-0,39	-0,27	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
241	FTIR	6,00	0,405	1,66	1,16	
242	FTIR	5,40	-0,195	-0,80	-0,56	
243	FTIR	5,82	0,225	0,92	0,65	
244	FTIR	5,27	-0,325	-1,33	-0,93	
245	FTIR	5,37	-0,225	-0,92	-0,65	
249	FTIR	4,60	-0,995	-4,07	-2,86	
250	FTIR	5,72	0,125	0,51	0,36	
252	FTIR	5,35	-0,245	-1,00	-0,70	
254	FTIR	5,60	0,005	0,02	0,01	
256	FTIR	6,21	0,615	2,52	1,77	
257	FTIR	4,99	-0,605	-2,48	-1,74	
258	FTIR	5,44	-0,155	-0,63	-0,45	
259	FTIR	5,20	-0,395	-1,62	-1,14	
260	FTIR	5,50	-0,095	-0,39	-0,27	
261	FTIR	7,70	2,105	8,62	6,05	(**)
262	FTIR	5,90	0,305	1,25	0,88	
264	FTIR	5,55	-0,045	-0,18	-0,13	
268	FTIR	5,60	0,005	0,02	0,01	
269	FTIR	4,90	-0,695	-2,85	-2,00	
271	FTIR	5,89	0,295	1,21	0,85	
272	FTIR	5,73	0,135	0,55	0,39	
275	FTIR	5,44	-0,155	-0,63	-0,45	
276	FTIR	5,40	-0,195	-0,80	-0,56	
279	FTIR	5,90	0,305	1,25	0,88	
280	FTIR	5,56	-0,035	-0,14	-0,10	
282	FTIR	5,30	-0,295	-1,21	-0,85	
283	FTIR	6,50	0,905	3,71	2,60	
284	FTIR	5,70	0,105	0,43	0,30	
285	FTIR	6,37	0,775	3,17	2,23	
287	FTIR	5,73	0,135	0,55	0,39	
288	FTIR	6,07	0,475	1,94	1,36	
320	FTIR	5,60	0,005	0,02	0,01	
337	FTIR	5,37	-0,225	-0,92	-0,65	

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

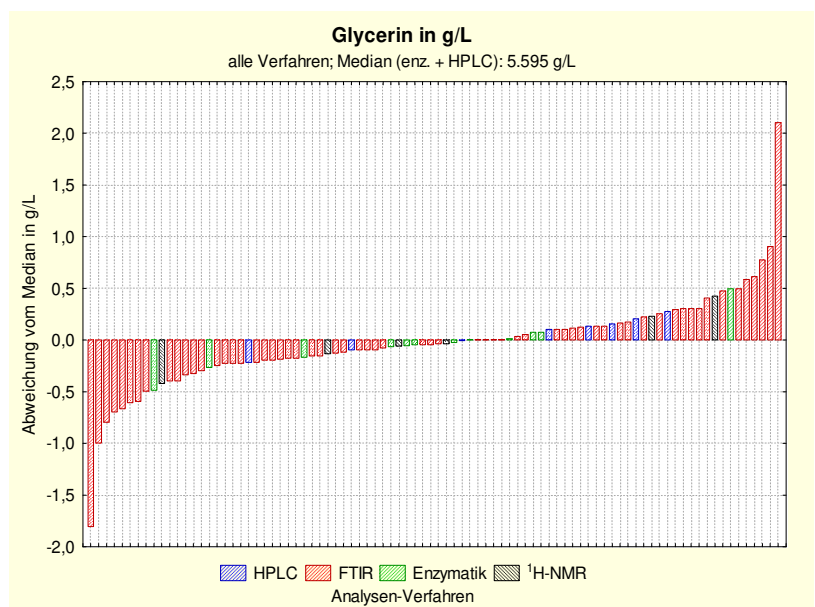
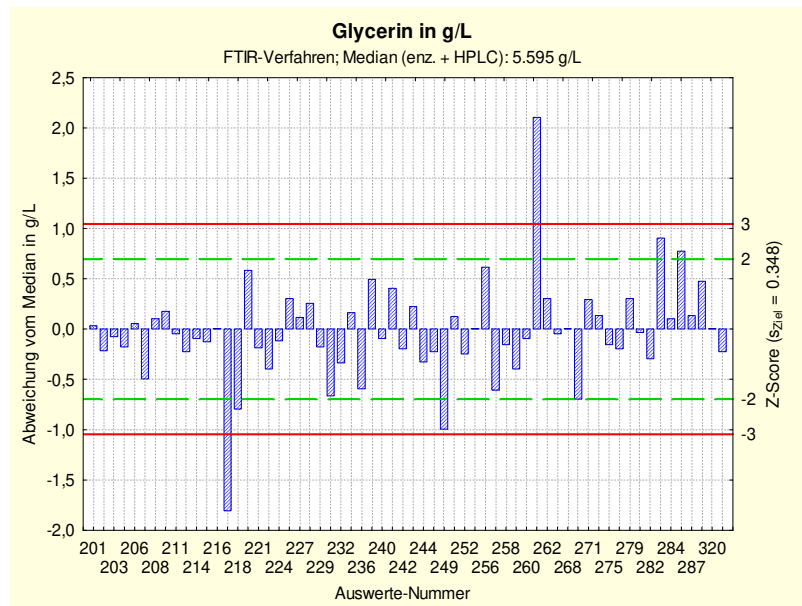
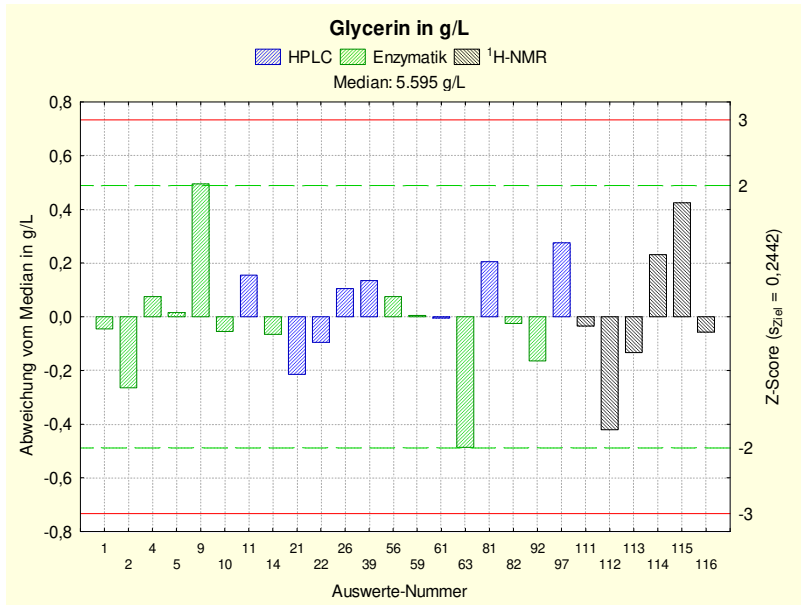
**4.7.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	20
Minimalwert	5,11
Mittelwert	5,601
Median	5,595
Maximalwert	6,09
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,208
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,047
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,244
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,85
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,60
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,19
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,13

**4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	8	5,667	0,181
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	5,648	0,099
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	6	5,428	0,186
	herkömmliche Verfahren mit Ausreißer	20	5,601	0,183
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	62	5,551	0,357
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,586	0,313





## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
02	potentiometr.	3,41	-0,020	-0,42	
04	potentiometr.	3,50	0,070	1,47	
05	potentiometr.	3,36	-0,070	-1,47	
06	potentiometr.	3,43	0,000	0,00	
08	potentiometr.	3,43	0,000	0,00	
09	potentiometr.	3,48	0,050	1,05	
10	potentiometr.	3,21	-0,220	-4,62	
11	potentiometr.	3,41	-0,020	-0,42	
12	potentiometr.	3,41	-0,020	-0,42	
14	potentiometr.	3,50	0,070	1,47	
15	potentiometr.	3,36	-0,070	-1,47	
18	potentiometr.	3,50	0,074	1,55	
20	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
21	potentiometr.	3,37	-0,060	-1,26	
22	potentiometr.	3,44	0,010	0,21	
25	potentiometr.	3,38	-0,050	-1,05	
26	potentiometr.	3,52	0,090	1,89	
27	potentiometr.	3,47	0,040	0,84	
29	potentiometr.	3,43	0,000	0,00	
31	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
37	potentiometr.	3,20	-0,230	-4,83	
38	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
39	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
40	potentiometr.	3,42	-0,010	-0,21	
41	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
42	potentiometr.	3,31	-0,120	-2,52	
43	potentiometr.	3,40	-0,030	-0,63	
44	potentiometr.	3,44	0,010	0,21	
45	potentiometr.	3,59	0,160	3,36	
49	potentiometr.	3,42	-0,010	-0,21	
50	potentiometr.	3,41	-0,020	-0,42	
53	potentiometr.	3,45	0,020	0,42	
56	potentiometr.	3,42	-0,010	-0,21	
59	potentiometr.	3,48	0,050	1,05	
60	potentiometr.	3,43	0,000	0,00	
61	potentiometr.	3,15	-0,280	-5,88	(**)
63	potentiometr.	3,38	-0,050	-1,05	
65	potentiometr.	3,32	-0,110	-2,31	
70	potentiometr.	3,42	-0,010	-0,21	
74	potentiometr.	3,19	-0,240	-5,04	(**)
75	potentiometr.	3,28	-0,150	-3,15	
77	potentiometr.	3,49	0,060	1,26	
78	potentiometr.	3,48	0,050	1,05	
81	potentiometr.	3,55	0,120	2,52	
82	potentiometr.	3,44	0,010	0,21	
83	potentiometr.	3,43	0,000	0,00	
85	potentiometr.	3,41	-0,020	-0,42	
86	potentiometr.	3,66	0,230	4,83	
106	potentiometr.	3,27	-0,160	-3,36	

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

### 4.8.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,39	-0,040	-0,81	
202	FTIR	3,40	-0,030	-0,61	
203	FTIR	3,33	-0,100	-2,03	
204	FTIR	3,43	0,000	0,00	
205	FTIR	3,41	-0,020	-0,41	
206	FTIR	3,41	-0,020	-0,41	
207	FTIR	3,38	-0,050	-1,01	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
208	FTIR	3,44	0,010	0,20	
209	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
210	FTIR	3,36	-0,070	-1,42	
211	FTIR	3,41	-0,020	-0,41	
212	FTIR	3,34	-0,090	-1,83	
214	FTIR	3,43	0,000	0,00	
215	FTIR	3,37	-0,060	-1,22	
216	FTIR	3,25	-0,180	-3,65	
217	FTIR	3,38	-0,050	-1,01	
218	FTIR	3,46	0,030	0,61	
219	FTIR	3,53	0,100	2,03	
220	FTIR	3,43	0,000	0,00	
221	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
222	FTIR	3,42	-0,010	-0,20	
223	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
224	FTIR	3,37	-0,060	-1,22	
225	FTIR	3,36	-0,070	-1,42	
226	FTIR	3,45	0,020	0,41	
227	FTIR	3,48	0,050	1,01	
228	FTIR	3,48	0,050	1,01	
229	FTIR	3,44	0,010	0,20	
231	FTIR	3,42	-0,010	-0,20	
232	FTIR	3,47	0,040	0,81	
234	FTIR	3,47	0,040	0,81	
235	FTIR	3,28	-0,150	-3,04	
236	FTIR	3,37	-0,060	-1,22	
237	FTIR	3,53	0,100	2,03	
240	FTIR	3,46	0,030	0,61	
241	FTIR	3,34	-0,090	-1,83	
242	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
243	FTIR	3,44	0,010	0,20	
244	FTIR	3,38	-0,050	-1,01	
245	FTIR	3,43	0,000	0,00	
247	FTIR	3,43	0,000	0,00	
249	FTIR	3,40	-0,030	-0,61	
250	FTIR	3,41	-0,020	-0,41	
251	FTIR	3,50	0,070	1,42	
252	FTIR	3,38	-0,050	-1,01	
254	FTIR	3,45	0,020	0,41	
255	FTIR	3,45	0,020	0,41	
256	FTIR	3,48	0,050	1,01	
257	FTIR	3,26	-0,170	-3,45	
258	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
259	FTIR	3,52	0,090	1,83	
260	FTIR	3,56	0,130	2,64	
261	FTIR	3,37	-0,060	-1,22	
262	FTIR	3,54	0,110	2,23	
264	FTIR	3,47	0,040	0,81	
265	FTIR	3,47	0,040	0,81	
266	FTIR	3,41	-0,020	-0,41	
267	FTIR	3,34	-0,090	-1,83	
268	FTIR	3,46	0,030	0,61	
269	FTIR	3,37	-0,060	-1,22	
270	FTIR	3,58	0,150	3,04	
271	FTIR	3,47	0,040	0,81	
272	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
273	FTIR	3,38	-0,050	-1,01	
275	FTIR	3,39	-0,040	-0,81	
276	FTIR	3,59	0,160	3,25	
277	FTIR	3,49	0,060	1,22	
278	FTIR	3,36	-0,070	-1,42	
279	FTIR	3,35	-0,080	-1,62	
280	FTIR	3,45	0,020	0,41	
281	FTIR	3,42	-0,010	-0,20	
282	FTIR	3,44	0,010	0,20	
283	FTIR	3,42	-0,010	-0,20	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

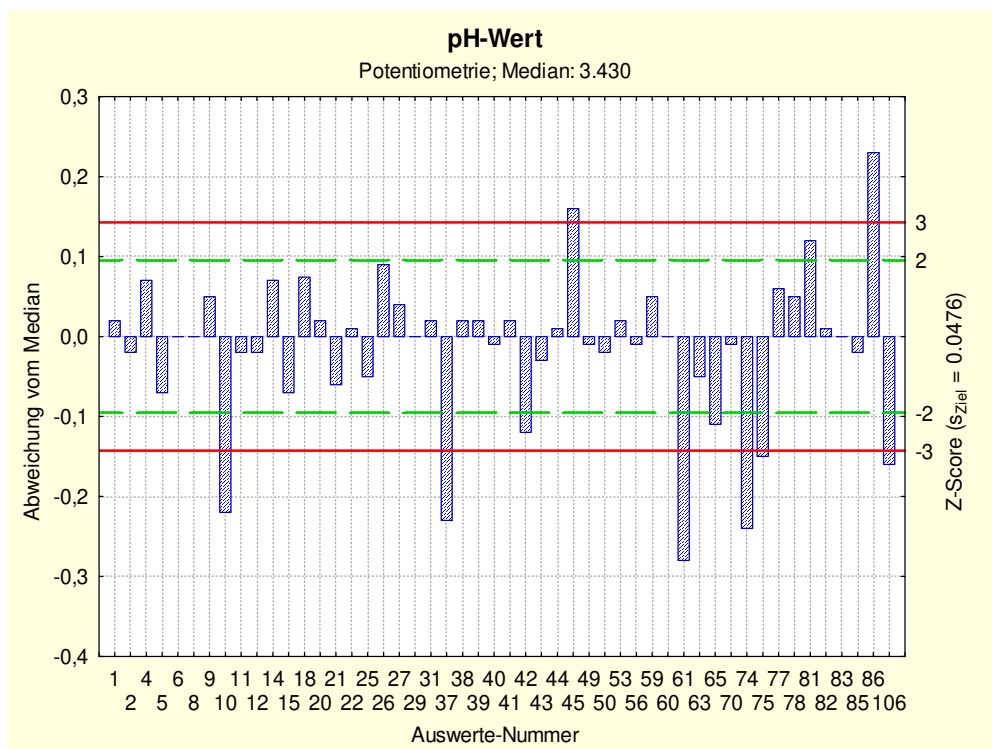
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
284	FTIR	3,33	-0,100	-2,03	
285	FTIR	3,43	0,000	0,00	
287	FTIR	3,34	-0,090	-1,83	
288	FTIR	3,28	-0,150	-3,04	
320	FTIR	3,42	-0,010	-0,20	
337	FTIR	3,47	0,040	0,81	
365	FTIR	3,44	0,010	0,20	

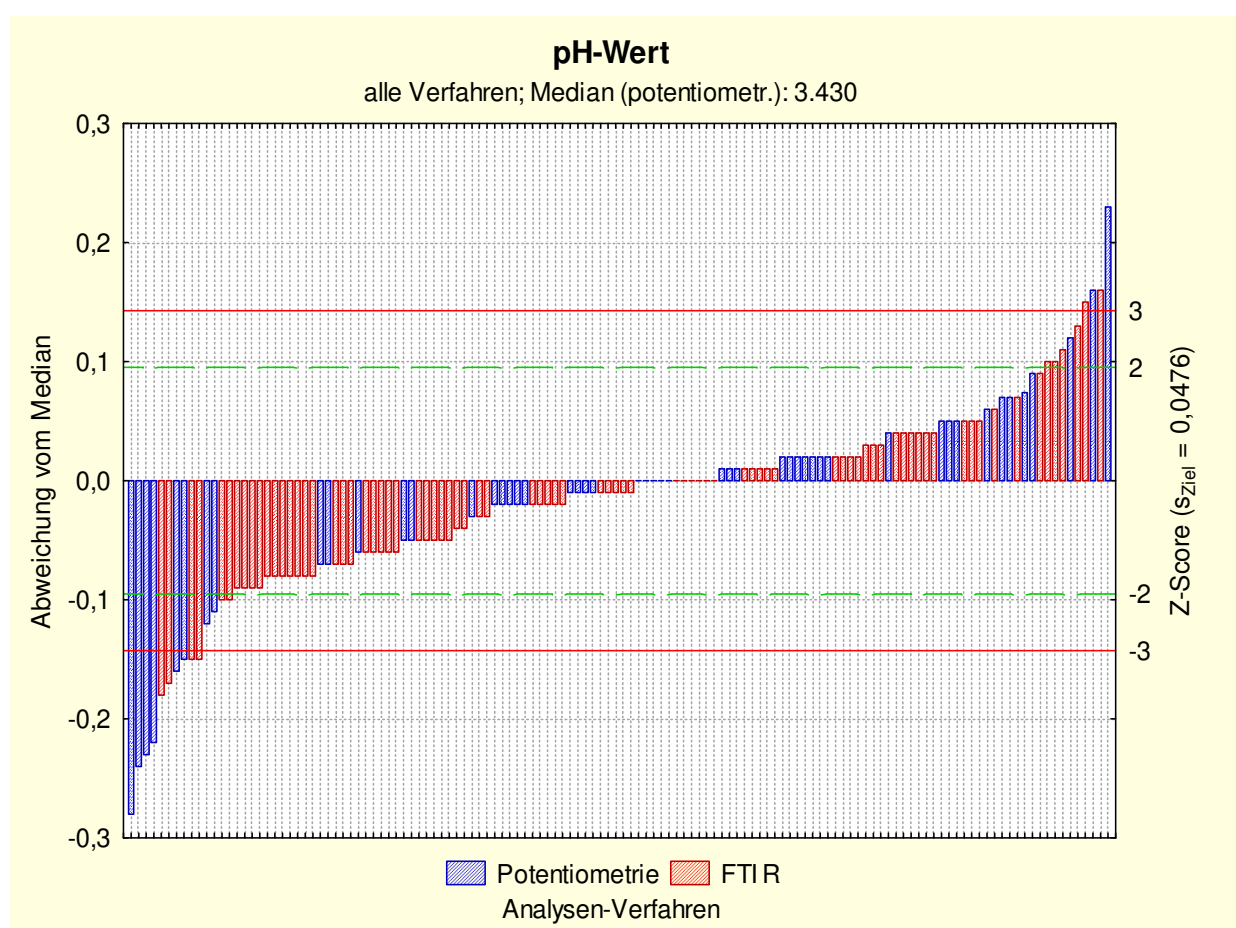
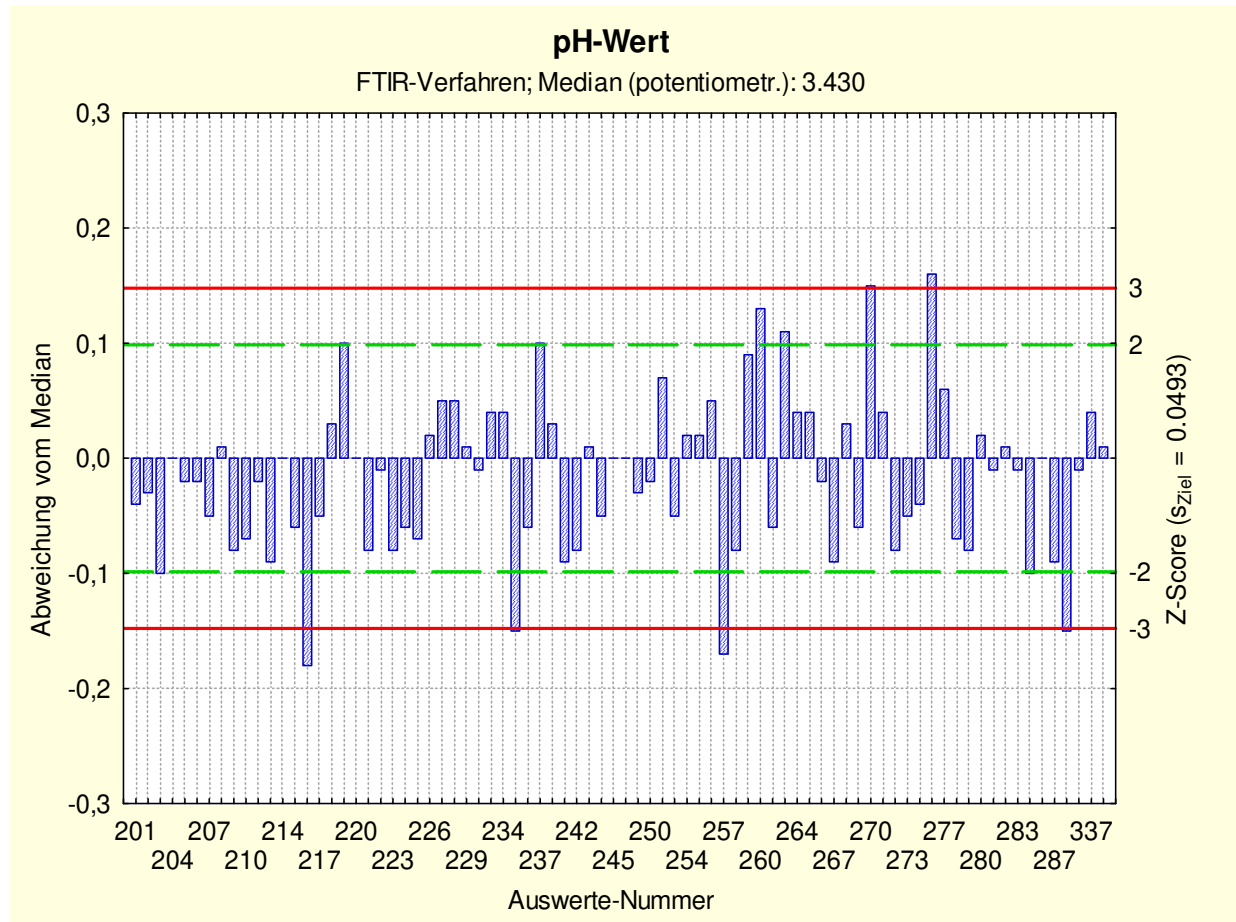
**4.8.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	50	48
Minimalwert	3,15	3,20
Mittelwert	3,415	3,425
Median	3,430	3,430
Maximalwert	3,66	3,66
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0963	0,0836
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0136	0,0121
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,02	1,76
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,95	1,69
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,29	0,25
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,28	0,25

**4.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	50	3,423	0,070
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	3,413	0,064
	alle Verfahren	130	3,417	0,067





## 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	5,20	-0,100	-0,43	-0,93	
02	LwK 5.2.1	5,23	-0,070	-0,30	-0,65	
04	LwK 5.2.1	5,22	-0,080	-0,34	-0,75	
05	LwK 5.1	5,15	-0,150	-0,64	-1,40	
06	LwK 5.2.1	5,31	0,010	0,04	0,09	
08	LwK 5.2.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
09	LwK 5.2.1	5,26	-0,040	-0,17	-0,37	
10	LwK 5.1	5,35	0,050	0,21	0,47	
11	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
12	LwK 5.1	5,40	0,100	0,43	0,93	
14	LwK 5.1	5,46	0,160	0,69	1,49	
15	LwK 5.2.1	5,21	-0,090	-0,39	-0,84	
18	LwK 5.2.1	5,39	0,090	0,39	0,84	
20	LwK 5.1	5,49	0,190	0,81	1,77	
21	LwK 5.1	5,20	-0,100	-0,43	-0,93	
22	LwK 5.1	5,40	0,100	0,43	0,93	
23	LwK 5.1	5,60	0,300	1,29	2,80	
25	LwK 5.1	5,39	0,090	0,39	0,84	
26	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
27	LwK 5.1	5,40	0,100	0,43	0,93	
29	LwK 5.2.1	5,25	-0,050	-0,21	-0,47	
31	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
37	LwK 5.1	5,51	0,210	0,90	1,96	
38	LwK 5.1	5,23	-0,074	-0,32	-0,69	
39	LwK 5.2.1	5,26	-0,040	-0,17	-0,37	
40	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
41	LwK 5.1	5,35	0,050	0,21	0,47	
42	LwK 5.1	5,21	-0,090	-0,39	-0,84	
43	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
44	LwK 5.1	5,26	-0,040	-0,17	-0,37	
45	LwK 5.1	5,20	-0,100	-0,43	-0,93	
48	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
49	LwK 5.1	5,34	0,040	0,17	0,37	
50	LwK 5.1	5,33	0,030	0,13	0,28	
52	LwK 5.2.1	5,60	0,300	1,29	2,80	
53	LwK 5.2.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 5.2.1	5,60	0,300	1,29	2,80	
56	LwK 5.2.1	5,28	-0,020	-0,09	-0,19	
59	LwK 5.1	5,34	0,040	0,17	0,37	
60	LwK 5.2.1	5,35	0,050	0,21	0,47	
61	LwK 5.1	5,20	-0,100	-0,43	-0,93	
63	LwK 5.2.1	5,25	-0,050	-0,21	-0,47	
65	LwK 5.1	5,45	0,152	0,65	1,42	
70	LwK 5.1	5,36	0,060	0,26	0,56	
74	LwK 5.1	5,82	0,520	2,23	4,85	
75	LwK 5.1	5,00	-0,300	-1,29	-2,80	
77	LwK 5.2.2	5,10	-0,200	-0,86	-1,87	
78	LwK 5.2.2	5,20	-0,100	-0,43	-0,93	
81	LwK 5.2.1	5,30	0,000	0,00	0,00	
82	LwK 5.1	5,21	-0,090	-0,39	-0,84	
83	LwK 5.2.2	5,30	0,000	0,00	0,00	
85	LwK 5.1	5,15	-0,150	-0,64	-1,40	
86	LwK 5.1	5,80	0,500	2,14	4,67	
106	LwK 5.1	5,30	0,000	0,00	0,00	

**4.9.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
202	LwK 5.3	5,48	0,180	0,77	1,24	
203	LwK 5.3	5,35	0,050	0,21	0,34	
204	LwK 5.3	5,69	0,390	1,67	2,69	
205	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
206	LwK 5.3	5,39	0,090	0,39	0,62	
207	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	
208	LwK 5.3	5,42	0,120	0,51	0,83	
209	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
210	LwK 5.3	5,27	-0,030	-0,13	-0,21	
211	LwK 5.3	5,53	0,230	0,99	1,59	
212	LwK 5.3	5,48	0,180	0,77	1,24	
214	LwK 5.3	5,60	0,300	1,29	2,07	
215	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
216	LwK 5.3	5,94	0,640	2,74	4,41	
217	LwK 5.3	5,36	0,060	0,26	0,41	
218	LwK 5.3	5,47	0,170	0,73	1,17	
219	LwK 5.3	5,80	0,500	2,14	3,45	
220	LwK 5.3	5,41	0,110	0,47	0,76	
221	LwK 5.3	5,22	-0,080	-0,34	-0,55	
223	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
224	LwK 5.3	5,58	0,280	1,20	1,93	
225	LwK 5.3	5,59	0,290	1,24	2,00	
226	LwK 5.3	5,35	0,050	0,21	0,34	
227	LwK 5.3	5,55	0,250	1,07	1,72	
228	LwK 5.3	5,53	0,230	0,99	1,59	
229	LwK 5.3	5,47	0,170	0,73	1,17	
231	LwK 5.3	5,31	0,010	0,04	0,07	
232	LwK 5.3	5,56	0,260	1,11	1,79	
234	LwK 5.3	5,38	0,080	0,34	0,55	
235	LwK 5.3	5,10	-0,200	-0,86	-1,38	
236	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
237	LwK 5.3	5,44	0,140	0,60	0,97	
240	LwK 5.3	5,60	0,300	1,29	2,07	
241	LwK 5.3	5,80	0,500	2,14	3,45	
242	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
243	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
244	LwK 5.3	5,49	0,190	0,81	1,31	
245	LwK 5.3	5,48	0,180	0,77	1,24	
246	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
247	LwK 5.3	5,44	0,140	0,60	0,97	
248	LwK 5.3	5,67	0,370	1,59	2,55	
249	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
250	LwK 5.3	5,57	0,270	1,16	1,86	
251	LwK 5.3	5,46	0,160	0,69	1,10	
252	LwK 5.3	5,55	0,250	1,07	1,72	
254	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	
255	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	
256	LwK 5.3	5,71	0,410	1,76	2,83	
257	LwK 5.3	5,77	0,470	2,01	3,24	
258	LwK 5.3	5,76	0,460	1,97	3,17	
259	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
260	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
261	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	
262	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
263	LwK 5.3	5,41	0,110	0,47	0,76	
264	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
265	LwK 5.3	5,60	0,300	1,29	2,07	
266	LwK 5.3	5,38	0,080	0,34	0,55	
267	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
268	LwK 5.3	5,69	0,390	1,67	2,69	
269	LwK 5.3	5,26	-0,040	-0,17	-0,28	
270	LwK 5.3	5,05	-0,250	-1,07	-1,72	
271	LwK 5.3	5,41	0,110	0,47	0,76	
272	LwK 5.3	5,35	0,050	0,21	0,34	
273	LwK 5.3	5,19	-0,110	-0,47	-0,76	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 5.3	5,52	0,220	0,94	1,52	
276	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
277	LwK 5.3	5,39	0,090	0,39	0,62	
278	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
279	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
280	LwK 5.3	5,68	0,380	1,63	2,62	
281	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	
282	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
283	LwK 5.3	6,00	0,700	3,00	4,83	
284	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
285	LwK 5.3	5,33	0,030	0,13	0,21	
287	LwK 5.3	5,74	0,440	1,89	3,03	
288	LwK 5.3	5,71	0,410	1,76	2,83	
311	LwK 5.3	5,37	0,070	0,30	0,48	
320	LwK 5.3	5,47	0,170	0,73	1,17	
337	LwK 5.3	5,44	0,140	0,60	0,97	
365	LwK 5.3	5,70	0,400	1,71	2,76	

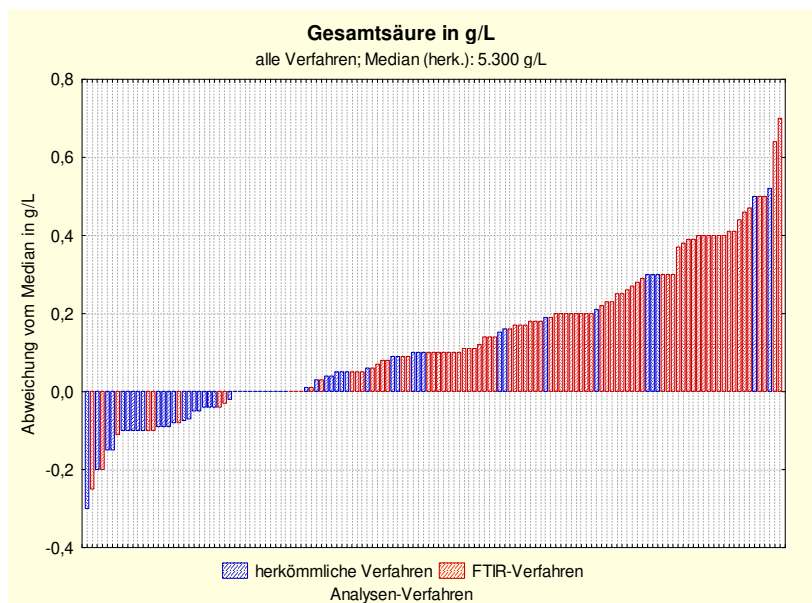
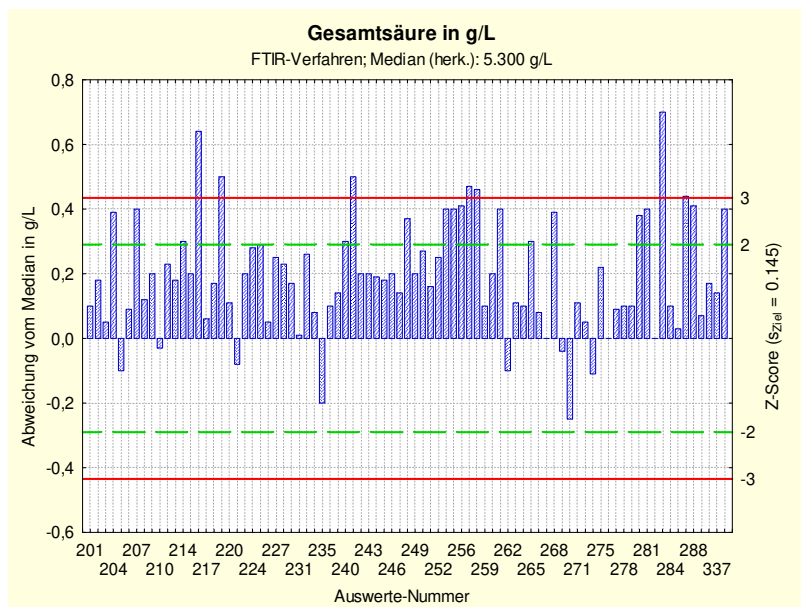
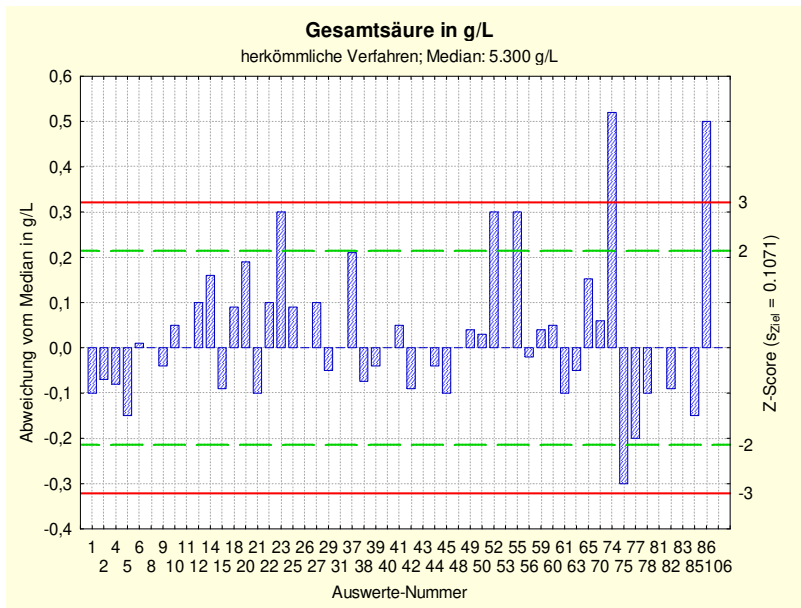
**4.9.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	54
Minimalwert	5,00
Mittelwert	5,326
Median	5,300
Maximalwert	5,82
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,152
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,021
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,233
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,65
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,42
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,05
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,09
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,19
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,14

**4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	34	5,329	0,128
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01; - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	17	5,289	0,070
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	3	5,200	0,113
		54	5,310	0,113
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	5,490	0,176





## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,23	-0,110	-0,94	
02	HPLC	2,22	-0,120	-1,03	
04	photometr.	2,34	0,000	0,00	
05	HPLC	2,25	-0,090	-0,77	
08	HPLC	2,21	-0,130	-1,12	
09	photometr., autom.	2,41	0,070	0,60	
10	photometr.	2,34	0,000	0,00	
12	photometr., autom.	2,40	0,060	0,52	
15	photometr., autom.	2,70	0,360	3,09	
18	IC	2,45	0,110	0,94	
20	HPLC	2,26	-0,080	-0,69	
21	HPLC	1,82	-0,520	-4,46	
22	HPLC	2,36	0,020	0,17	
26	HPLC	2,23	-0,110	-0,94	
29	photometr., autom.	2,84	0,500	4,29	
31	photometr., autom.	2,06	-0,280	-2,40	
38	photometr., autom.	2,55	0,210	1,80	
39	HPLC	2,17	-0,170	-1,46	
40	photometr., autom.	2,47	0,130	1,12	
41	photometr., autom.	2,40	0,060	0,52	
44	photometr., autom.	2,24	-0,100	-0,86	
45	photometr., autom.	2,83	0,490	4,21	
48	photometr., autom.	2,54	0,195	1,67	
50	photometr., autom.	2,53	0,190	1,63	
53	photometr., autom.	2,50	0,160	1,37	
56	photometr., autom.	2,48	0,140	1,20	
59	HPLC	2,24	-0,100	-0,86	
61	photometr., autom.	2,31	-0,030	-0,26	
63	HPLC	2,47	0,130	1,12	
81	HPLC	2,20	-0,140	-1,20	
82	photometr.	2,55	0,210	1,80	
92	HPLC	2,29	-0,050	-0,43	
95	photometr., autom.	2,27	-0,070	-0,60	
111	NMR	2,20	-0,137	-1,18	
112	NMR	2,54	0,198	1,70	
113	NMR	2,54	0,202	1,74	
114	NMR	2,58	0,237	2,04	
115	NMR	2,35	0,010	0,09	
116	NMR	2,67	0,334	2,87	

### 4.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,96	-0,380	-3,26	-1,67	
202	FTIR	2,09	-0,250	-2,15	-1,10	
203	FTIR	2,11	-0,230	-1,97	-1,01	
204	FTIR	2,21	-0,130	-1,12	-0,57	
205	FTIR	2,27	-0,070	-0,60	-0,31	
207	FTIR	2,40	0,060	0,52	0,26	
208	FTIR	2,18	-0,160	-1,37	-0,70	
209	FTIR	2,10	-0,240	-2,06	-1,06	
210	FTIR	2,08	-0,260	-2,23	-1,15	
211	FTIR	1,92	-0,420	-3,61	-1,85	
212	FTIR	2,27	-0,070	-0,60	-0,31	
214	FTIR	1,80	-0,540	-4,64	-2,38	
215	FTIR	2,30	-0,040	-0,34	-0,18	
216	FTIR	1,85	-0,490	-4,21	-2,16	
217	FTIR	2,17	-0,170	-1,46	-0,75	
218	FTIR	2,18	-0,160	-1,37	-0,70	
219	FTIR	2,70	0,360	3,09	1,59	
220	FTIR	1,83	-0,510	-4,38	-2,25	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

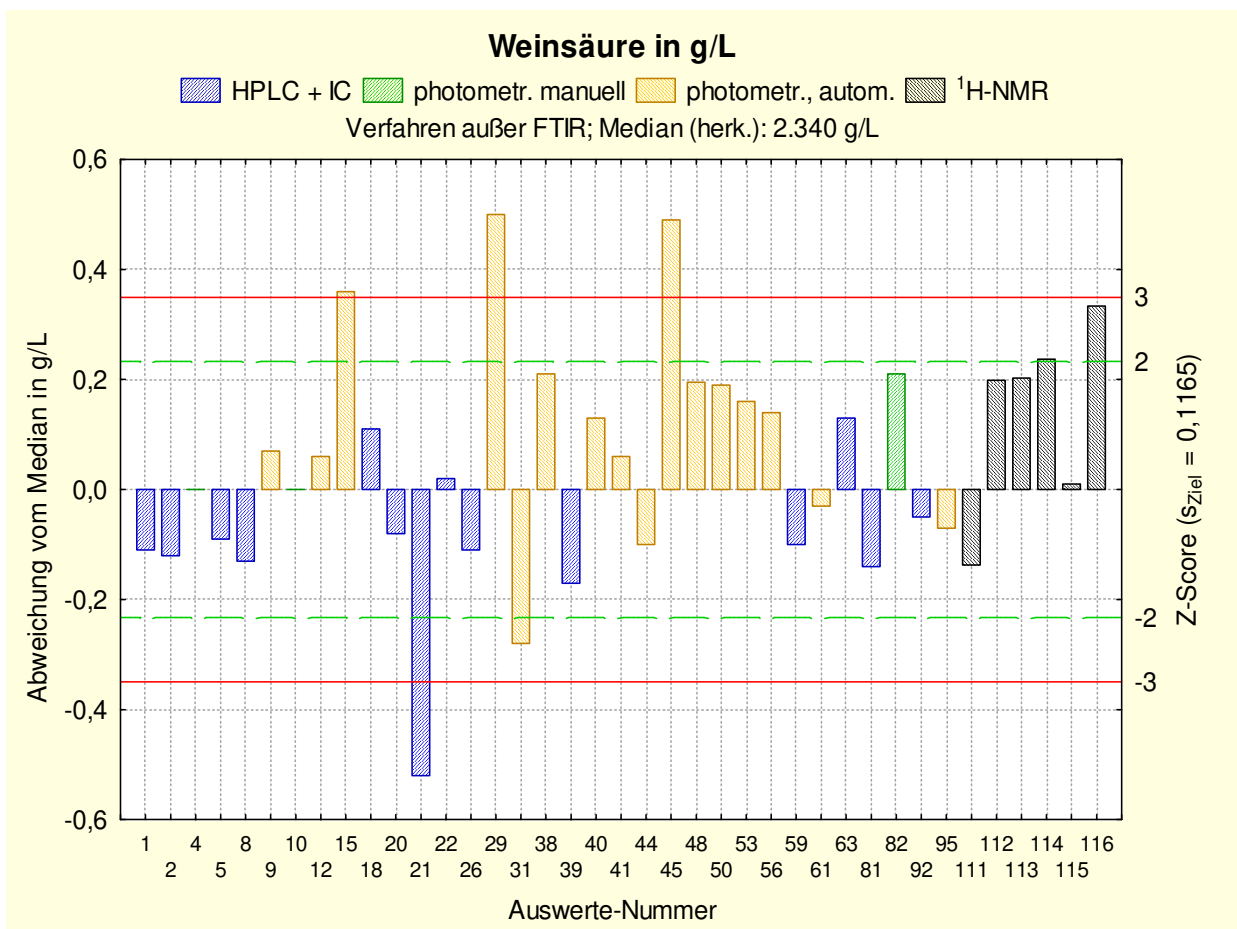
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	1,59	-0,750	-6,44	-3,30	
222	FTIR	2,22	-0,120	-1,03	-0,53	
223	FTIR	2,00	-0,340	-2,92	-1,50	
224	FTIR	2,44	0,100	0,86	0,44	
226	FTIR	2,20	-0,140	-1,20	-0,62	
227	FTIR	2,16	-0,180	-1,55	-0,79	
228	FTIR	2,38	0,040	0,34	0,18	
229	FTIR	2,24	-0,100	-0,86	-0,44	
231	FTIR	2,06	-0,280	-2,40	-1,23	
232	FTIR	2,05	-0,290	-2,49	-1,28	
234	FTIR	2,16	-0,180	-1,55	-0,79	
235	FTIR	1,40	-0,940	-8,07	-4,14	
236	FTIR	1,90	-0,440	-3,78	-1,94	
237	FTIR	2,17	-0,170	-1,46	-0,75	
240	FTIR	2,01	-0,330	-2,83	-1,45	
241	FTIR	2,39	0,050	0,43	0,22	
242	FTIR	2,68	0,340	2,92	1,50	
243	FTIR	1,50	-0,840	-7,21	-3,70	
244	FTIR	2,32	-0,020	-0,17	-0,09	
245	FTIR	2,33	-0,010	-0,09	-0,04	
247	FTIR	1,93	-0,410	-3,52	-1,81	
249	FTIR	2,90	0,560	4,81	2,47	
250	FTIR	1,54	-0,800	-6,87	-3,52	
252	FTIR	2,31	-0,030	-0,26	-0,13	
254	FTIR	2,00	-0,340	-2,92	-1,50	
256	FTIR	2,63	0,290	2,49	1,28	
257	FTIR	2,06	-0,280	-2,40	-1,23	
258	FTIR	2,39	0,050	0,43	0,22	
259	FTIR	2,90	0,560	4,81	2,47	
260	FTIR	2,00	-0,340	-2,92	-1,50	
261	FTIR	2,30	-0,040	-0,34	-0,18	
262	FTIR	2,20	-0,140	-1,20	-0,62	
265	FTIR	1,50	-0,840	-7,21	-3,70	
266	FTIR	2,00	-0,340	-2,92	-1,50	
267	FTIR	2,10	-0,240	-2,06	-1,06	
268	FTIR	2,22	-0,120	-1,03	-0,53	
269	FTIR	2,23	-0,110	-0,94	-0,48	
270	FTIR	2,55	0,210	1,80	0,93	
271	FTIR	1,94	-0,400	-3,43	-1,76	
272	FTIR	2,09	-0,250	-2,15	-1,10	
273	FTIR	2,00	-0,340	-2,92	-1,50	
275	FTIR	1,94	-0,400	-3,43	-1,76	
276	FTIR	1,80	-0,540	-4,64	-2,38	
277	FTIR	2,13	-0,210	-1,80	-0,93	
278	FTIR	1,94	-0,400	-3,43	-1,76	
279	FTIR	1,80	-0,540	-4,64	-2,38	
280	FTIR	2,16	-0,180	-1,55	-0,79	
281	FTIR	2,39	0,050	0,43	0,22	
282	FTIR	2,20	-0,140	-1,20	-0,62	
284	FTIR	2,20	-0,140	-1,20	-0,62	
285	FTIR	2,26	-0,080	-0,69	-0,35	
287	FTIR	2,22	-0,120	-1,03	-0,53	
288	FTIR	1,98	-0,360	-3,09	-1,59	
320	FTIR	2,57	0,230	1,97	1,01	
337	FTIR	1,67	-0,670	-5,75	-2,95	
365	FTIR	1,60	-0,740	-6,35	-3,26	

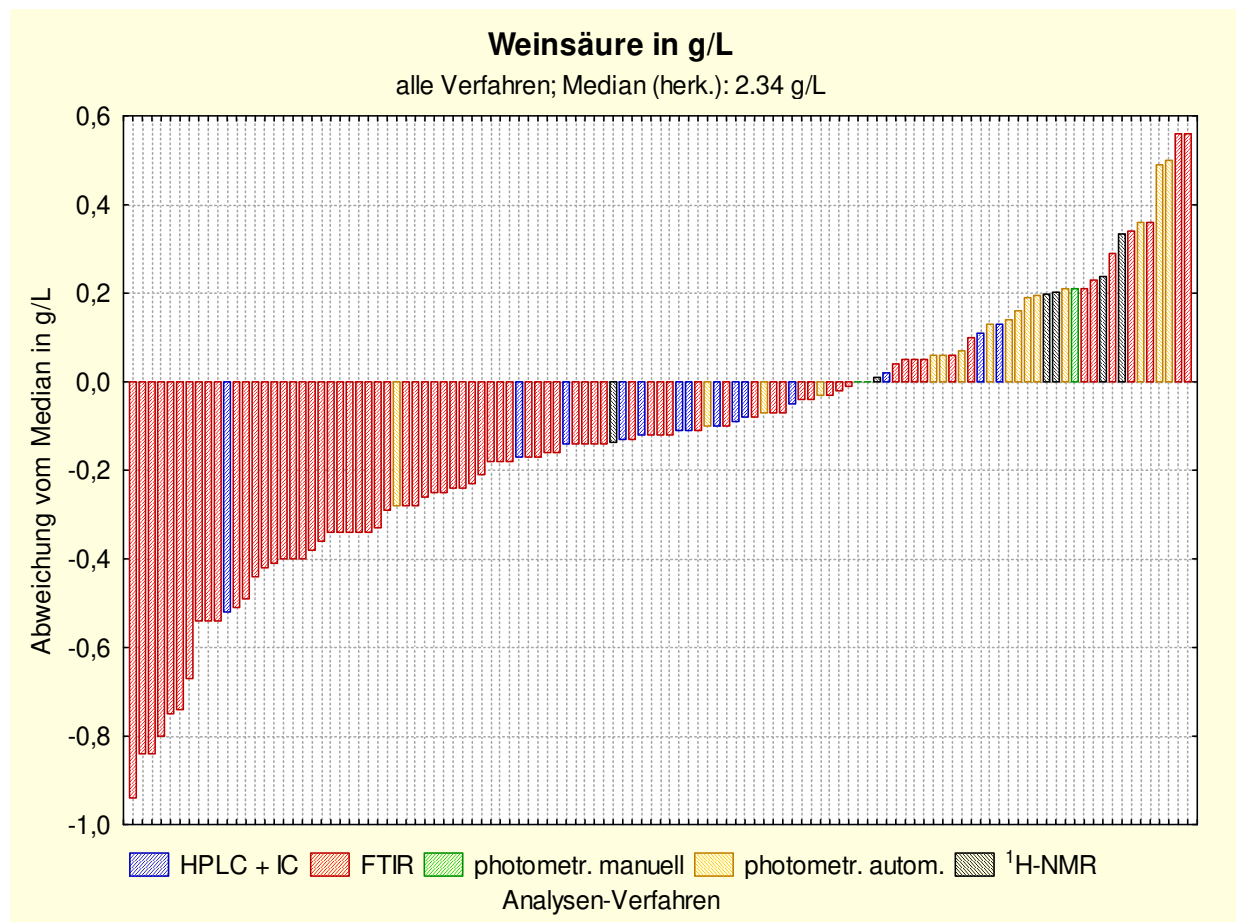
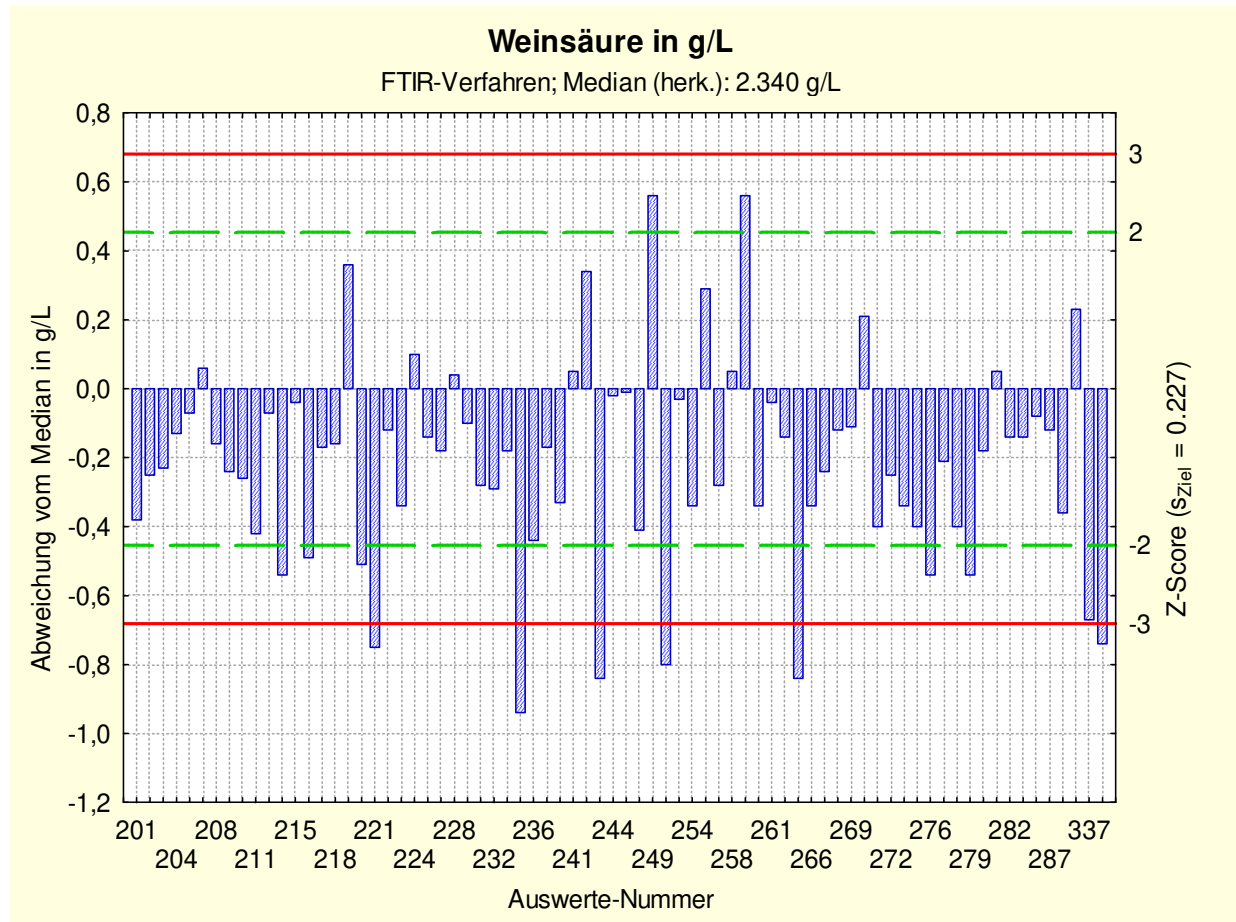
4.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	33
Minimalwert	1,82
Mittelwert	2,368
Median	2,340
Maximalwert	2,84
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,206
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,036
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,116
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,77
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,91
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,31
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,16

4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	13	2,240	0,065
IC	Ionenchromatographie	1	2,450	
photometr.	photometr. n. Rebelein	3	2,409	0,135
phot.autom.	photometr., automatisiert	16	2,469	0,183
	herkömmliche Verfahren	33	2,363	0,173
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	74	2,126	0,255
NMR	1H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,484	0,189





## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO<sub>2</sub>-Einfluss und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,500	0,0490	1,70	1,71	
02	OIV SO2-korr.	0,415	-0,0360	-1,25	-1,26	
04	OIV SO2-korr.	0,520	0,0690	2,40	2,42	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,418	-0,0330	-1,15	-1,16	
08	OIV SO2-korr.	0,421	-0,0300	-1,04	-1,05	
09	OIV SO2-korr.	0,451	0,0000	0,00	0,00	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,490	0,0390	1,36	1,36	
11	Gerhardt SO2 ausg.	0,350	-0,1010	-3,51	-3,54	
18	IC	0,530	0,0790	2,75	2,77	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,490	0,0390	1,36	1,36	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,430	-0,0210	-0,73	-0,74	
27	Halbmikro SO2 unber.	0,524	0,0730	2,54	2,56	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,460	0,0090	0,31	0,32	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,480	0,0290	1,01	1,01	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,394	-0,0570	-1,98	-1,99	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,433	-0,0180	-0,63	-0,63	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,474	0,0230	0,80	0,80	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,442	-0,0090	-0,31	-0,32	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,430	-0,0210	-0,73	-0,74	
43	Gerhardt SO2 korr.	0,330	-0,1210	-4,21	-4,23	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,470	0,0190	0,66	0,66	
45	Gerhardt SO2 korr.	0,528	0,0770	2,68	2,70	
49	Gerhardt SO2 korr.	0,465	0,0140	0,49	0,49	
53	Gerhardt SO2 korr.	0,680	0,2290	7,96	8,02	(**)
55	Gerhardt SO2 korr.	0,510	0,0590	2,05	2,06	
56	Rentschler mod. ausg.	0,429	-0,0220	-0,76	-0,77	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,390	-0,0610	-2,12	-2,13	
65	Halbmikro SO2 unber.	0,620	0,1690	5,88	5,91	(***)
67	Wädenswil SO2 korr.	0,467	0,0160	0,56	0,56	
69	Wädenswil SO2 unber.	0,450	-0,0010	-0,03	-0,04	
70	Gerhardt SO2 korr.	0,550	0,0990	3,44	3,47	
74	Wädensw. SO2 ausg.	0,450	-0,0010	-0,03	-0,04	
83	Halbmikro SO2 unber.	0,400	-0,0510	-1,77	-1,78	
86	Wasserdampfdest.	0,600	0,1490	5,18	5,21	(***)
92	OIV SO2-korr.	0,485	0,0340	1,18	1,19	
98	Halbmikro SO2 ausg.	0,465	0,0140	0,49	0,49	
106	Halbmikro SO2 unber.	0,660	0,2090	7,27	7,32	(***)

rot markierte Methodenennung vom Auswerter geändert

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

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

### 4.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
202	FTIR	0,510	0,0545	1,88	0,61	
204	FTIR	0,500	0,0445	1,53	0,50	
205	FTIR	0,510	0,0545	1,88	0,61	
207	FTIR	0,290	-0,1655	-5,71	-1,86	
208	FTIR	0,398	-0,0575	-1,98	-0,65	
209	FTIR	0,455	-0,0005	-0,02	-0,01	
210	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
212	FTIR	0,350	-0,1055	-3,64	-1,18	
214	FTIR	0,370	-0,0855	-2,95	-0,96	
215	FTIR	0,320	-0,1355	-4,67	-1,52	
216	FTIR	0,400	-0,0555	-1,91	-0,62	
217	FTIR	0,440	-0,0155	-0,53	-0,17	
218	FTIR	0,430	-0,0255	-0,88	-0,29	
219	FTIR	0,320	-0,1355	-4,67	-1,52	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

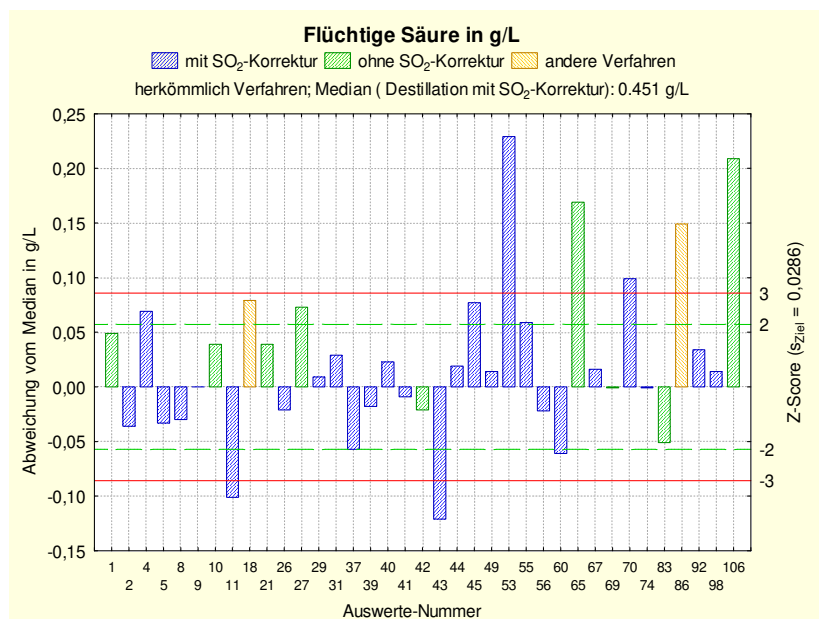
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	0,370	-0,0855	-2,95	-0,96	
221	FTIR	0,530	0,0745	2,57	0,84	
223	FTIR	0,490	0,0345	1,19	0,39	
224	FTIR	0,300	-0,1555	-5,36	-1,75	
225	FTIR	0,429	-0,0265	-0,91	-0,30	
226	FTIR	0,360	-0,0955	-3,29	-1,07	
227	FTIR	0,580	0,1245	4,29	1,40	
228	FTIR	0,390	-0,0655	-2,26	-0,74	
229	FTIR	0,510	0,0545	1,88	0,61	
231	FTIR	0,500	0,0445	1,53	0,50	
232	FTIR	0,480	0,0245	0,84	0,27	
234	FTIR	0,360	-0,0955	-3,29	-1,07	
235	FTIR	0,460	0,0045	0,16	0,05	
236	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
237	FTIR	0,580	0,1245	4,29	1,40	
240	FTIR	0,510	0,0545	1,88	0,61	
241	FTIR	0,500	0,0445	1,53	0,50	
242	FTIR	0,510	0,0545	1,88	0,61	
243	FTIR	0,530	0,0745	2,57	0,84	
244	FTIR	0,360	-0,0955	-3,29	-1,07	
245	FTIR	0,640	0,1845	6,36	2,07	
246	FTIR	0,490	0,0345	1,19	0,39	
247	FTIR	0,530	0,0745	2,57	0,84	
249	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
250	FTIR	0,400	-0,0555	-1,91	-0,62	
251	FTIR	0,550	0,0945	3,26	1,06	
252	FTIR	0,410	-0,0455	-1,57	-0,51	
254	FTIR	0,450	-0,0055	-0,19	-0,06	
255	FTIR	0,480	0,0245	0,84	0,27	
256	FTIR	0,370	-0,0855	-2,95	-0,96	
257	FTIR	0,520	0,0645	2,22	0,72	
258	FTIR	0,380	-0,0755	-2,60	-0,85	
260	FTIR	0,500	0,0445	1,53	0,50	
261	FTIR	0,550	0,0945	3,26	1,06	
262	FTIR	0,320	-0,1355	-4,67	-1,52	
264	FTIR	0,540	0,0845	2,91	0,95	
265	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
266	FTIR	0,480	0,0245	0,84	0,27	
267	FTIR	0,470	0,0145	0,50	0,16	
268	FTIR	0,390	-0,0655	-2,26	-0,74	
269	FTIR	0,460	0,0045	0,16	0,05	
270	FTIR	0,520	0,0645	2,22	0,72	
271	FTIR	0,420	-0,0355	-1,22	-0,40	
272	FTIR	0,310	-0,1455	-5,02	-1,63	
273	FTIR	0,410	-0,0455	-1,57	-0,51	
275	FTIR	0,440	-0,0155	-0,53	-0,17	
276	FTIR	0,390	-0,0655	-2,26	-0,74	
277	FTIR	0,360	-0,0955	-3,29	-1,07	
278	FTIR	0,380	-0,0755	-2,60	-0,85	
279	FTIR	0,290	-0,1655	-5,71	-1,86	
280	FTIR	0,530	0,0745	2,57	0,84	
281	FTIR	0,360	-0,0955	-3,29	-1,07	
282	FTIR	0,430	-0,0255	-0,88	-0,29	
283	FTIR	0,390	-0,0655	-2,26	-0,74	
284	FTIR	0,620	0,1645	5,67	1,85	
285	FTIR	0,460	0,0045	0,16	0,05	
287	FTIR	0,530	0,0745	2,57	0,84	
288	FTIR	0,440	-0,0155	-0,53	-0,17	
320	FTIR	0,410	-0,0455	-1,57	-0,51	
337	FTIR	0,400	-0,0555	-1,91	-0,62	
365	FTIR	0,410	-0,0455	-1,57	-0,51	

4.11.3 Deskriptive Ergebnisse

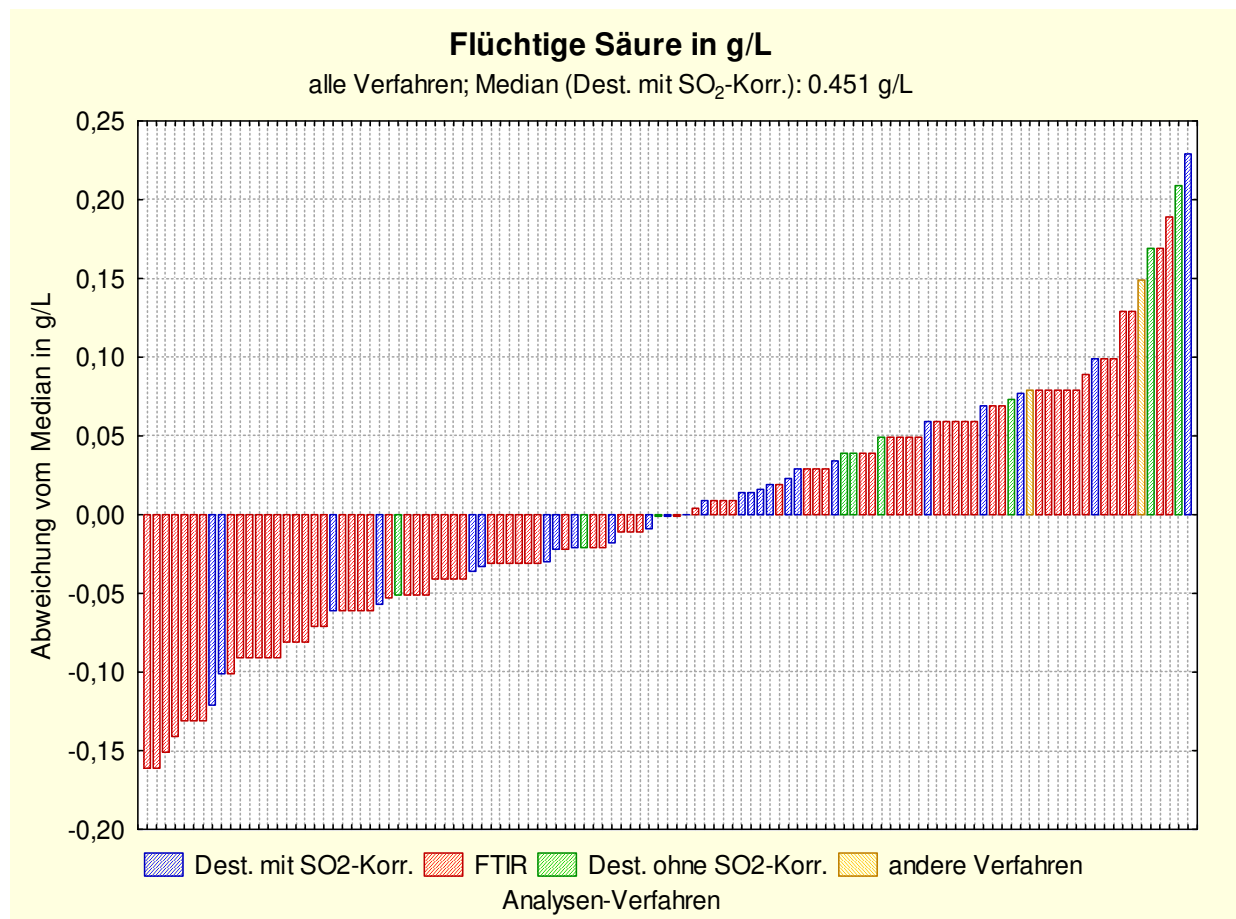
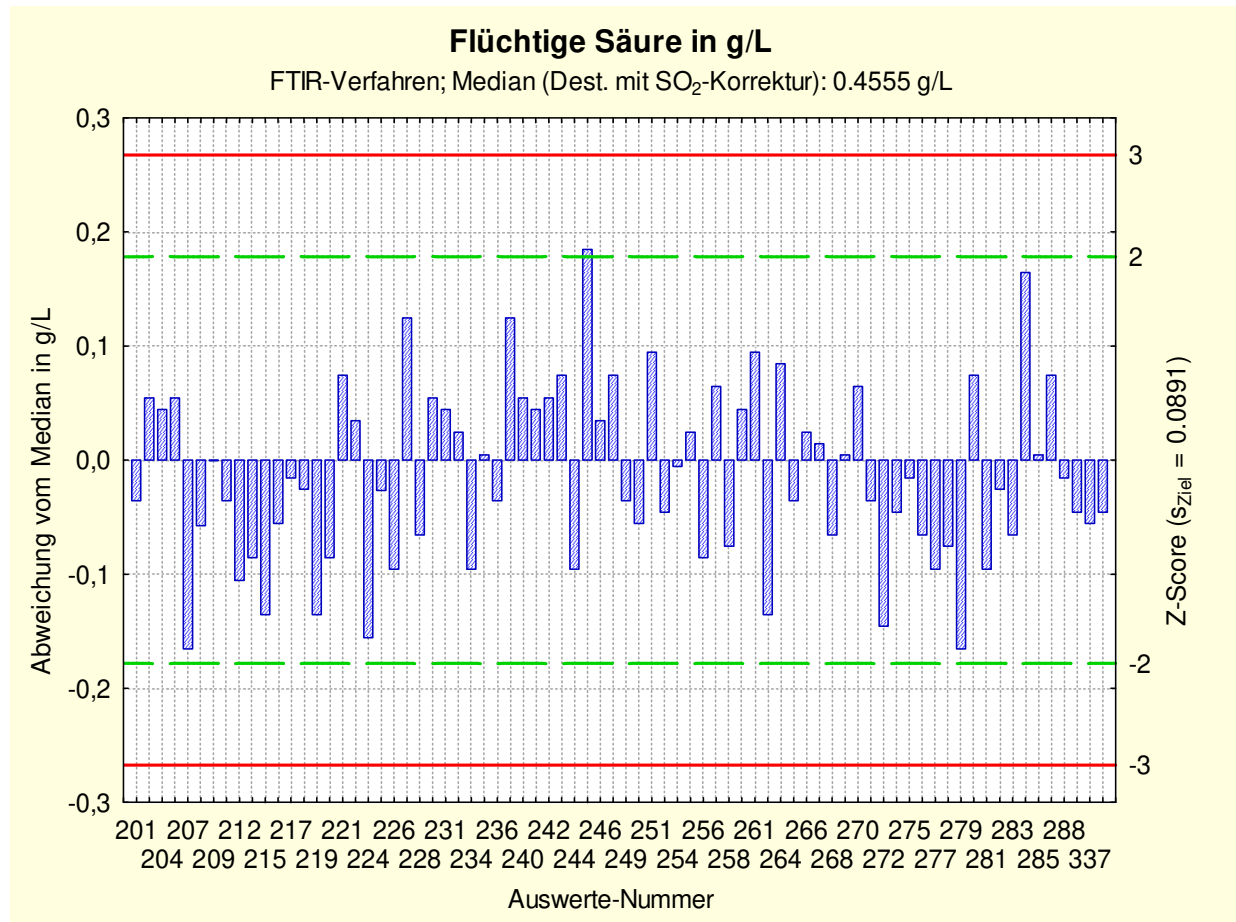
Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder SO <sub>2</sub> -Ausschluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	25
Minimalwert	0,330	0,330
Mittelwert	0,4580	0,4491
Median	0,4555	0,4510
Maximalwert	0,680	0,550
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,068	0,052
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,013	0,010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>1)</sup>	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,34	1,79
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>1)</sup>	2,38	1,81
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,76	0,58
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,46	0,36
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>1)</sup>	0,47	0,36
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,15	0,11

4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	8	0,5104	0,0931
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,4650	
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,4370	0,0690
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,4500	
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,4500	
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,4285	0,0617
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen, z.B. mit H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3	0,4095	0,0525
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	11	0,4787	0,0674
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	5	0,4584	0,0502
Rentschler mod. ausg.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,4290	
Wasserdampfdest.	Wasserdampfdestillation (ohne nähere Angaben)	1	0,6000	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	26	0,4543	0,0517
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	0,4406	0,0813
IC	Ionenchromatographie (fehlerhaft zugeordnet)	1	0,5300	







## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche und Laborergebnisse

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,437	-0,008	-0,28	
10	enzymat. autom.	0,510	0,065	2,29	
12	enzymat. autom.	0,440	-0,005	-0,18	
14	enzymat. autom.	0,510	0,065	2,29	
15	enzymat. autom.	0,390	-0,055	-1,93	
29	enzymat. autom.	0,440	-0,005	-0,18	
38	enzymat. autom.	0,427	-0,018	-0,63	
41	enzymat. autom.	0,440	-0,005	-0,18	
42	enzymat. autom.	0,450	0,005	0,18	
44	enzymat. autom.	0,490	0,045	1,58	
45	enzymat. autom.	0,520	0,075	2,64	
48	enzymat. autom.	0,440	-0,005	-0,18	
50	enzymat. autom.	0,491	0,046	1,62	
53	enzymat. autom.	0,530	0,085	2,99	
56	enzymat. autom.	0,402	-0,043	-1,51	(*)
59	enzymat. autom.	0,390	-0,055	-1,93	(*)
61	enzymat. autom.	0,490	0,045	1,58	
70	enzymat. autom.	0,440	-0,005	-0,18	
92	enzymat. autom.	0,400	-0,045	-1,58	
95	enzymat. autom.	0,455	0,010	0,35	

(\*) Diese Werte wurden wegen abweichender Untersuchungsbedingungen nicht berücksichtigt.

### 4.12.2 Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: enzymatisch, manuell und <sup>1</sup>H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,391	0,005	0,18	
02	HPLC	0,380	-0,006	-0,26	
06	HPLC	0,484	0,098	3,87	
20	HPLC	0,500	0,114	4,50	
22	HPLC	0,313	-0,073	-2,91	
39	HPLC	0,410	0,024	0,93	
63	enzymat. Hand	0,362	-0,024	-0,97	
81	HPLC	0,400	0,014	0,54	
111	NMR	0,382	-0,005	-0,18	
112	NMR	0,381	-0,005	-0,21	
113	NMR	0,406	0,020	0,79	
114	NMR	0,416	0,029	1,16	
115	NMR	0,380	-0,006	-0,26	
116	NMR	0,400	0,014	0,54	
208	FTIR	0,500	0,114	4,50	
211	FTIR	0,460	0,074	2,92	
222	FTIR	0,560	0,174	6,88	(***)
241	FTIR	0,320	-0,066	-2,63	
259	FTIR	0,520	0,134	5,30	(***)
260	FTIR	0,450	0,064	2,52	

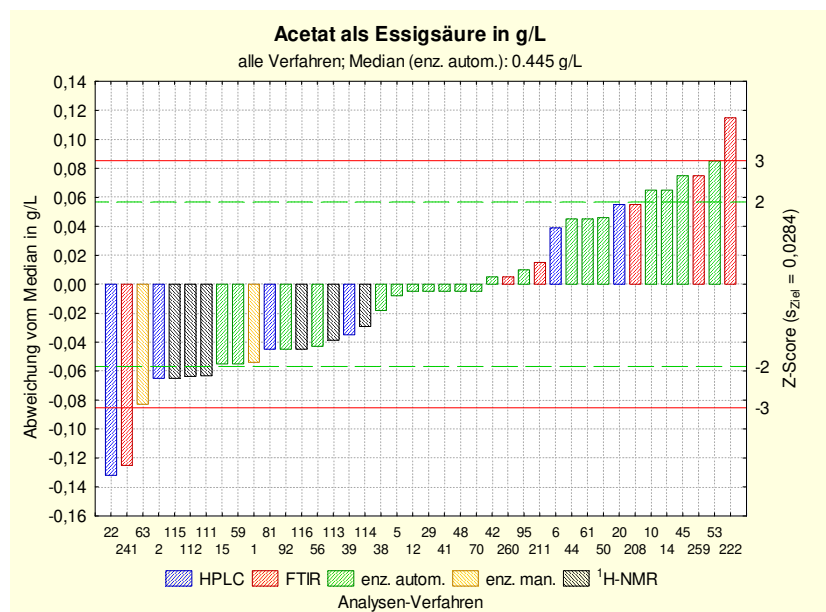
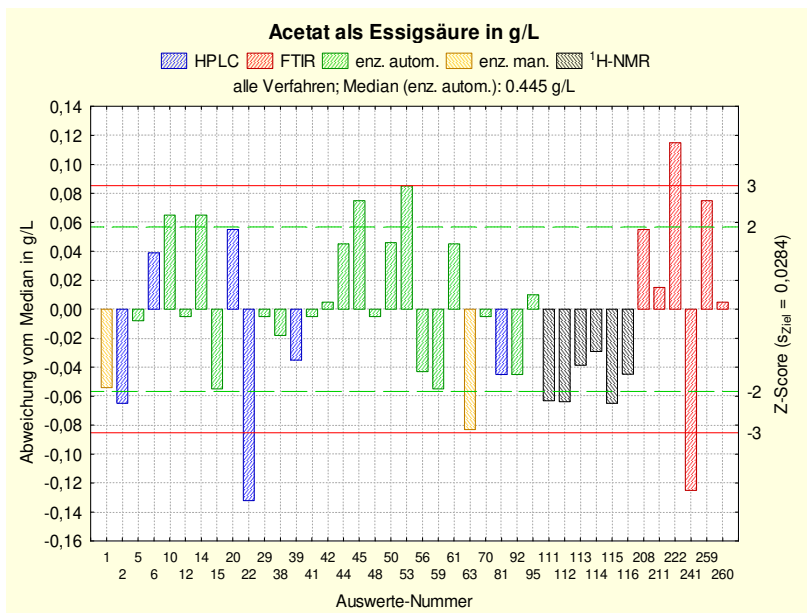
(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der maßgeblichen Werte ab.

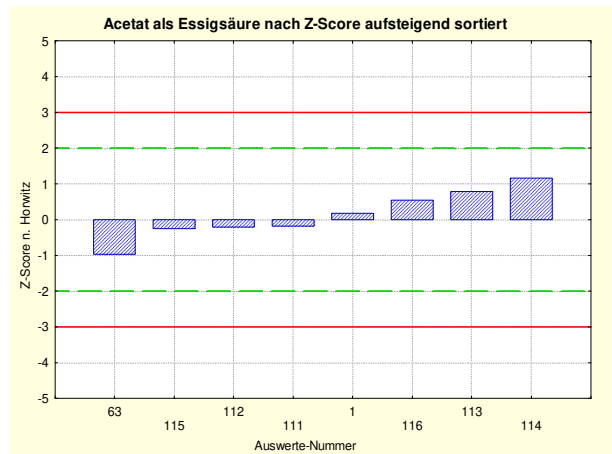
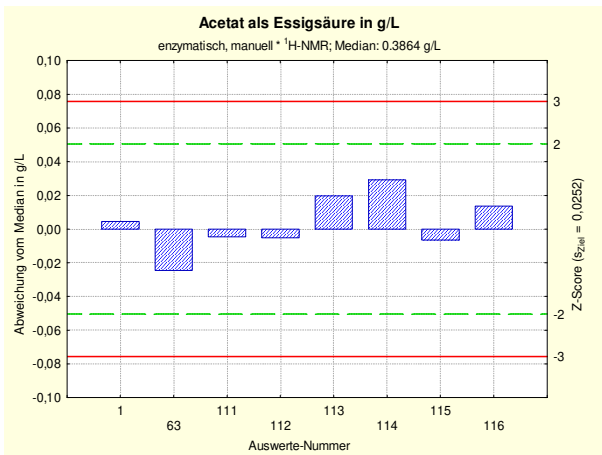
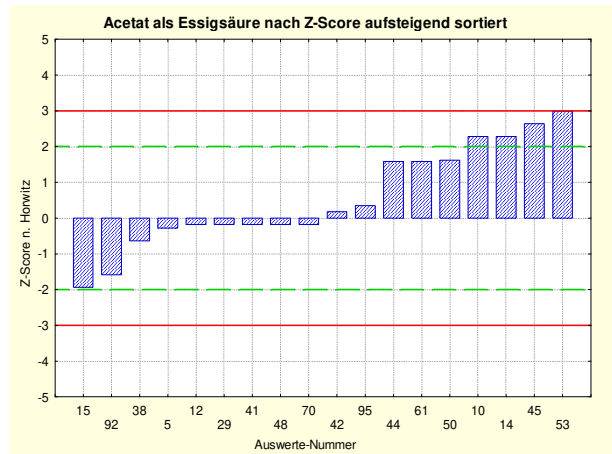
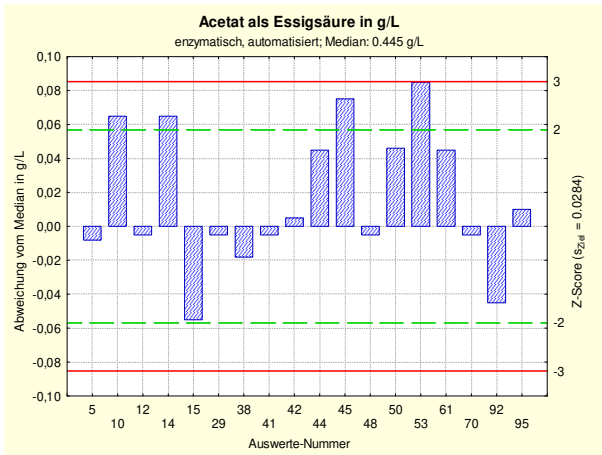
### 4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	18	0,4609	0,0456
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	0,4145	0,0783
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,3765	0,0233
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	6	0,3939	0,0168
	HPLC, enzymatisch manuell + <sup>1</sup> H-NMR	8	0,3898	0,0190
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,4733	0,0809

4.12.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	enz.man., <sup>1</sup> H-NMR alle Daten
Gültige Werte	18	8
Minimalwert	0,390	0,362
Mittelwert	0,461	0,390
Median	0,445	0,386
Maximalwert	0,530	0,416
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,041	0,017
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,010	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,028	0,025
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )		
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,44	0,68
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,34	0,24
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )		





### 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	2,01	0,000	0,00	0,00	
02	HPLC	2,14	0,135	1,32	1,95	
05	HPLC	1,98	-0,026	-0,25	-0,37	
08	HPLC	1,88	-0,126	-1,23	-1,82	
18	IC	2,32	0,314	3,08	4,57	
20	HPLC	2,19	0,184	1,81	2,68	
21	HPLC	1,82	-0,186	-1,82	-2,69	
22	HPLC	2,10	0,095	0,92	1,37	
26	HPLC	2,00	-0,006	-0,05	-0,08	
39	HPLC	2,02	0,014	0,13	0,20	
59	HPLC	2,17	0,164	1,61	2,39	
63	enzymat. Hand	1,77	-0,238	-2,32	-3,45	
81	HPLC	2,00	-0,006	-0,05	-0,08	
92	HPLC	2,16	0,155	1,51	2,24	
111	NMR	1,92	-0,082	-0,81	-1,20	
112	NMR	1,98	-0,026	-0,26	-0,38	
113	NMR	1,99	-0,015	-0,15	-0,22	
114	NMR	2,10	0,097	0,95	1,41	
115	NMR	2,06	0,054	0,53	0,79	
116	NMR	2,09	0,083	0,81	1,21	

#### 4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,98	-0,048	-0,46	-0,68	
04	enz.(L-), autom.	2,08	0,048	0,46	0,69	
05	enz.(L-), autom.	2,04	0,007	0,07	0,10	
09	enz.(L-), autom.	1,88	-0,152	-1,47	-2,19	
10	enz.(L-), autom.	3,89	1,858	17,98	26,73	(*)
12	enz.(L-), autom.	2,00	-0,032	-0,31	-0,46	
14	enz.(L-), autom.	2,25	0,218	2,11	3,14	
15	enz.(L-), autom.	2,00	-0,032	-0,31	-0,46	
29	enz.(L-), autom.	2,03	0,000	0,00	0,00	
31	enz.(L-), autom.	2,04	0,008	0,08	0,12	
38	enz.(L-), autom.	2,13	0,103	1,00	1,48	
40	enz.(L-), autom.	2,04	0,003	0,03	0,04	
41	enz.(L-), autom.	2,12	0,088	0,85	1,27	
42	enz.(L-), autom.	2,03	-0,002	-0,02	-0,03	
44	enz.(L-), autom.	2,08	0,048	0,46	0,69	
45	enz.(L-), autom.	2,03	-0,002	-0,02	-0,03	
48	enz.(L-), autom.	2,07	0,034	0,33	0,49	
50	enz.(L-), autom.	2,04	0,008	0,08	0,12	
53	enz.(L-), autom.	2,01	-0,022	-0,21	-0,32	
55	enz.(L-), autom.	2,01	-0,022	-0,21	-0,32	
56	enz.(L-), autom.	1,98	-0,052	-0,50	-0,75	
59	enz.(L-), autom.	2,04	0,008	0,08	0,12	
61	enz.(L-), autom.	2,30	0,268	2,59	3,86	
63	enz.(L-) Hand	1,77	-0,265	-2,57	-3,81	
65	enz.(L-) Hand	1,88	-0,155	-1,50	-2,23	
70	enz.(L-), autom.	2,06	0,028	0,27	0,40	
82	enz.(L-) Hand	2,02	-0,007	-0,07	-0,10	
92	enz.(L-), autom.	1,92	-0,112	-1,08	-1,61	
95	enz.(L-), autom.	2,10	0,068	0,66	0,98	
106	enz.(L-) Hand	1,89	-0,142	-1,37	-2,04	

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

## 4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,23	0,224	2,20	1,03	
202	FTIR	2,28	0,274	2,69	1,26	
203	FTIR	2,35	0,345	3,37	1,58	
204	FTIR	1,77	-0,236	-2,31	-1,08	
205	FTIR	2,08	0,075	0,73	0,34	
207	FTIR	1,70	-0,306	-2,99	-1,40	
208	FTIR	2,29	0,284	2,78	1,31	
209	FTIR	1,90	-0,106	-1,03	-0,48	
210	FTIR	2,54	0,534	5,23	2,45	
211	FTIR	2,26	0,254	2,49	1,17	
212	FTIR	2,12	0,115	1,12	0,53	
214	FTIR	3,50	1,494	14,63	6,86	(*)
215	FTIR	2,00	-0,006	-0,05	-0,03	
216	FTIR	2,70	0,695	6,80	3,19	
217	FTIR	2,23	0,224	2,20	1,03	
218	FTIR	2,42	0,414	4,06	1,90	
219	FTIR	2,00	-0,006	-0,05	-0,03	
220	FTIR	2,24	0,235	2,30	1,08	
221	FTIR	2,38	0,374	3,67	1,72	
222	FTIR	1,58	-0,425	-4,16	-1,95	
223	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
224	FTIR	2,16	0,155	1,51	0,71	
225	FTIR	2,18	0,175	1,71	0,80	
226	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
227	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
228	FTIR	2,94	0,934	9,15	4,29	
229	FTIR	1,89	-0,116	-1,13	-0,53	
231	FTIR	2,41	0,405	3,96	1,86	
232	FTIR	2,22	0,215	2,10	0,98	
234	FTIR	2,31	0,304	2,98	1,40	
236	FTIR	2,30	0,294	2,88	1,35	
237	FTIR	2,50	0,494	4,84	2,27	
240	FTIR	2,34	0,334	3,27	1,53	
241	FTIR	2,08	0,075	0,73	0,34	
242	FTIR	2,88	0,874	8,56	4,01	
243	FTIR	2,50	0,494	4,84	2,27	
244	FTIR	2,15	0,144	1,41	0,66	
245	FTIR	2,29	0,284	2,78	1,31	
247	FTIR	2,19	0,184	1,81	0,85	
249	FTIR	1,50	-0,506	-4,95	-2,32	
250	FTIR	1,32	-0,686	-6,71	-3,14	
252	FTIR	2,13	0,124	1,22	0,57	
254	FTIR	2,30	0,294	2,88	1,35	
255	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
256	FTIR	2,15	0,144	1,41	0,66	
257	FTIR	1,76	-0,246	-2,40	-1,13	
258	FTIR	2,42	0,414	4,06	1,90	
259	FTIR	2,70	0,695	6,80	3,19	
260	FTIR	2,30	0,294	2,88	1,35	
261	FTIR	2,00	-0,006	-0,05	-0,03	
262	FTIR	2,40	0,394	3,86	1,81	
265	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
266	FTIR	3,33	1,325	12,96	6,08	(*)
267	FTIR	2,50	0,494	4,84	2,27	
268	FTIR	2,38	0,374	3,67	1,72	
269	FTIR	2,24	0,235	2,30	1,08	
270	FTIR	2,06	0,054	0,53	0,25	
271	FTIR	1,84	-0,165	-1,62	-0,76	
272	FTIR	2,65	0,644	6,31	2,96	
273	FTIR	2,01	0,004	0,04	0,02	
275	FTIR	2,27	0,264	2,59	1,21	
276	FTIR	2,30	0,294	2,88	1,35	
277	FTIR	2,11	0,104	1,02	0,48	
278	FTIR	1,87	-0,135	-1,33	-0,62	
279	FTIR	2,60	0,595	5,82	2,73	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

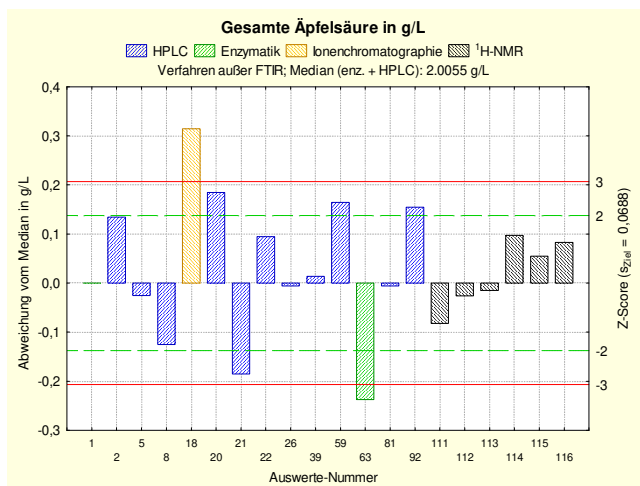
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	2,80	0,794	7,78	3,64	
281	FTIR	2,46	0,454	4,45	2,08	
282	FTIR	2,30	0,294	2,88	1,35	
284	FTIR	2,50	0,494	4,84	2,27	
285	FTIR	2,50	0,494	4,84	2,27	
287	FTIR	1,45	-0,556	-5,44	-2,55	
288	FTIR	1,43	-0,576	-5,63	-2,64	
320	FTIR	2,22	0,215	2,10	0,98	
337	FTIR	2,20	0,195	1,90	0,89	
365	FTIR	1,90	-0,106	-1,03	-0,48	

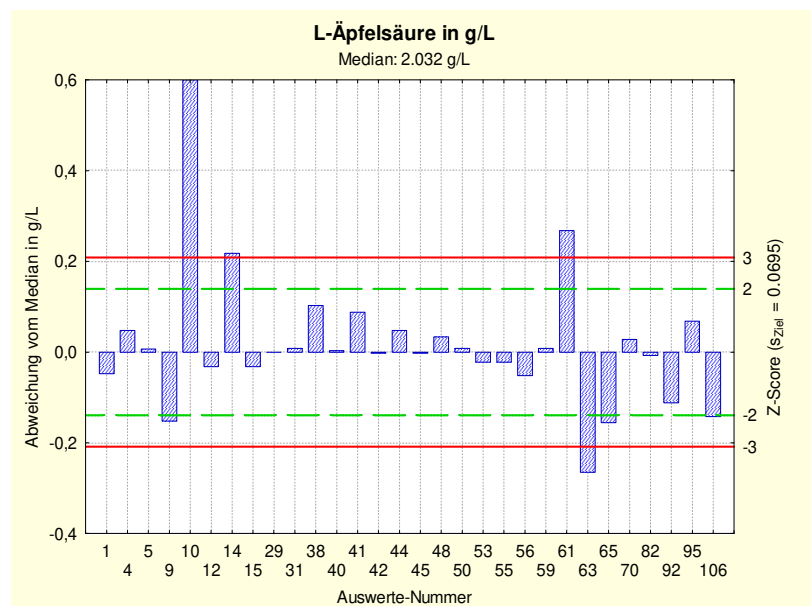
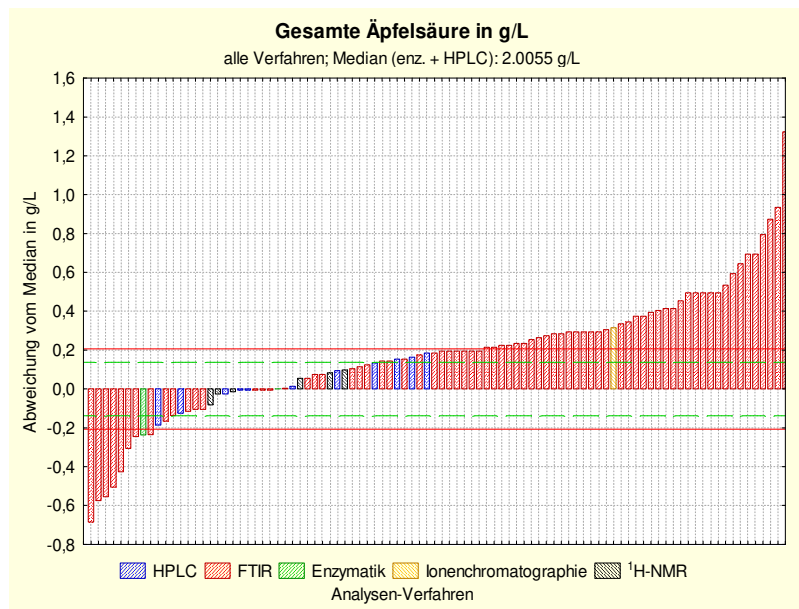
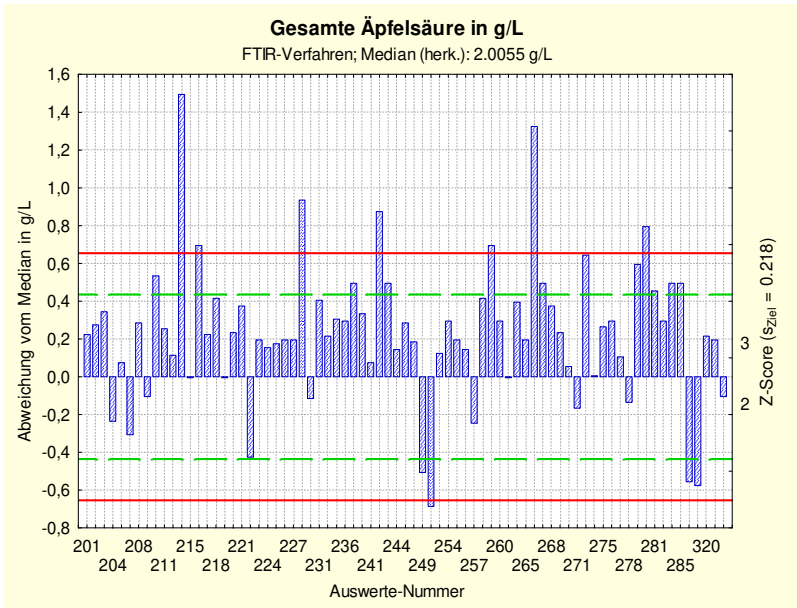
**4.13.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	13	29
Minimalwert	1,77	1,77
Mittelwert	2,018	2,028
Median	2,006	2,032
Maximalwert	2,19	2,30
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,135	0,105
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,037	0,019
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,102	0,103
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,069	0,070
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,32	1,01
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,96	1,51
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,62	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,37	0,19
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,54	0,28
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,17	

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	2,044	0,134
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	2	1,887	0,190
	HPLC- + enzymat. Verfahren Gesamte Äpfelsäure	13	2,020	0,147
IC	Ionenchromatographie	1	2,320	
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	2,234	0,290
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,024	0,080
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	25	2,051	0,064
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	1,909	0,114
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	30	2,032	0,084







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

### 4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,223	0,010	0,66	
02	HPLC	0,486	0,273	17,95	(*)
04	enzymat. autom.	0,270	0,057	3,75	
05	enzymat. autom.	0,238	0,025	1,64	
08	HPLC	n.b., BG:			
09	enzymat. autom.	0,210	-0,003	-0,20	
18	IC	<NG			
20	HPLC	0,190	-0,023	-1,51	
21	HPLC	0,120	-0,093	-6,12	(**)
22	HPLC	0,200	-0,013	-0,85	
26	HPLC	<= 0			
39	HPLC	<0,2			
59	HPLC	0,260	0,047	3,09	
63	enzymat. Hand	0,213	0,000	0,00	
65	enzymat. Hand	0,286	0,073	4,79	
70	enzymat. autom.	0,200	-0,013	-0,85	
81	HPLC	0,200	-0,013	-0,85	
92	HPLC	0,381	0,168	11,05	(*)
95	enzymat. autom.	0,240	0,027	1,78	
106	enzymat. Hand	0,160	-0,053	-3,49	
111	NMR	0,206	-0,007	-0,46	
112	NMR	0,217	0,004	0,26	
113	NMR	0,213	0,000	0,03	
114	NMR	0,220	0,007	0,45	
115	NMR	0,240	0,027	1,78	
116	NMR	0,216	0,003	0,22	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und werden nicht berücksichtigt.

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

### 4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,104	-0,006	-0,69	-0,27	
04	enz.(L-) autom.	0,130	0,020	2,31	0,89	
05	enz.(L-) autom.	0,112	0,002	0,23	0,09	
09	enz.(L-) autom.	0,102	-0,008	-0,92	-0,36	
10	enz.(L-) autom.	0,090	-0,020	-2,31	-0,89	
12	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
14	enz.(L-) autom.	0,099	-0,011	-1,27	-0,49	
15	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
29	enz.(L-) autom.	0,121	0,011	1,27	0,49	
31	enz.(L-) autom.	0,130	0,020	2,31	0,89	
38	enz.(L-) autom.	0,020	-0,090	-10,38	-4,00	
40	enz.(L-) autom.	0,200	0,090	10,38	4,00	
41	enz.(L-) autom.	0,070	-0,040	-4,61	-1,78	
42	enz.(L-) autom.	0,130	0,020	2,31	0,89	
44	enz.(L-) autom.	<0,1				
45	enz.(L-) autom.	<0,05				
48	enz.(L-) autom.	<= 0				
50	enz.(L-) autom.	0,120	0,010	1,15	0,44	
53	enz.(L-) autom.	0,210	0,100	11,53	4,44	
55	enz.(L-) autom.	<= 0				
56	enz.(L-) autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
59	enz.(L-) autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
61	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
63	enz.(L-) Hand	0,103	-0,007	-0,81	-0,31	
65	enz.(L-) Hand	0,169	0,059	6,78	2,61	
70	enz.(L-) autom.	0,104	-0,006	-0,70	-0,27	
82	enz.(L-) Hand	0,172	0,062	7,15	2,75	
90	enz.(L-) autom.	<BG(0,25)				
95	enz.(L-) autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
106	enz.(L-) Hand	0,070	-0,040	-4,61	-1,78	

**4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Keine Berechnung von Z-Scores, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereiches.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,370	0,157			(*)
202	FTIR	0,327	0,114			
203	FTIR	0,420	0,207			(*)
204	FTIR	0,190	-0,023			
205	FTIR	0,220	0,007			
207	FTIR	0,100	-0,113			(*)
208	FTIR	0,140	-0,073			
209	FTIR	<= 0				
210	FTIR	0,180	-0,033			
211	FTIR	0,560	0,347			(*)
212	FTIR	0,010	-0,203			(*)
214	FTIR	0,500	0,287			(*)
215	FTIR	0,400	0,187			(*)
216	FTIR	0,020	-0,193			(*)
217	FTIR	0,450	0,237			(*)
218	FTIR	0,350	0,137			(*)
219	FTIR	0,400	0,187			(*)
220	FTIR	0,560	0,347			(*)
221	FTIR	-0,530	-0,743			(*)
222	FTIR	< 0,3				
223	FTIR	0,200	-0,013			
224	FTIR	0,820	0,607			(*)
225	FTIR	0,530	0,317			(*)
226	FTIR	0,200	-0,013			
227	FTIR	0,210	-0,003			
228	FTIR	0,450	0,237			(*)
229	FTIR	-0,040	-0,253			(*)
231	FTIR	0,480	0,267			(*)
232	FTIR	0,230	0,017			
234	FTIR	0,340	0,127			(*)
236	FTIR	0,300	0,087			
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	0,270	0,057			
241	FTIR	-0,070	-0,283			(*)
242	FTIR	0,740	0,527			(*)
243	FTIR	0,300	0,087			
244	FTIR	0,020	-0,193			(*)
245	FTIR	0,270	0,057			
247	FTIR	0,120	-0,093			(**)
249	FTIR	0,700	0,487			(*)
250	FTIR	0,680	0,467			(*)
252	FTIR	0,140	-0,073			
254	FTIR	0,200	-0,013			
255	FTIR	0,100	-0,113			(*)
256	FTIR	0,350	0,137			(*)
257	FTIR	0,240	0,027			
259	FTIR	0,700	0,487			(*)
260	FTIR	0,200	-0,013			
261	FTIR	0,100	-0,113			(*)
262	FTIR	<= 0				
265	FTIR	<= 0				
266	FTIR	0,660	0,447			(*)
267	FTIR	0,100	-0,113			(*)
268	FTIR	0,230	0,017			
269	FTIR	0,090	-0,123			(*)
270	FTIR	0,060	-0,153			(*)
271	FTIR	0,470	0,257			(*)
272	FTIR	0,350	0,137			(*)
273	FTIR	0,240	0,027			
275	FTIR	0,350	0,137			(*)
276	FTIR	0,500	0,287			(*)
277	FTIR	0,260	0,047			
278	FTIR	0,380	0,167			(*)

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
279	FTIR	0,700	0,487			(*)
280	FTIR	0,170	-0,043			
281	FTIR	0,010	-0,203			(*)
282	FTIR	0,400	0,187			(*)
284	FTIR	0,100	-0,113			(*)
285	FTIR	0,300	0,087			
287	FTIR	0,450	0,237			(*)
288	FTIR	0,390	0,177			(*)
320	FTIR	0,250	0,037			
337	FTIR	0,200	-0,013			
365	FTIR	<= 0				

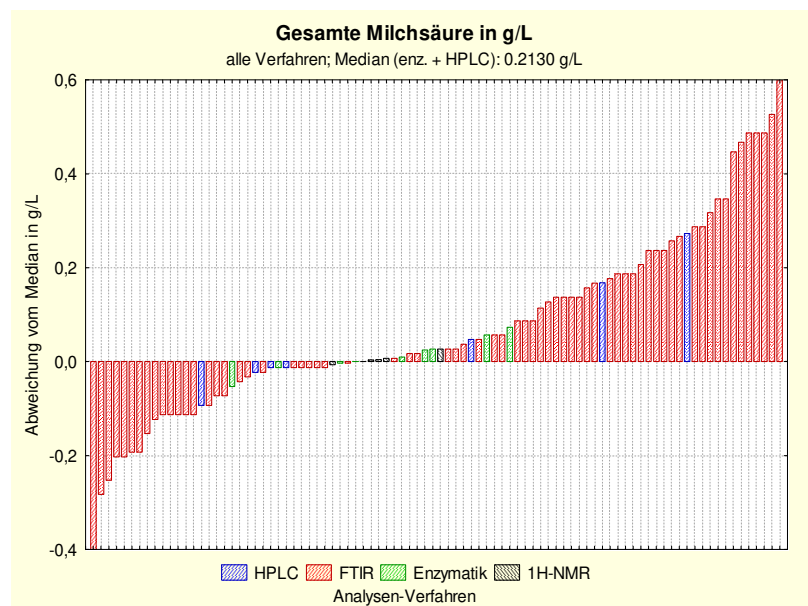
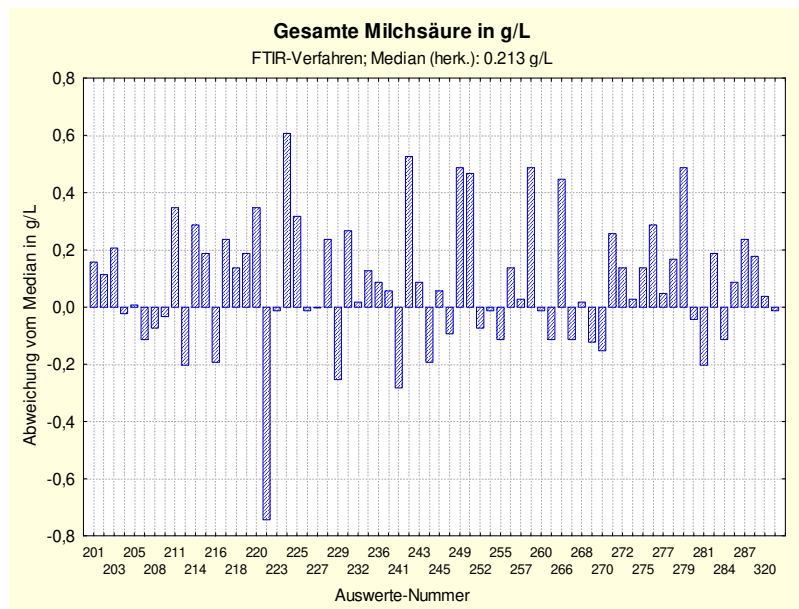
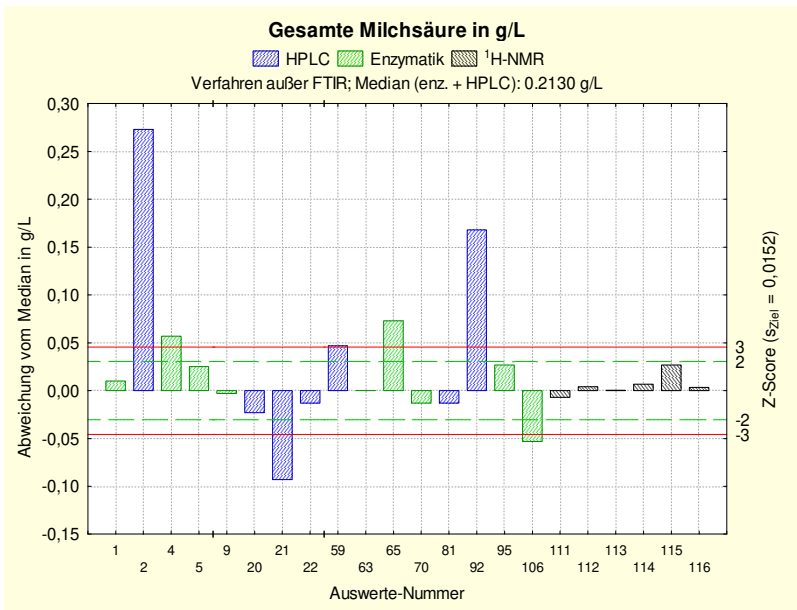
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

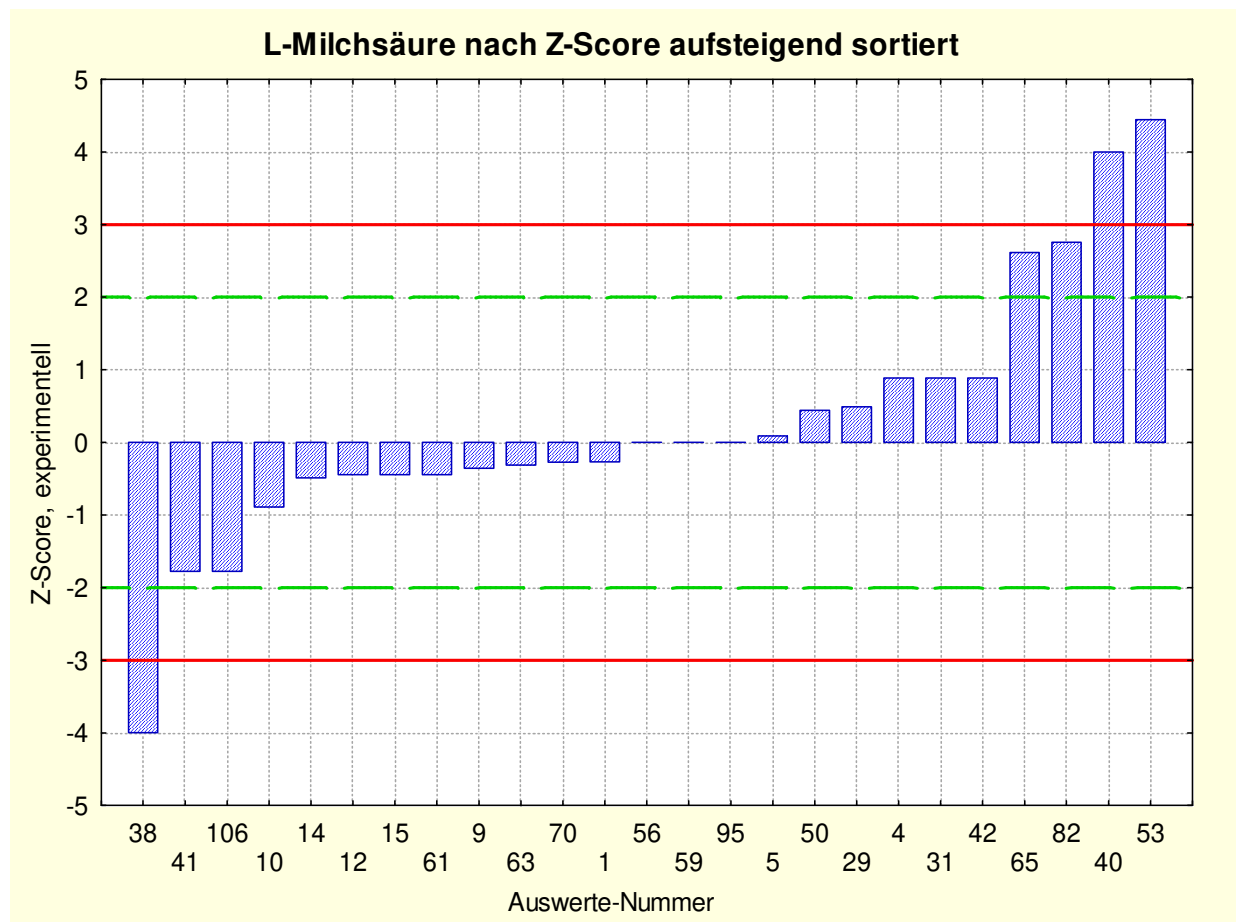
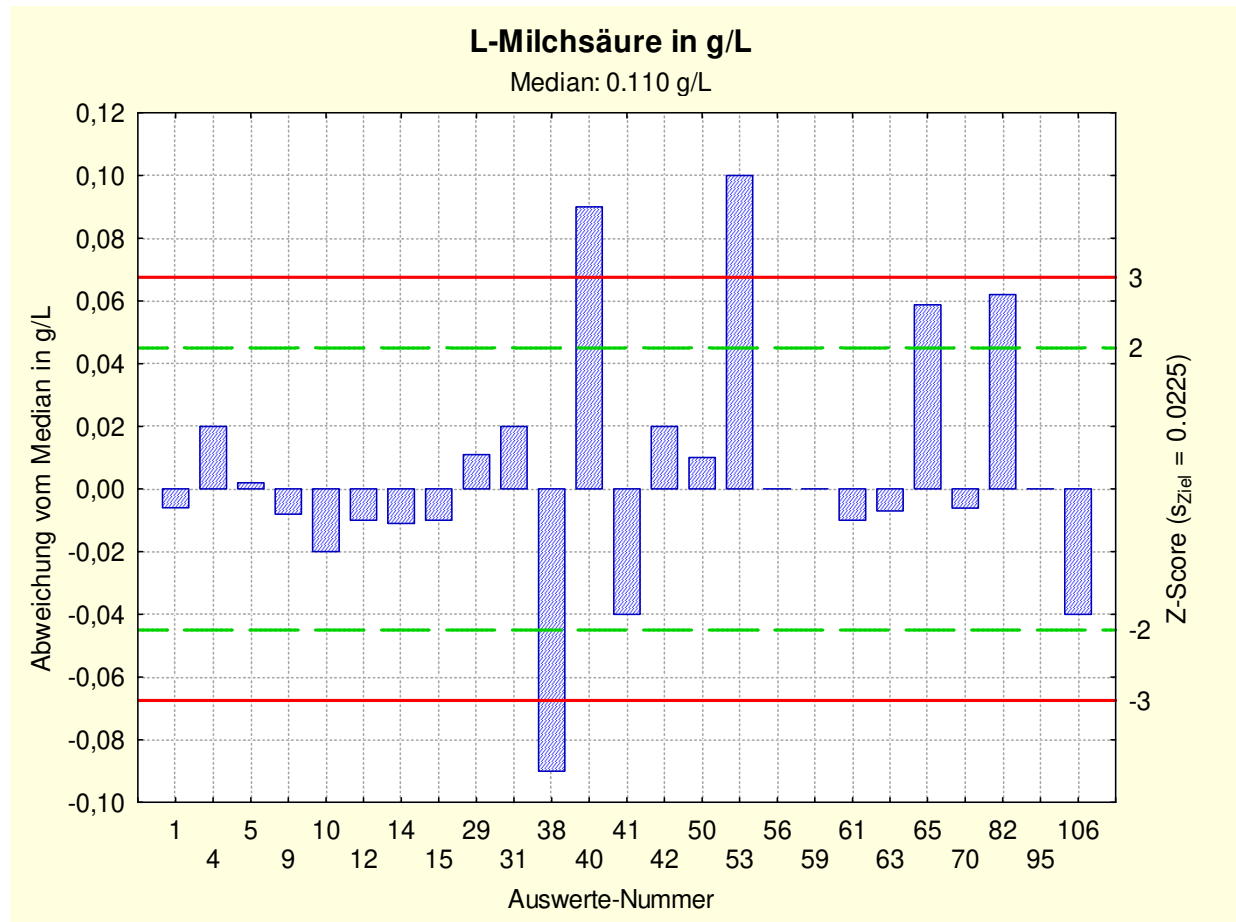
**4.14.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	14	13	25
Minimalwert	0,12	0,16	0,02
Mittelwert	0,215	0,222	0,115
Median	0,211	0,213	0,110
Maximalwert	0,29	0,29	0,21
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,044	0,035	0,040
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,012	0,010	0,008
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,015	0,015	0,009
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,023
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,209	0,209	
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,88	2,32	4,61
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			1,78
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,77	0,64	0,92
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			0,36
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )			

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	0,2559	0,1314
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	0,2316	0,0313
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	0,2205	0,0586
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	16	0,2276	0,0528
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	68	0,2931	0,2089
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	0,2174	0,0090
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	0,1105	0,0201
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,1236	0,0509
	alle Verfahren L-Milchsäure	25	0,1122	0,0286





## 4.15 Reduktone [mg/L]

### 4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	1,0	-4,00	-6,37	(*)
11	Glyoxal/potentiometr.	7,0	2,00	3,19	
12	Glyoxal/potentiometr.	5,0	0,00	0,00	
25	Glyoxal/potentiometr.	4,4	-0,62	-0,99	
26	Glyoxal/potentiometr.	9,0	4,00	6,37	(*)
29	Glyoxal/Stärke	9,0	4,00	6,37	(*)
35	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
39	Glyoxal/potentiometr.	4,1	-0,90	-1,43	
41	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
42	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
43	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
56	Glyoxal/MTT	0,1	-4,90	-7,80	(*)
61	Glyoxal/Stärke	0,0	-5,00	-7,96	(*)
66	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
67	Glyoxal/potentiometr.	11,0	6,00	9,56	(*)
69	Glyoxal/potentiometr.	4,0	-1,00	-1,59	
70	Glyoxal/potentiometr.	6,9	1,93	3,07	
72	Glyoxal/potentiometr.	8,0	3,00	4,78	
73	Glyoxal/Stärke	10,0	5,00	7,96	(*)
75	Glyoxal/Stärke	10,0	5,00	7,96	(*)
78	Glyoxal/Stärke	0,0	-5,00	-7,96	(*)
80	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
84	Glyoxal/Stärke	8,0	3,00	4,78	

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

#### Anmerkung:

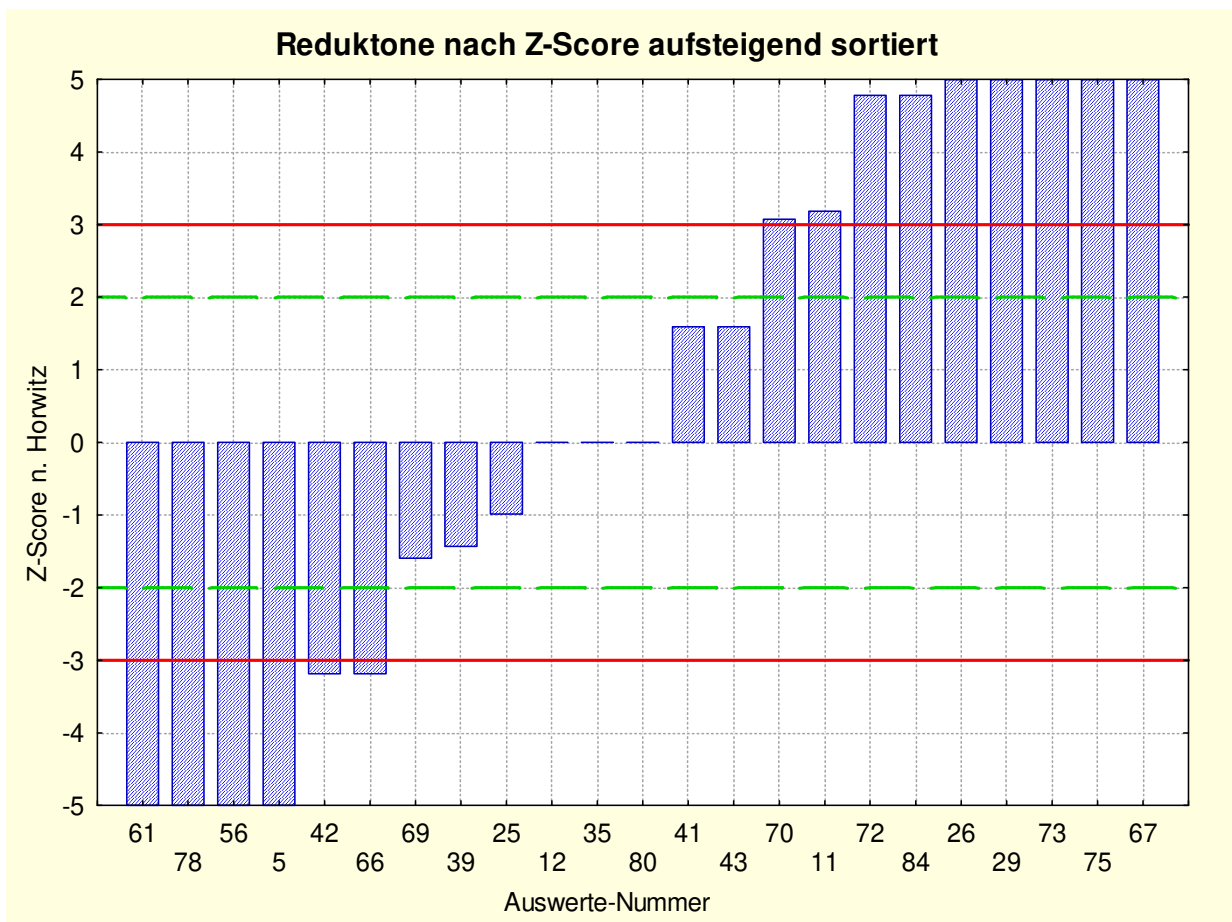
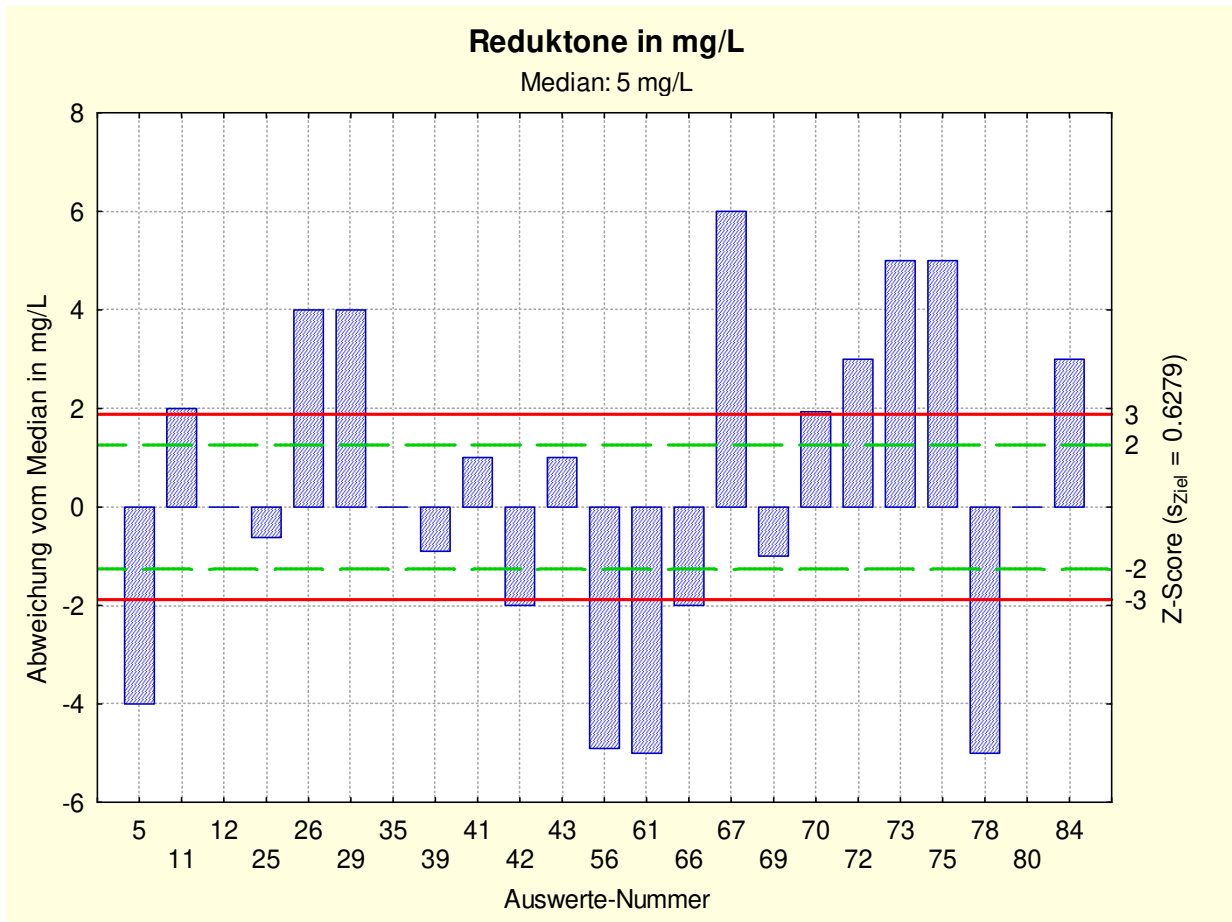
Da der Quotient  $s_L/s_H$  über 2,0 und der Quotient  $u_M/s_H$  über 0,5 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Bewertung der Laborleistung dar und werden deshalb in grauer Schriftfarbe dargestellt.

### 4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	14
Minimalwert	3,0
Mittelwert	5,39
Median	5,00
Maximalwert	8,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,660
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,444
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,628
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,64
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,71
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	

### 4.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	1,00	
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	12	5,42	3,94
Glyoxal/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	9	6,55	2,66
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	0,10	
alle Verfahren		23	5,42	3,65



## 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
01	LwK 6.2	16,0	2,65	1,83	
02	LwK 6.2	9,7	-3,65	-2,52	
04	LwK 6.3	15,0	1,65	1,14	
05	LwK 6.2	8,1	-5,25	-3,63	
06	LwK 6.2	11,8	-1,55	-1,07	
08	LwK 6.2	14,0	0,65	0,45	
09	LwK 6.2	15,2	1,85	1,28	
10	LwK 6.4	8,0	-5,35	-3,70	
12	LwK 6.3	18,0	4,65	3,22	
45	LwK 6.3	21,0	7,65	5,29	(*)
53	LwK 6.3	9,0	-4,35	-3,01	
55	LwK 6.4	12,0	-1,35	-0,93	
56	LwK 6.4	13,7	0,35	0,24	
63	LwK 6.2	13,9	0,55	0,38	
91	LwK 6.2	13,0	-0,35	-0,24	
92	LwK 6.3	5,7	-7,70	-5,32	(*)
102	LwK 6.3	16,0	2,65	1,83	
104	LwK 6.2	9,2	-4,15	-2,87	
202	LwK 6.5	18,0	4,65	3,22	
205	LwK 6.5	9,0	-4,35	-3,01	
206	LwK 6.5	11,9	-1,45	-1,00	
208	LwK 6.5	14,8	1,45	1,00	
210	LwK 6.5	10,0	-3,35	-2,32	
212	LwK 6.5	25,0	11,65	8,06	(*)
215	LwK 6.5	22,0	8,65	5,98	(*)
218	LwK 6.5	14,0	0,65	0,45	
224	LwK 6.5	16,0	2,65	1,83	
236	LwK 6.5	15,0	1,65	1,14	
237	LwK 6.5	11,0	-2,35	-1,63	
244	LwK 6.5	16,0	2,65	1,83	
249	LwK 6.5	15,0	1,65	1,14	
251	LwK 6.5	20,0	6,65	4,60	
252	LwK 6.5	17,0	3,65	2,52	
254	LwK 6.5	17,0	3,65	2,52	
258	LwK 6.5	28,2	14,85	10,27	(*)
262	LwK 6.5	22,0	8,65	5,98	(*)
263	LwK 6.5	16,0	2,68	1,85	
264	LwK 6.5	12,0	-1,35	-0,93	
266	LwK 6.5	30,0	16,65	11,51	(*)
267	LwK 6.5	9,0	-4,35	-3,01	
281	LwK 6.5	14,0	0,65	0,45	
282	LwK 6.5	22,0	8,65	5,98	(*)
283	LwK 6.5	20,0	6,65	4,60	
285	LwK 6.5	19,0	5,65	3,91	
337	LwK 6.5	11,0	-2,35	-1,63	
365	LwK 6.5	22,0	8,65	5,98	(*)

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

### 4.16.2 Laborergebnisse, jodometrisch

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
11	LwK 6.1(incl.Red.)	16,0	2,00	1,33	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	15,0	1,00	0,66	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	17,0	3,00	1,99	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	8,0	-6,00	-3,98	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	13,5	-0,50	-0,33	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	14,0	0,00	0,00	



**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrisch**

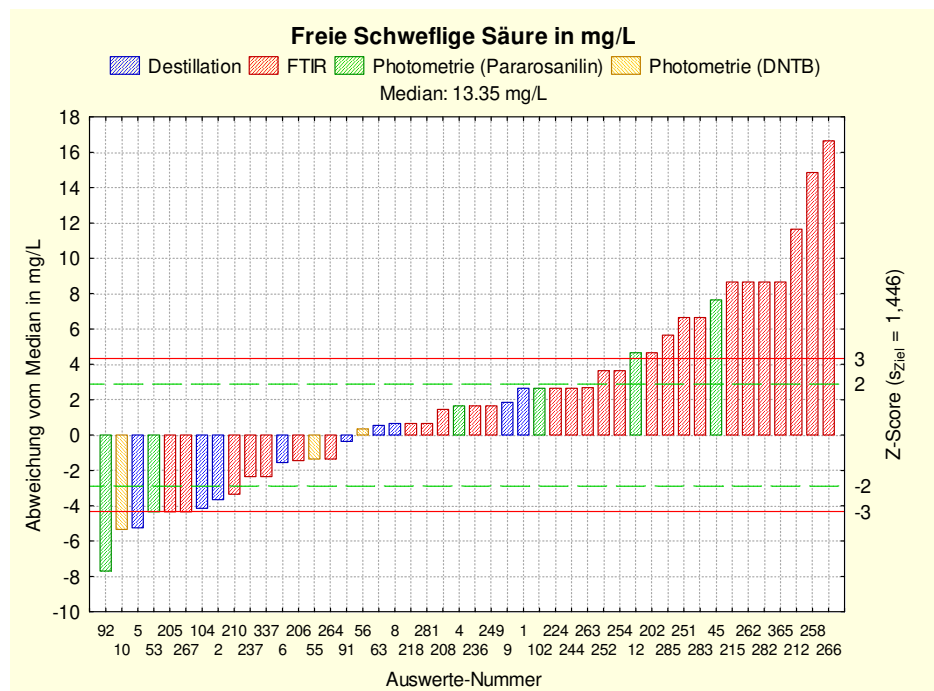
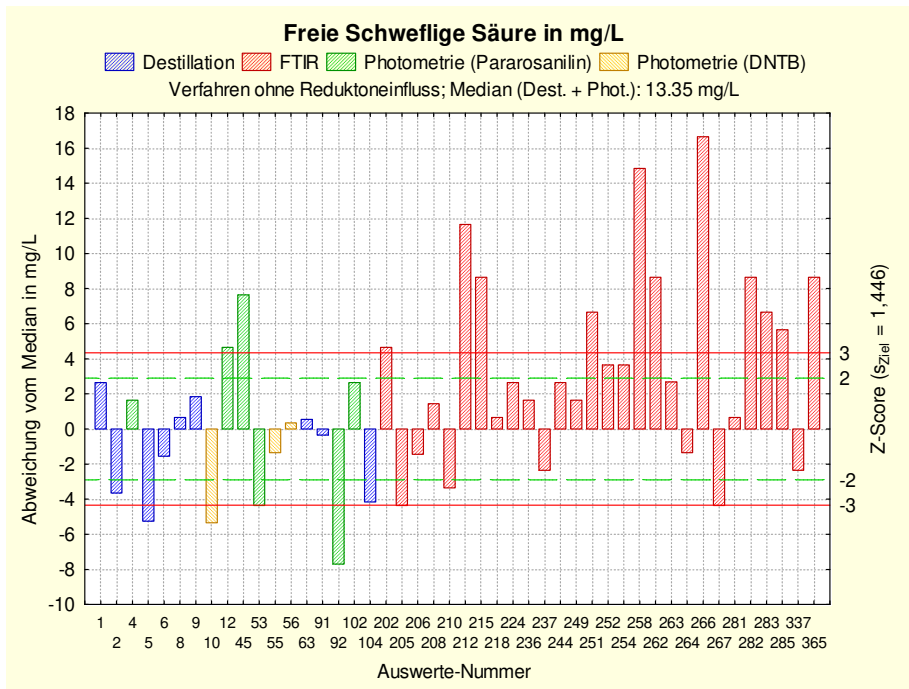
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	16,0	2,00	1,33	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	10,00	6,64	(*)
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	10,0	-4,00	-2,66	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	15,1	1,10	0,73	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,0	-2,00	-1,33	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	10,0	-4,00	-2,66	
29	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	17,0	3,00	1,99	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	14,0	0,00	0,00	
35	LwK 6.1 (incl.Red.)	20,0	6,00	3,98	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	15,0	1,00	0,66	
37	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	
38	Redox incl.	14,0	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	15,1	1,10	0,73	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	9,0	-5,00	-3,32	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	7,00	4,65	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	15,0	1,00	0,66	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	-5,00	-3,32	
48	LwK 6.1 (incl.Red.)	14,0	0,00	0,00	
49	LwK 6.1 (incl.Red.)	11,0	-3,00	-1,99	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	11,0	-3,00	-1,99	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	8,0	-6,00	-3,98	
59	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,5	3,50	2,32	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	16,0	2,00	1,33	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	14,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	17,0	3,00	1,99	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	12,0	-2,00	-1,33	
69	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	3,00	1,99	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	10,0	-4,00	-2,66	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	17,0	3,00	1,99	
74	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,8	-0,25	-0,17	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,0	4,00	2,66	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	16,0	2,00	1,33	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	7,0	-7,00	-4,65	
79	Redox incl.	11,0	-3,00	-1,99	
80	LwK 6.1 (excl.Red.)	4,0	-10,00	-6,64	(*)
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,4	-0,60	-0,40	
82	LwK 6.1 (incl.Red.)	16,0	2,00	1,33	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	14,0	0,00	0,00	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	15,0	1,00	0,66	
85	LwK 6.1 (incl.Red.)	18,0	4,00	2,66	
86	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	
106	LwK 6.1 (incl.Red.)	13,0	-1,00	-0,66	

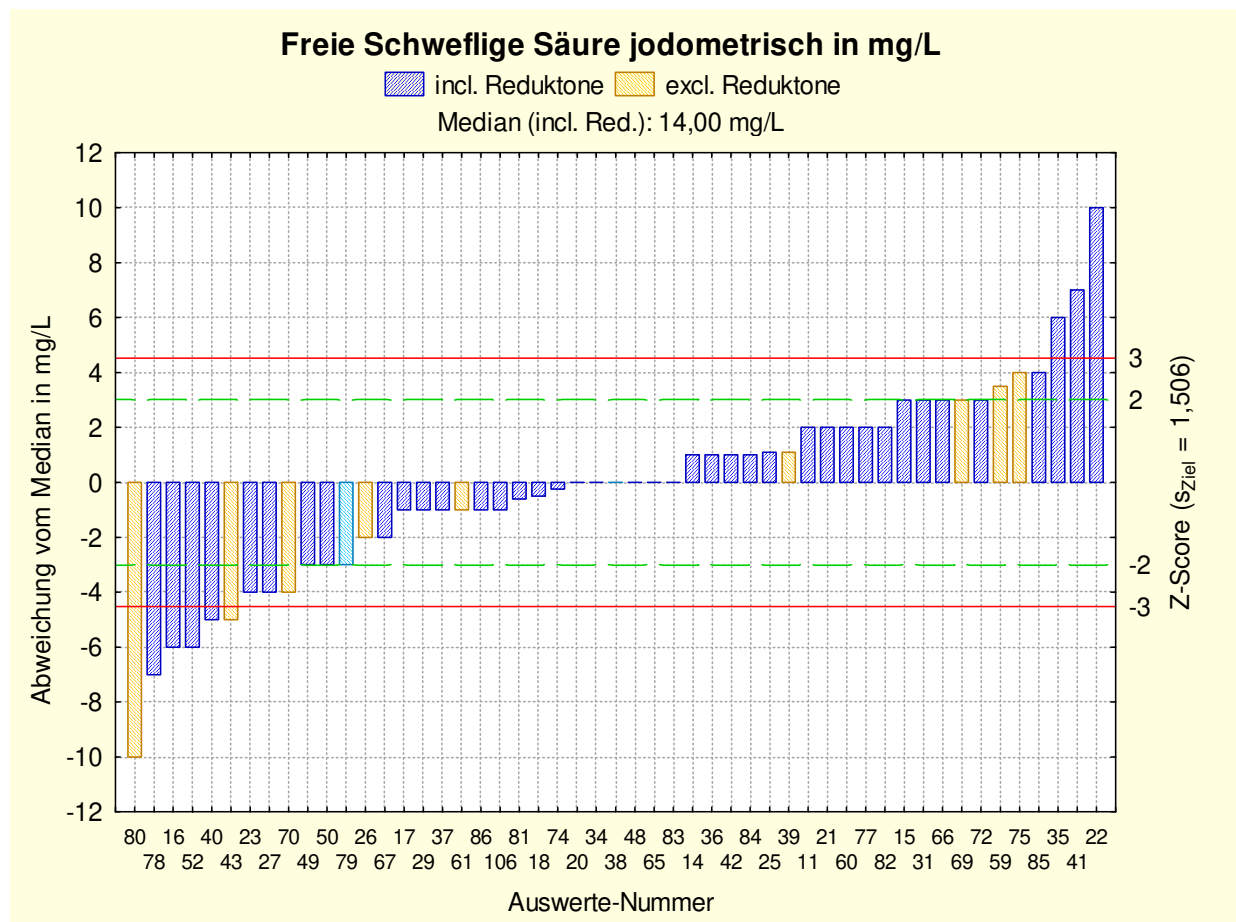
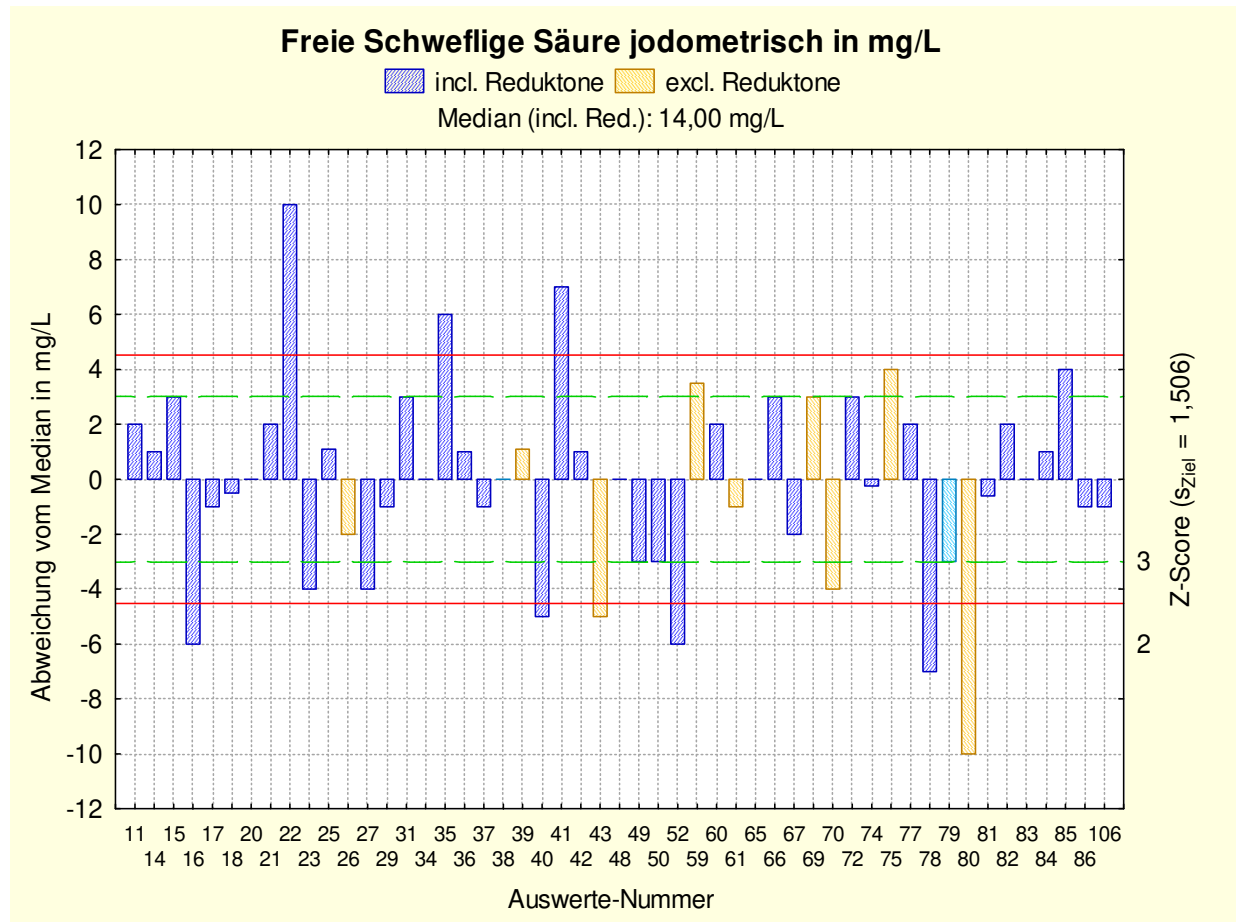
**4.16.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie alle Daten	Verfahren ohne Reduktoneinfluss alle Daten	jodometrisch incl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	16	42	40
Minimalwert	8,0	8,0	7,0
Mittelwert	12,66	14,70	13,84
Median	13,35	14,90	14,00
Maximalwert	18,0	22,0	21,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	3,110	4,121	3,100
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,778	0,636	0,490
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ ) - n. Horwitz incl. Reduktone <sup>7)</sup> ( $s_H$ incl. Red.)	1,446	1,588	1,506
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	<b>2,15</b>	<b>2,60</b>	<b>2,06</b>
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )			
Quotient ( $u_M/s_H$ )	<b>0,54</b>	<b>0,40</b>	0,33
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			

4.16.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox incl.	Jodometrische Bestimmung mit pH-Meter mV-Modus und der Redoxelektrode incl. Reduktone	2	12,50	2,41
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - ohne Abzug der Reduktone	38	14,24	2,96
	alle Verfahren inclusive Reduktone	40	14,14	2,93
LwK 6.1 (excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	10	13,34	4,36
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	12,32	3,16
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	6	14,27	6,20
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	11,31	3,18
	Destillations- und photometrische Verfahren	18	12,66	4,08
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	16,74	5,55
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	46	15,07	5,20





## 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 7.3	118,0	29,00	4,00	5,41	(**)
02	LwK 7.3	82,7	-6,30	-0,87	-1,18	
04	LwK 7.7	95,0	6,00	0,83	1,12	
05	LwK 7.3	86,7	-2,30	-0,32	-0,43	
06	LwK 7.4.2	94,0	5,00	0,69	0,93	
08	LwK 7.3	92,5	3,50	0,48	0,65	
09	LwK 7.3	94,1	5,10	0,70	0,95	
10	LwK 7.4.2	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
11	LwK 7.3	86,0	-3,00	-0,41	-0,56	
12	LwK 7.4.2	94,0	5,00	0,69	0,93	
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	5,00	0,69	0,93	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	1,00	0,14	0,19	
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	18,00	2,48	3,36	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	-4,00	-0,55	-0,75	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	89,0	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	1,00	0,14	0,19	
22	LwK 7.4.2m	96,0	7,00	0,97	1,31	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	-8,00	-1,10	-1,49	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,1	2,14	0,30	0,40	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	-11,00	-1,52	-2,05	
29	LwK 7.4.1	89,0	0,00	0,00	0,00	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	98,0	9,00	1,24	1,68	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	1,00	0,14	0,19	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-13,00	-1,79	-2,43	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	93,0	4,00	0,55	0,75	
37	LwK 7.4.1	86,5	-2,50	-0,35	-0,47	
38	LwK 7.7	97,0	8,00	1,10	1,49	
40	LwK 7.4.1	84,5	-4,50	-0,62	-0,84	
41	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
42	LwK 7.4.2	91,0	2,00	0,28	0,37	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	69,0	-20,00	-2,76	-3,73	
44	LwK 7.4.1	96,0	7,00	0,97	1,31	
45	LwK 7.7	116,0	27,00	3,73	5,04	
48	LwK 7.4.2	83,0	-6,00	-0,83	-1,12	
49	LwK 7.4.2	85,0	-4,00	-0,55	-0,75	
50	LwK 7.4.2	87,0	-2,00	-0,28	-0,37	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	81,0	-8,00	-1,10	-1,49	
53	LwK 7.4.1	90,0	1,00	0,14	0,19	
55	LwK 7.7	94,1	5,10	0,70	0,95	
56	LwK 7.7	95,4	6,40	0,88	1,19	
59	LwK 7.5.3(excl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	98,0	9,00	1,24	1,68	
61	LwK 7.3	83,0	-6,00	-0,83	-1,12	
63	LwK 7.3	87,6	-1,40	-0,19	-0,26	
65	LwK 7.4.2	77,0	-12,00	-1,66	-2,24	
66	LwK 7.5.3(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
67	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	-3,00	-0,41	-0,56	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	99,0	10,00	1,38	1,87	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,2	-2,79	-0,39	-0,52	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
74	LwK 7.1	63,2	-25,80	-3,56	-4,82	
75	LwK 7.4.2	77,0	-12,00	-1,66	-2,24	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	-11,00	-1,52	-2,05	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	80,0	-9,00	-1,24	-1,68	
80	LwK 7.5.3(excl. Red.)	74,0	-15,00	-2,07	-2,80	
81	LwK 7.2	92,3	3,30	0,46	0,62	
82	LwK 7.4.1	94,0	5,00	0,69	0,93	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	110,0	21,00	2,90	3,92	

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

**Fortsetzung Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	95,0	6,00	0,83	1,12	
85	LwK 7.5.1(incl. Red.)	95,0	6,00	0,83	1,12	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	95,0	6,00	0,83	1,12	
91	LwK 7.3	97,0	8,00	1,10	1,49	
92	LwK 7.6	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
96	LwK 7.4.2	93,0	4,00	0,55	0,75	
97	LwK 7.4.2	93,0	4,00	0,55	0,75	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	-3,00	-0,41	-0,56	
101	LwK 7.4.2	97,0	8,00	1,10	1,49	
102	LwK 7.6	96,0	7,00	0,97	1,31	
103	LwK 7.7	86,0	-3,00	-0,41	-0,56	
104	LwK 7.3	90,9	1,90	0,26	0,35	
106	LwK 7.4.2	80,0	-9,00	-1,24	-1,68	
202	LwK 7.8	93,5	4,50	0,62	0,84	
205	LwK 7.8	78,0	-11,00	-1,52	-2,05	
206	LwK 7.8	88,1	-0,90	-0,12	-0,17	
207	FTIR(direkt)	143,0	54,00	7,45	10,08	(*)
208	LwK 7.8	124,0	35,00	4,83	6,53	(***)
210	LwK 7.8	100,0	11,00	1,52	2,05	
212	LwK 7.8	103,0	14,00	1,93	2,61	
215	LwK 7.8	93,0	4,00	0,55	0,75	
218	LwK 7.8	90,0	1,00	0,14	0,19	
224	LwK 7.8	99,0	10,00	1,38	1,87	
236	LwK 7.8	89,0	0,00	0,00	0,00	
237	LwK 7.8	82,0	-7,00	-0,97	-1,31	
244	LwK 7.8	97,0	8,00	1,10	1,49	
249	LwK 7.8	95,0	6,00	0,83	1,12	
251	LwK 7.8	85,0	-4,00	-0,55	-0,75	
252	LwK 7.8	75,0	-14,00	-1,93	-2,61	
254	LwK 7.8	96,0	7,00	0,97	1,31	
258	LwK 7.8	108,0	19,00	2,62	3,55	
262	LwK 7.8	87,0	-2,00	-0,28	-0,37	
263	LwK 7.8	88,8	-0,22	-0,03	-0,04	
264	LwK 7.8	82,0	-7,00	-0,97	-1,31	
266	LwK 7.8	110,0	21,00	2,90	3,92	
267	LwK 7.8	81,0	-8,00	-1,10	-1,49	
281	LwK 7.8	106,0	17,00	2,35	3,17	
282	LwK 7.8	106,0	17,00	2,35	3,17	
283	LwK 7.8	107,0	18,00	2,48	3,36	
285	LwK 7.8	80,0	-9,00	-1,24	-1,68	
337	LwK 7.8	83,0	-6,00	-0,83	-1,12	
365	LwK 7.8	67,0	-22,00	-3,04	-4,11	

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

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

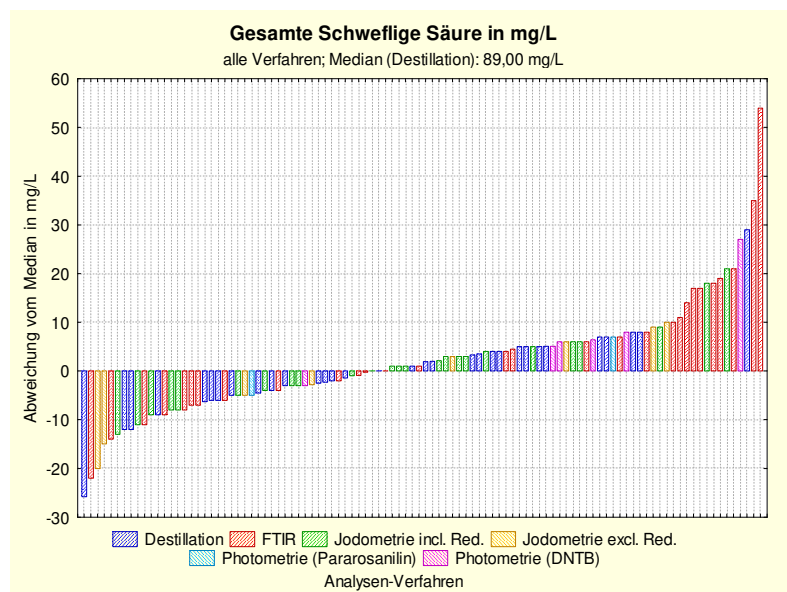
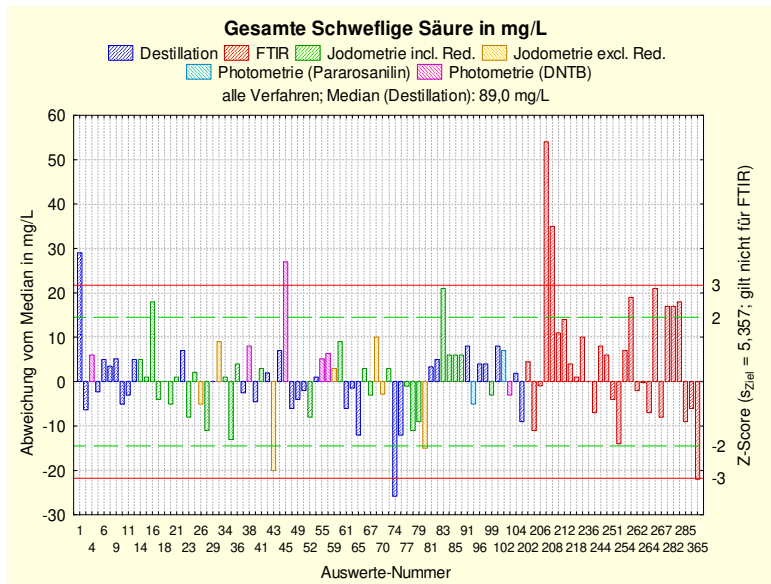
Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die  $Z\text{-Score}_{\text{Horwitz}}$  gültig. Die  $Z\text{-Score}_{\text{exper.}}$  in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

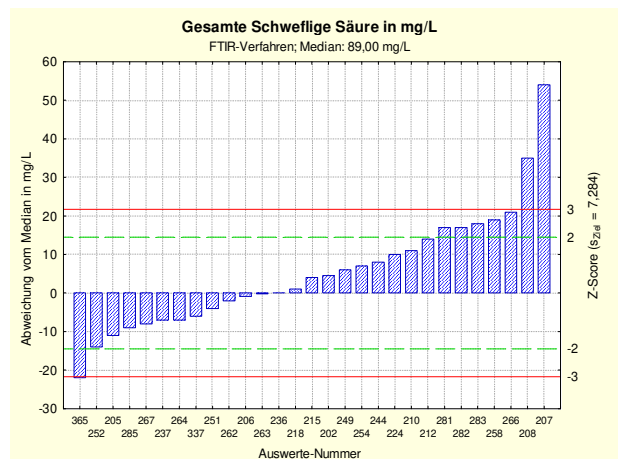
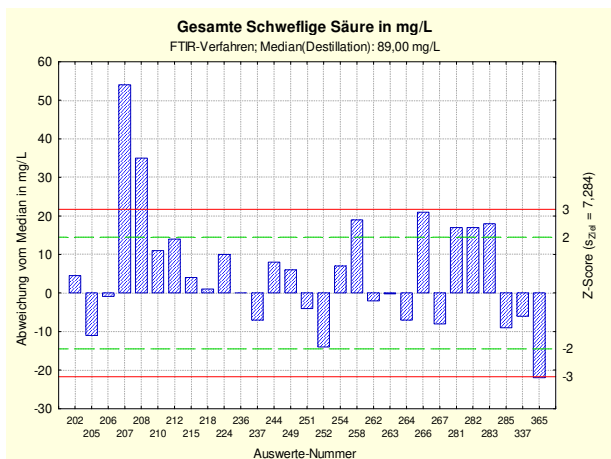
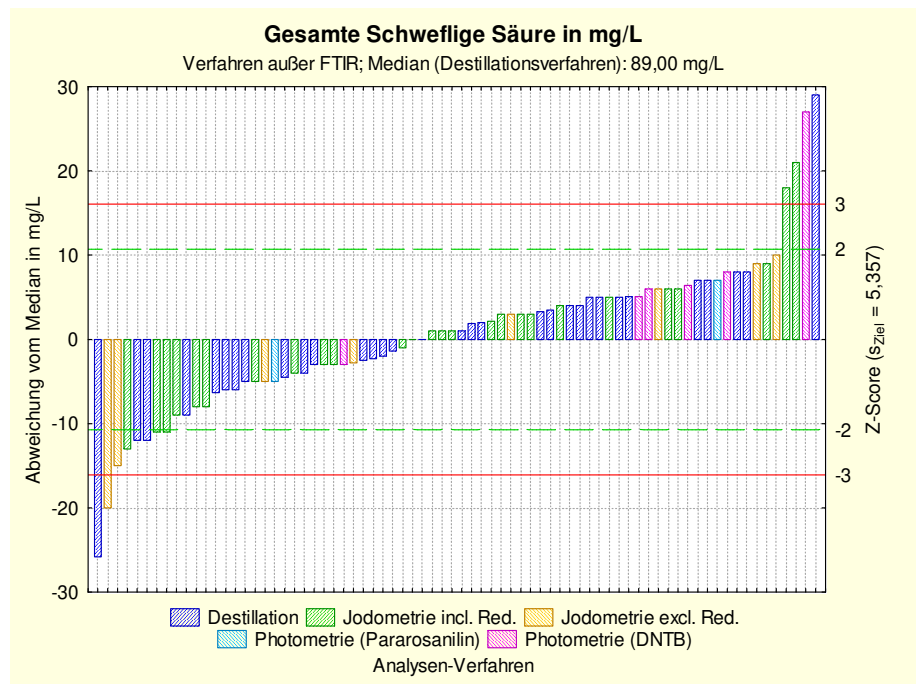
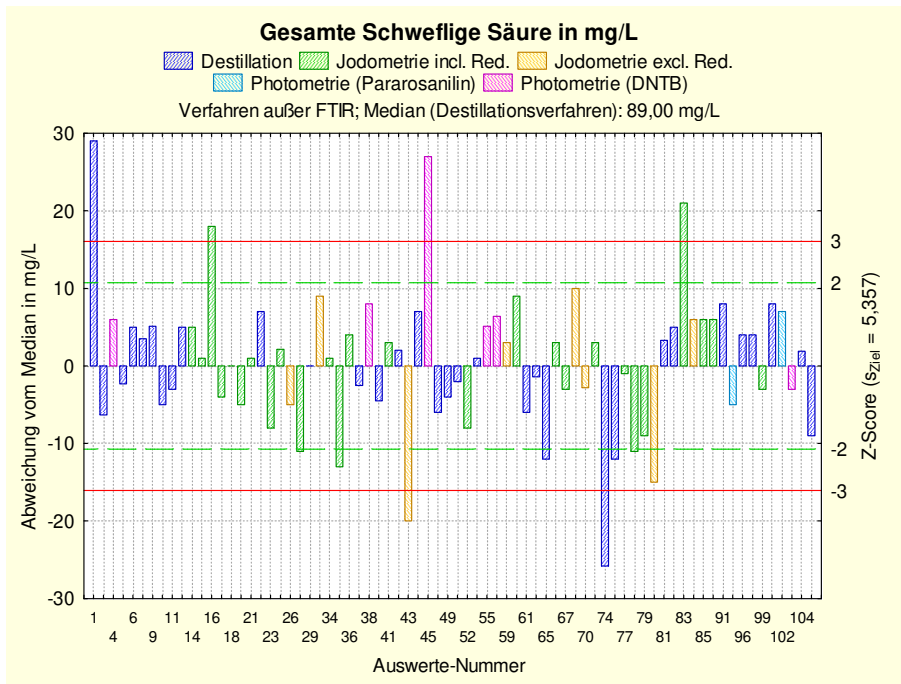
**4.17.2 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	32	31
Minimalwert	63,2	63,2
Mittelwert	88,91	87,97
Median	89,50	89,00
Maximalwert	118,0	97,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	8,918	7,284
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	1,577	1,308
Zielstandardabweichung nach Horwitz ( $s_H$ )	7,281	7,246
Zielstandardabweichung experimentell ( $s_{\text{exp}}$ )	5,357	5,357
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,22	1,01
Quotient ( $s_L/s_{\text{exp herk.}}$ )	1,66	1,36
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,22	0,18
Quotient ( $u_M/s_{\text{exp herk.}}$ )	0,29	0,24

**4.17.3 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	1	63,20	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	1	92,30	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	90,05	6,63
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	90,00	4,96
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	87,31	7,77
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	96,00	
	alle Destillationsverfahren	32	88,92	6,68
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	21	88,33	6,52
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	89,50	13,63
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	94,00	17,12
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	26	88,69	7,53
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	4	84,55	13,95
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	1	98,00	
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	2	83,00	14,43
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	7	86,03	12,98
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	2	90,00	9,62
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	95,86	7,70
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	92,40	12,61
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	143,00	





## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P03

### 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	1,00509	-0,000010	-0,08	
04	LwK 8.4	1,00506	-0,000040	-0,30	
05	LwK 8.4	1,00507	-0,000030	-0,23	
06	LwK 8.4	1,00511	0,000010	0,07	
08	LwK 8.1	1,00505	-0,000050	-0,38	
09	LwK 8.4	1,00516	0,000056	0,42	
10	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
12	LwK 8.4	1,00505	-0,000050	-0,38	
14	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
15	LwK 8.4	1,00519	0,000090	0,68	
17	LwK 8.4	1,00500	-0,000100	-0,76	
18	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
20	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
21	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
22	LwK 8.4	1,00519	0,000090	0,68	
23	LwK 8.4	1,00504	-0,000060	-0,46	
25	LwK 8.4	1,00512	0,000020	0,15	
26	LwK 8.4	1,00500	-0,000100	-0,76	
27	LwK 8.4	1,00511	0,000010	0,07	
29	LwK 8.4	1,00505	-0,000050	-0,38	
31	LwK 8.4	1,00515	0,000050	0,38	
34	LwK 8.4	1,00518	0,000080	0,60	
36	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
37	LwK 8.3	1,00501	-0,000090	-0,68	
38	LwK 8.4	1,00524	0,000140	1,06	
39	LwK 8.4	1,00513	0,000030	0,23	
40	LwK 8.4	1,00499	-0,000110	-0,84	
41	LwK 8.4	1,00515	0,000050	0,38	
42	LwK 8.4	1,00508	-0,000020	-0,15	
43	LwK 8.4	1,00509	-0,000010	-0,08	
44	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
45	LwK 8.4	1,00515	0,000050	0,38	
46	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
48	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
50	LwK 8.4	1,00511	0,000010	0,07	
51	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
52	LwK 8.4	1,00510	0,000000	0,00	
53	LwK 8.4	1,00530	0,000200	1,51	
55	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
56	LwK 8.4	1,00501	-0,000090	-0,68	
60	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
61	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
65	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
66	LwK 8.4	1,00510	-0,000000	-0,00	
70	LwK 8.4	1,00512	0,000020	0,15	
74	LwK 8.4	0,98567	-0,019430	-147,20	(**)
75	LwK 8.4	1,00480	-0,000300	-2,27	
81	LwK 8.4	1,00509	-0,000010	-0,08	
82	LwK 8.4	1,00532	0,000220	1,66	
83	LwK 8.2	1,00540	0,000300	2,27	
85	LwK 8.4	1,00530	0,000200	1,51	
86	LwK 8.4	1,00500	-0,000100	-0,76	
87	LwK 8.4	1,00512	0,000020	0,15	
100	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	
106	LwK 8.4	1,00520	0,000100	0,76	

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



## 5.1.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
202	FTIR	1,00470	-0,000400	-2,11	
203	FTIR	1,00518	0,000080	0,42	
204	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
205	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
206	FTIR	1,00522	0,000120	0,63	
207	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
208	FTIR	1,00581	0,000710	3,74	
210	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
211	FTIR	1,00550	0,000400	2,10	
212	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
214	FTIR	1,00540	0,000300	1,58	
215	FTIR	1,00470	-0,000400	-2,11	
216	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
217	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
218	FTIR	1,00491	-0,000190	-1,00	
219	FTIR	1,00550	0,000400	2,10	
220	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
221	FTIR	1,00501	-0,000090	-0,47	
222	FTIR	1,00430	-0,000800	-4,21	
223	FTIR	1,00470	-0,000400	-2,11	
224	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
225	FTIR	1,00538	0,000280	1,47	
226	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
227	FTIR	1,00502	-0,000080	-0,42	
228	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
229	FTIR	1,00492	-0,000180	-0,95	
231	FTIR	1,00540	0,000300	1,58	
232	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
234	FTIR	1,00497	-0,000130	-0,69	
235	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
236	FTIR	1,00501	-0,000090	-0,47	
237	FTIR	1,00501	-0,000090	-0,47	
240	FTIR	1,00499	-0,000110	-0,58	
241	FTIR	1,00470	-0,000400	-2,11	
242	FTIR	1,00526	0,000160	0,84	
243	FTIR	1,00540	0,000300	1,58	
244	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
245	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
247	FTIR	1,00487	-0,000230	-1,21	
249	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	
250	FTIR	1,00400	-0,001100	-5,79	(***)
251	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	
252	FTIR	1,00543	0,000330	1,74	
254	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	
255	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	
256	FTIR	1,00487	-0,000230	-1,21	
257	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
258	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
259	FTIR	1,00501	-0,000090	-0,47	
260	FTIR	1,00470	-0,000400	-2,11	
261	FTIR	1,00560	0,000500	2,63	
262	FTIR	1,00560	0,000500	2,63	
263	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
264	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
265	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
266	FTIR	1,00510	-0,000000	-0,00	
267	FTIR	1,00450	-0,000600	-3,16	
268	FTIR	1,00510	-0,000000	-0,00	
269	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
270	FTIR	1,00490	-0,000200	-1,05	
271	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	
272	FTIR	1,00506	-0,000040	-0,21	
273	FTIR	1,00506	-0,000040	-0,21	
275	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	1,00500	-0,000100	-0,53	
277	FTIR	1,00430	-0,000800	-4,21	
278	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
279	FTIR	1,00510	-0,000000	-0,00	
280	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
281	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
282	FTIR	1,00580	0,000700	3,68	
283	FTIR	1,00480	-0,000300	-1,58	
284	FTIR	1,00510	-0,000000	-0,00	
285	FTIR	1,00535	0,000250	1,31	
287	FTIR	1,00650	0,001400	7,37	(***)
288	FTIR	1,00730	0,002200	11,58	(***)
320	FTIR	1,00520	0,000100	0,53	
337	FTIR	1,00510	-0,000000	-0,00	
365	FTIR	1,00530	0,000200	1,05	

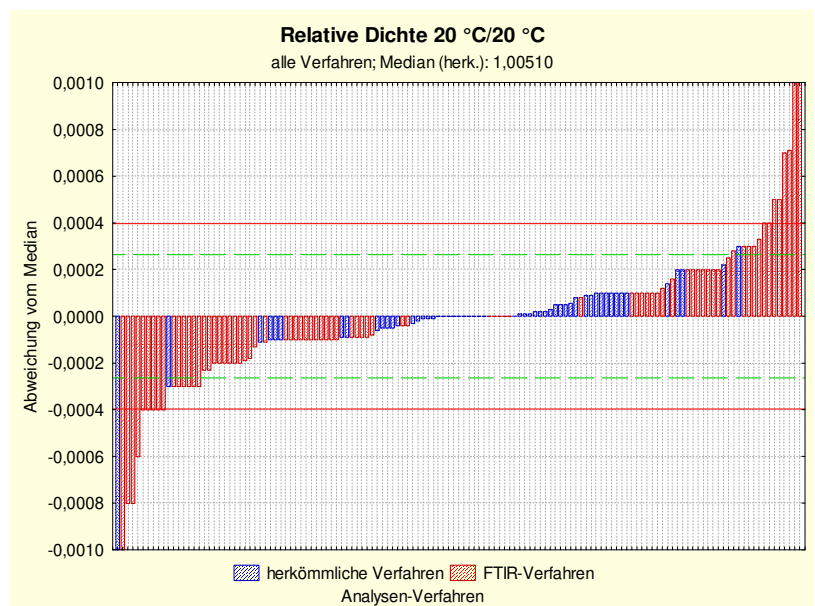
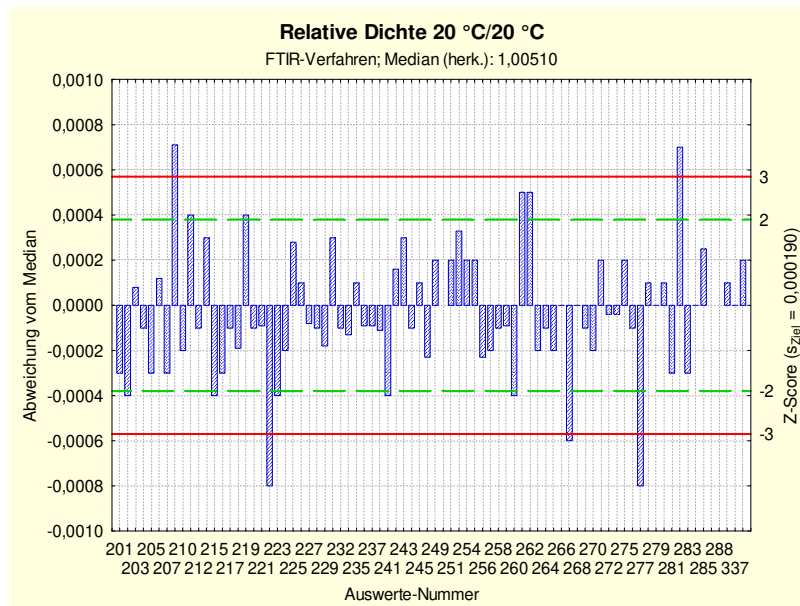
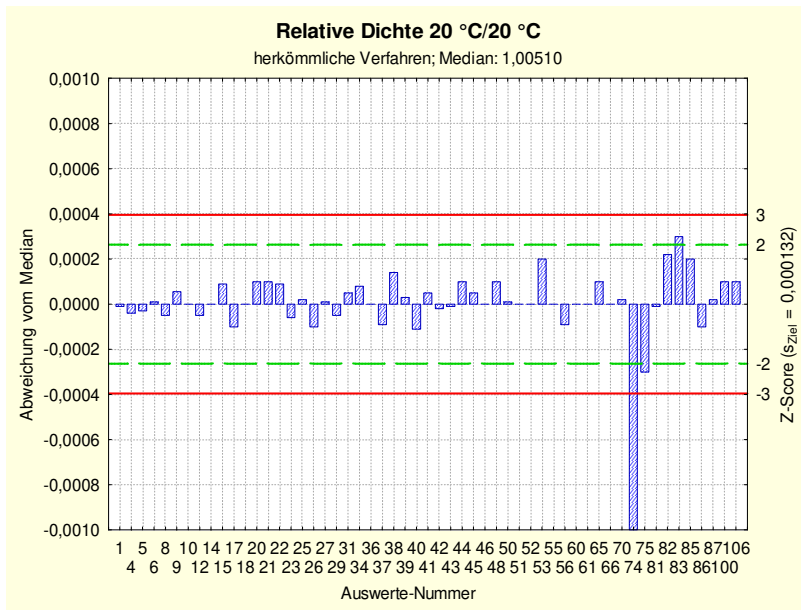
(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**5.1.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	55	54
Minimalwert	0,98567	1,00480
Mittelwert	1,004767	1,005121
Median	1,005100	1,005100
Maximalwert	1,00540	1,00540
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,002624	0,000095
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000354	0,000013
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 ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	19,88	0,72
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	13,81	0,50
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	2,68	0,10
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,86	0,07

**5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	2	1,00507	0,000032
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00540	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,00501	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	51	1,00512	0,000080
	herkömmliche Verfahren	55	1,00512	0,000082
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	1,00507	0,000280



## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Laborergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	84,30	0,055	0,02	0,10	
04	LwK 2.1	84,61	0,362	0,15	0,68	
05	LwK 2.4	83,55	-0,695	-0,28	-1,30	
06	LwK 2.9	84,61	0,365	0,15	0,68	
08	LwK 2.4	85,31	1,065	0,44	1,99	
09	LwK 2.1	84,89	0,645	0,26	1,21	
10	LwK 2.1	84,10	-0,145	-0,06	-0,27	
12	LwK 2.9	85,20	0,955	0,39	1,79	
14	LwK 2.9	85,04	0,795	0,33	1,49	
15	LwK 2.9	84,70	0,455	0,19	0,85	
17	LwK 2.9	85,20	0,955	0,39	1,79	
18	LwK 2.1	85,57	1,325	0,54	2,48	
20	LwK 2.9	84,87	0,625	0,26	1,17	
21	LwK 2.7	84,50	0,255	0,10	0,48	
22	LwK 2.9	84,40	0,155	0,06	0,29	
23	LwK 2.5	84,40	0,155	0,06	0,29	
25	LwK 2.9	84,61	0,365	0,15	0,68	
26	LwK 2.4	84,65	0,405	0,17	0,76	
27	LwK 2.5	83,40	-0,845	-0,35	-1,58	
29	LwK 2.1	83,78	-0,465	-0,19	-0,87	
31	LwK 2.9	84,60	0,355	0,15	0,66	
37	LwK 2.2	85,30	1,055	0,43	1,97	
38	LwK 2.9	84,75	0,505	0,21	0,94	
40	LwK 2.4	84,70	0,455	0,19	0,85	
41	LwK 2.9	84,55	0,305	0,12	0,57	
42	LwK 2.9	84,20	-0,045	-0,02	-0,08	
43	LwK 2.9	84,60	0,355	0,15	0,66	
44	LwK 2.1	84,20	-0,045	-0,02	-0,08	
45	LwK 2.9	85,30	1,055	0,43	1,97	
46	LwK 2.5	85,10	0,855	0,35	1,60	
48	LwK 2.4	84,20	-0,045	-0,02	-0,08	
50	LwK 2.9	84,80	0,555	0,23	1,04	
51	LwK 2.9	84,60	0,355	0,15	0,66	
52	LwK 2.9	85,00	0,755	0,31	1,41	
53	LwK 2.9	85,16	0,915	0,37	1,71	
55	LwK 2.1	83,89	-0,355	-0,15	-0,66	
56	LwK 2.9	84,50	0,255	0,10	0,48	
60	LwK 2.1	83,60	-0,645	-0,26	-1,21	
61	LwK 2.9	84,50	0,255	0,10	0,48	
65	LwK 2.5	84,82	0,575	0,24	1,07	
66	LwK 2.5	86,10	1,855	0,76	3,47	
70	LwK 2.9	85,73	1,485	0,61	2,78	
74	LwK 2.1	84,29	0,046	0,02	0,09	
75	LwK 2.9	86,10	1,855	0,76	3,47	
81	LwK 2.4	85,00	0,755	0,31	1,41	
82	LwK 2.1	83,10	-1,145	-0,47	-2,14	
83	LwK 2.2	85,10	0,855	0,35	1,60	
85	LwK 2.3	85,50	1,255	0,51	2,35	
86	LwK 2.9	85,30	1,055	0,43	1,97	
87	LwK 2.9	84,61	0,362	0,15	0,68	
92	LwK 2.4	83,48	-0,765	-0,31	-1,43	
93	LwK 2.1	83,90	-0,345	-0,14	-0,64	
97	LwK 2.1	84,20	-0,045	-0,02	-0,08	
99	LwK 2.9	84,87	0,625	0,26	1,17	
100	LwK 2.9	84,10	-0,145	-0,06	-0,27	
101	LwK 2.9	84,80	0,555	0,23	1,04	
102	LwK 2.9	84,50	0,255	0,10	0,48	
103	LwK 2.4	84,29	0,045	0,02	0,08	
106	LwK 2.5	84,60	0,355	0,15	0,66	
107	LwK 2.4	85,02	0,775	0,32	1,45	
108	LwK 2.9	85,40	1,155	0,47	2,16	

Der rot markierte Wert wurde mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet

**Fortsetzung: herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
111	NMR	82,96	-1,285	-0,53	-2,40	
112	NMR	79,89	-4,354	-1,78	-8,14	(***)
113	NMR	83,93	-0,314	-0,13	-0,59	
114	NMR	75,17	-9,075	-3,71	-16,96	(***)
116	NMR	83,81	-0,435	-0,18	-0,81	

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

**5.2.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	84,88	0,635	0,26	0,72	
202	LwK 2.8	86,79	2,545	1,04	2,87	
203	LwK 2.8	85,46	1,215	0,50	1,37	
204	LwK 2.8	85,24	0,993	0,41	1,12	
205	LwK 2.8	84,22	-0,025	-0,01	-0,03	
206	LwK 2.8	83,75	-0,495	-0,20	-0,56	
207	LwK 2.8	84,30	0,055	0,02	0,06	
208	LwK 2.8	84,58	0,335	0,14	0,38	
210	LwK 2.8	83,30	-0,945	-0,39	-1,07	
211	LwK 2.8	85,00	0,755	0,31	0,85	
212	LwK 2.8	86,25	2,005	0,82	2,26	
214	LwK 2.8	86,90	2,655	1,09	3,00	
215	LwK 2.8	83,40	-0,845	-0,35	-0,95	
216	LwK 2.8	86,91	2,665	1,09	3,01	
217	LwK 2.8	86,50	2,255	0,92	2,55	
218	LwK 2.8	85,80	1,555	0,64	1,76	
219	LwK 2.8	87,40	3,155	1,29	3,56	
220	LwK 2.8	85,90	1,655	0,68	1,87	
221	LwK 2.8	83,20	-1,045	-0,43	-1,18	
222	LwK 2.8	85,50	1,255	0,51	1,42	
223	LwK 2.8	84,80	0,555	0,23	0,63	
224	LwK 2.8	84,23	-0,015	-0,01	-0,02	
225	LwK 2.8	86,65	2,405	0,98	2,71	
226	LwK 2.8	84,30	0,055	0,02	0,06	
227	LwK 2.8	85,67	1,425	0,58	1,61	
228	LwK 2.8	84,20	-0,045	-0,02	-0,05	
229	LwK 2.8	84,73	0,485	0,20	0,55	
231	LwK 2.8	85,30	1,055	0,43	1,19	
232	LwK 2.8	84,90	0,655	0,27	0,74	
234	LwK 2.8	86,50	2,255	0,92	2,55	
235	LwK 2.8	85,60	1,355	0,55	1,53	
236	LwK 2.8	85,70	1,455	0,60	1,64	
237	LwK 2.8	84,05	-0,195	-0,08	-0,22	
240	LwK 2.8	86,60	2,355	0,96	2,66	
241	LwK 2.8	84,30	0,055	0,02	0,06	
242	LwK 2.8	83,83	-0,415	-0,17	-0,47	
243	LwK 2.8	85,50	1,255	0,51	1,42	
244	LwK 2.8	86,12	1,875	0,77	2,12	
245	LwK 2.8	85,10	0,855	0,35	0,97	
246	LwK 2.8	85,40	1,155	0,47	1,30	
247	LwK 2.8	85,17	0,925	0,38	1,04	
248	LwK 2.8	85,07	0,825	0,34	0,93	
249	LwK 2.8	85,70	1,455	0,60	1,64	
250	LwK 2.8	85,40	1,155	0,47	1,30	
251	LwK 2.8	83,80	-0,445	-0,18	-0,50	
252	LwK 2.8	86,50	2,255	0,92	2,55	
254	LwK 2.8	85,30	1,055	0,43	1,19	
255	LwK 2.8	85,40	1,155	0,47	1,30	
256	LwK 2.8	83,90	-0,345	-0,14	-0,39	
257	LwK 2.8	85,80	1,555	0,64	1,76	
258	LwK 2.8	86,50	2,255	0,92	2,55	
259	LwK 2.8	86,68	2,435	1,00	2,75	
260	LwK 2.8	83,20	-1,045	-0,43	-1,18	
261	LwK 2.8	86,80	2,555	1,04	2,88	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
262	LwK 2.8	84,40	0,155	0,06	0,17	
263	LwK 2.8	87,90	3,655	1,49	4,13	
264	LwK 2.8	86,55	2,305	0,94	2,60	
265	LwK 2.8	85,30	1,055	0,43	1,19	
266	LwK 2.8	86,10	1,855	0,76	2,09	
267	LwK 2.8	84,80	0,555	0,23	0,63	
268	LwK 2.8	86,07	1,825	0,75	2,06	
269	LwK 2.8	85,30	1,055	0,43	1,19	
270	LwK 2.8	85,59	1,345	0,55	1,52	
271	LwK 2.8	88,90	4,655	1,90	5,25	(***)
272	LwK 2.8	84,60	0,355	0,15	0,40	
273	LwK 2.8	84,92	0,675	0,28	0,76	
275	LwK 2.8	86,00	1,755	0,72	1,98	
276	LwK 2.8	83,90	-0,345	-0,14	-0,39	
277	LwK 2.8	84,21	-0,033	-0,01	-0,04	
278	LwK 2.8	85,03	0,785	0,32	0,89	
279	LwK 2.8	87,20	2,955	1,21	3,34	
280	LwK 2.8	84,30	0,055	0,02	0,06	
281	LwK 2.8	85,71	1,466	0,60	1,66	
282	LwK 2.8	85,80	1,555	0,64	1,76	
283	LwK 2.8	83,87	-0,375	-0,15	-0,42	
284	LwK 2.8	86,70	2,455	1,00	2,77	
285	LwK 2.8	85,50	1,255	0,51	1,42	
287	LwK 2.8	84,50	0,255	0,10	0,29	
288	LwK 2.8	84,77	0,525	0,21	0,59	
311	LwK 2.8	85,40	1,155	0,47	1,30	
320	LwK 2.8	85,10	0,855	0,35	0,97	
337	LwK 2.8	83,92	-0,325	-0,13	-0,37	
365	LwK 2.8	85,40	1,155	0,47	1,30	

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

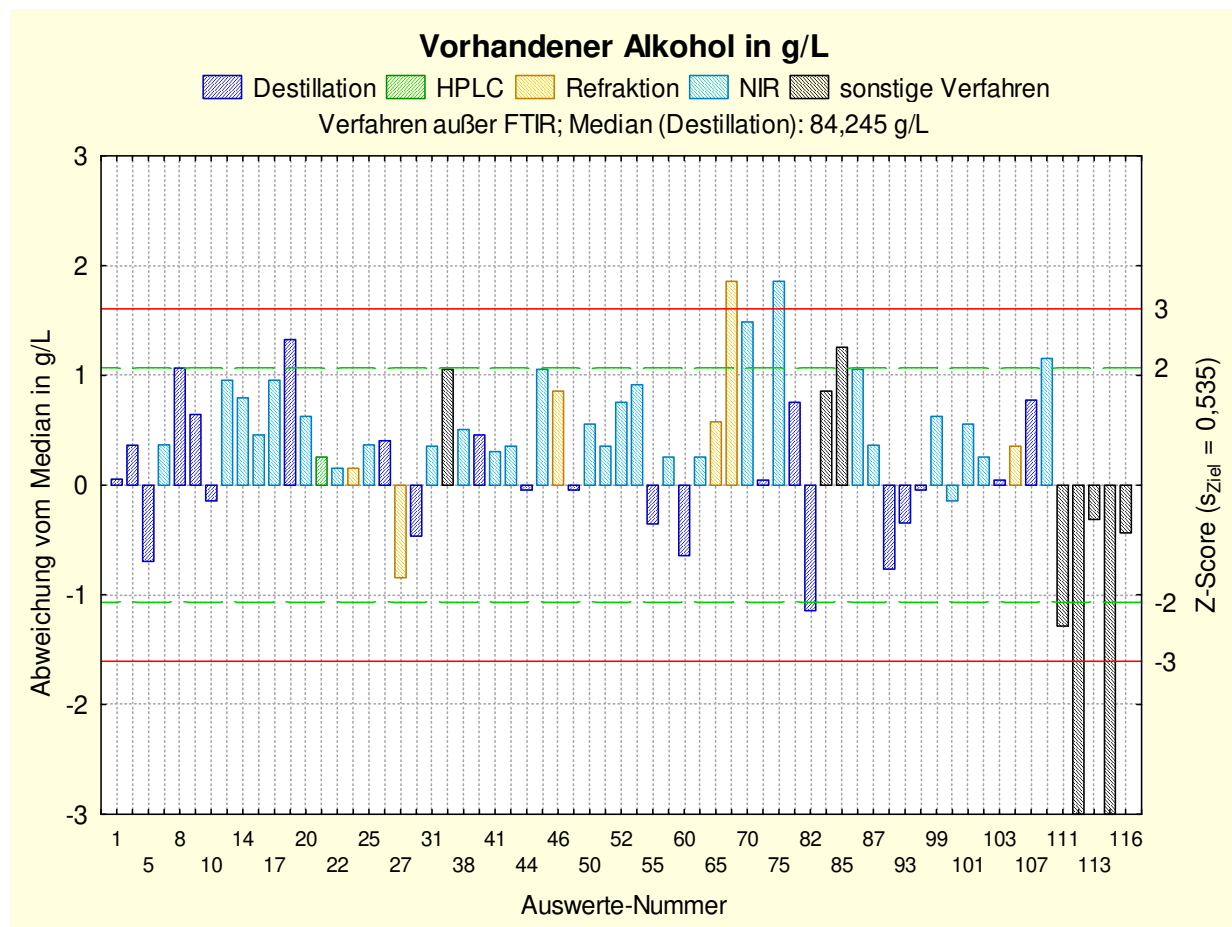
Die rot markierten Werte wurden mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet

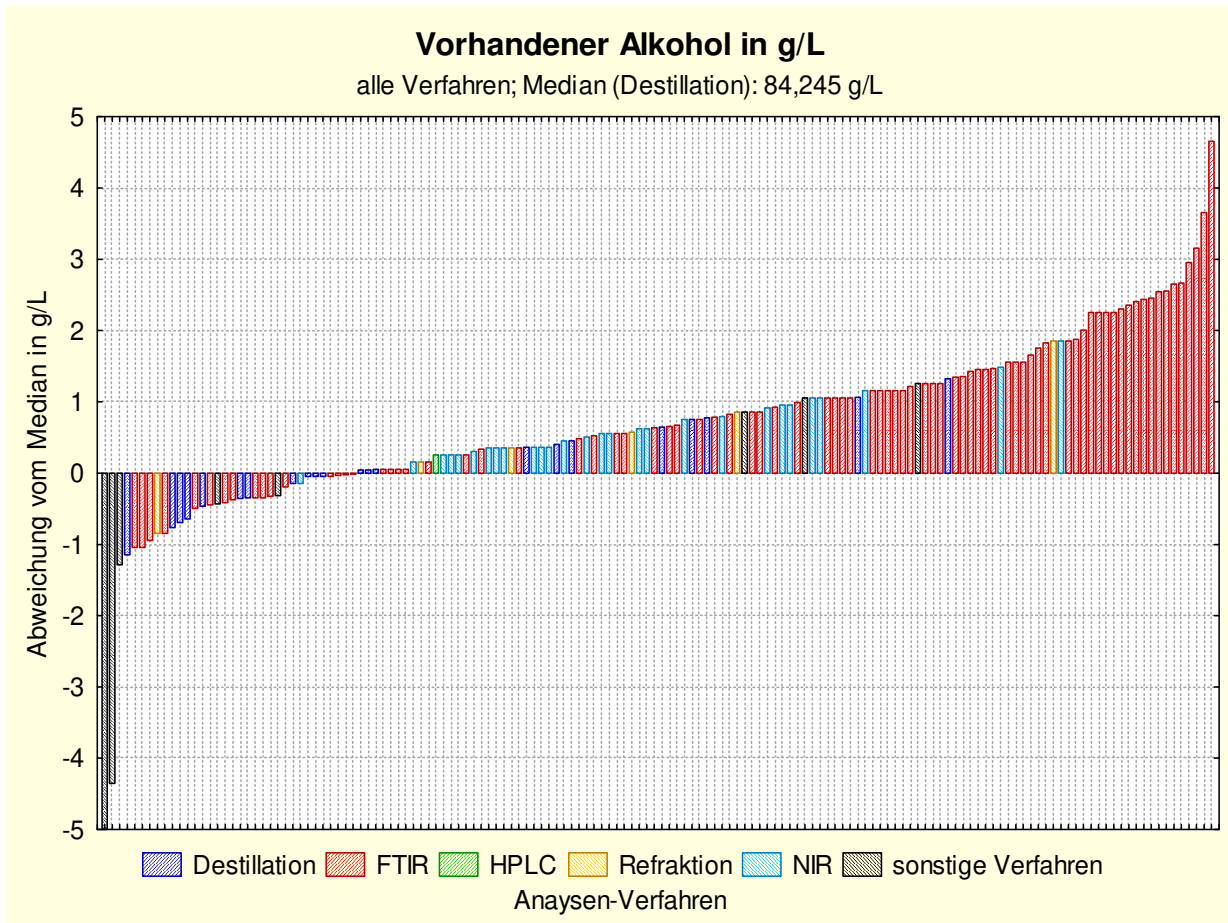
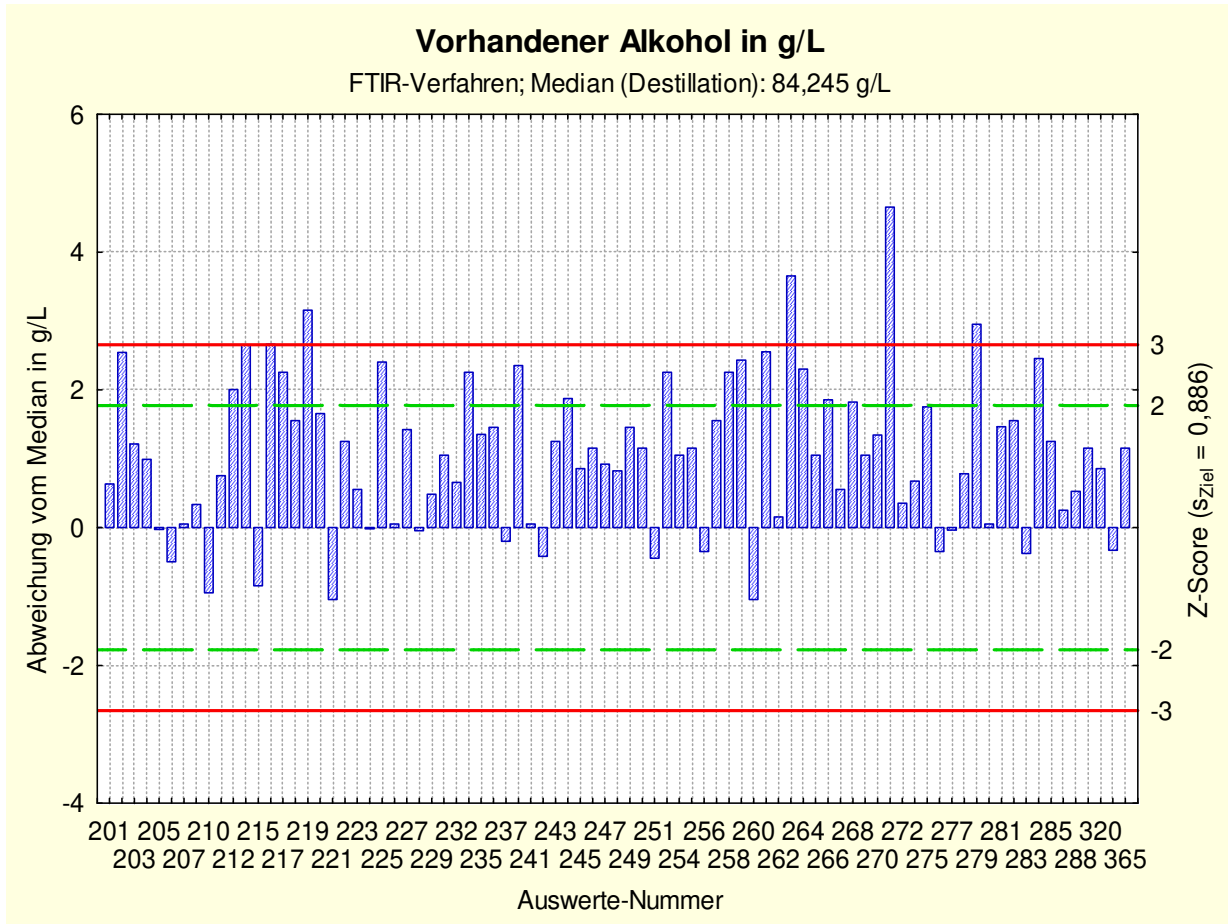
**5.2.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	83,10
Mittelwert	84,301
Median	84,245
Maximalwert	85,57
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,625
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,133
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,445
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,26
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,17
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,71
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,05
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,25
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,15

**5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	13	84,160	0,533
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	9 22	84,492	0,681
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	85,200	0,160
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	85,500	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	84,730	0,914
LwK 2.7	HPLC z.B. nach Heidger	1	84,500	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	85,296	1,136
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	29	84,818	0,408
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	81,343	4,138







### 5.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
05	LwK 3.3	49,78	-0,52	-0,33	-0,88	
06	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
08	LwK 3.1	50,40	0,10	0,06	0,17	
09	LwK 3.3	50,70	0,40	0,25	0,67	
10	LwK 3.3	50,00	-0,30	-0,19	-0,51	
12	LwK 3.3	50,40	0,10	0,06	0,17	
14	LwK 3.3	51,00	0,70	0,44	1,18	
15	LwK 3.3	50,50	0,20	0,13	0,34	
17	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 3.3	50,80	0,50	0,32	0,84	
20	LwK 3.3	50,60	0,30	0,19	0,51	
21	LwK 3.3	21,50	-28,80	-18,25	-48,48	(*)
22	LwK 3.3	50,40	0,10	0,06	0,17	
23	LwK 3.3	50,00	-0,30	-0,19	-0,51	
25	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 3.3	49,96	-0,34	-0,22	-0,58	
27	LwK 3.3	49,90	-0,40	-0,25	-0,67	
29	LwK 3.2	49,80	-0,50	-0,32	-0,84	
31	LwK 3.3	50,40	0,10	0,06	0,17	
37	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
38	LwK 3.3	50,60	0,30	0,19	0,51	
39	LwK 3.3	50,40	0,10	0,06	0,17	
40	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
41	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
43	LwK 3.3	50,20	-0,10	-0,06	-0,17	
44	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
45	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
48	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
50	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
52	LwK 3.3	50,50	0,20	0,13	0,34	
53	LwK 3.3	51,00	0,70	0,44	1,18	
55	LwK 3.3	50,00	-0,30	-0,19	-0,51	
56	LwK 3.3	50,00	-0,30	-0,19	-0,51	
60	LwK 3.2	49,90	-0,40	-0,25	-0,67	
61	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
75	LwK 3.3	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
81	LwK 3.3	49,70	-0,60	-0,38	-1,01	
82	LwK 3.2	50,10	-0,20	-0,13	-0,34	
83	LwK 3.3	51,20	0,90	0,57	1,52	
85	LwK 3.3	51,20	0,90	0,57	1,52	
86	LwK 3.3	50,30	0,00	0,00	0,00	
100	LwK 3.3	50,40	0,10	0,06	0,17	
108	LwK 3.3	51,40	1,10	0,70	1,85	

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

#### 5.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	49,90	-0,40	-0,25	-0,67	
202	FTIR (gemessen)	51,10	0,80	0,51	1,35	
203	FTIR (gemessen)	51,79	1,49	0,94	2,51	
205	FTIR (gemessen)	49,43	-0,87	-0,55	-1,46	
208	FTIR (gemessen)	52,20	1,90	1,20	3,20	
210	FTIR (gemessen)	50,50	0,20	0,13	0,34	
214	k. A.	51,90	1,60	1,01	2,69	
215	FTIR (gemessen)	48,80	-1,50	-0,95	-2,53	
216	FTIR (gemessen)	51,06	0,76	0,48	1,28	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
217	FTIR (gemessen)	50,70	0,40	0,25	0,67	
218	FTIR (gemessen)	51,37	1,07	0,68	1,80	
220	FTIR (gemessen)	50,30	0,00	0,00	0,00	
221	FTIR (gemessen)	53,50	3,20	2,03	5,39	(***)
223	LwK 3.3 (herk.)	50,00	-0,30	-0,19	-0,51	
227	FTIR (gemessen)	51,08	0,78	0,49	1,31	
229	FTIR (gemessen)	51,16	0,86	0,55	1,45	
232	k. A.	50,55	0,25	0,16	0,42	
236	LwK 3.3 (herk.)	50,70	0,40	0,25	0,67	
237	FTIR (gemessen)	50,90	0,60	0,38	1,01	
240	FTIR (gemessen)	51,10	0,80	0,51	1,35	
244	FTIR (gemessen)	51,69	1,39	0,88	2,34	
247	FTIR (gemessen)	50,48	0,18	0,11	0,30	
251	FTIR (gemessen)	51,20	0,90	0,57	1,52	
252	dens/FTIR	51,30	1,00	0,63	1,68	
254	FTIR (gemessen)	51,30	1,00	0,63	1,68	
255	FTIR (gemessen)	51,90	1,60	1,01	2,69	
258	LwK 3.3 (herk.)	50,80	0,50	0,32	0,84	
259	LwK 3.3 (herk.)	50,80	0,50	0,32	0,84	
260	FTIR-Basis	48,60	-1,70	-1,08	-2,86	
262	FTIR (gemessen)	50,80	0,50	0,32	0,84	
263	FTIR (gemessen)	51,70	1,40	0,89	2,36	
264	FTIR (gemessen)	49,70	-0,60	-0,38	-1,01	
265	FTIR (gemessen)	50,70	0,40	0,25	0,67	
268	FTIR (gemessen)	51,24	0,94	0,60	1,58	
269	FTIR (gemessen)	51,50	1,20	0,76	2,02	
270	FTIR (gemessen)	50,20	-0,10	-0,06	-0,17	
271	FTIR (gemessen)	49,70	-0,60	-0,38	-1,01	
272	FTIR (gemessen)	51,10	0,80	0,51	1,35	
273	k. A.	50,40	0,10	0,06	0,17	
275	FTIR (gemessen)	51,40	1,10	0,70	1,85	
279	FTIR (gemessen)	51,30	1,00	0,63	1,68	
280	k. A.	51,00	0,70	0,44	1,18	
282	FTIR (gemessen)	50,90	0,60	0,38	1,01	
283	FTIR (gemessen)	47,90	-2,40	-1,52	-4,04	
284	FTIR (gemessen)	50,90	0,60	0,38	1,01	
285	FTIR (gemessen)	51,60	1,30	0,82	2,19	
287	FTIR (gemessen)	53,90	3,60	2,28	6,06	(***)
288	k. A.	56,20	5,90	3,74	9,93	(***)
320	FTIR (gemessen)	50,70	0,40	0,25	0,67	
337	FTIR (gemessen)	51,11	0,81	0,51	1,36	

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

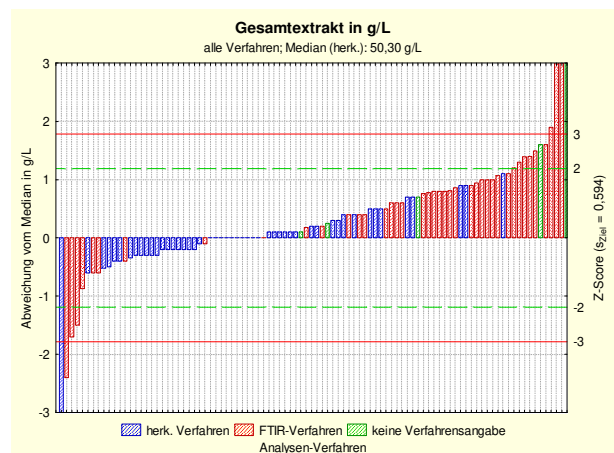
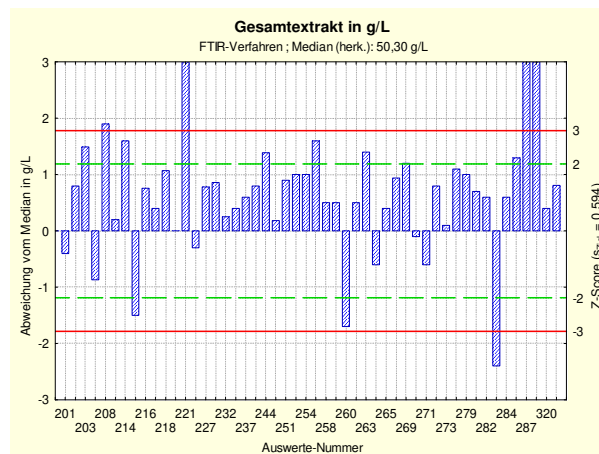
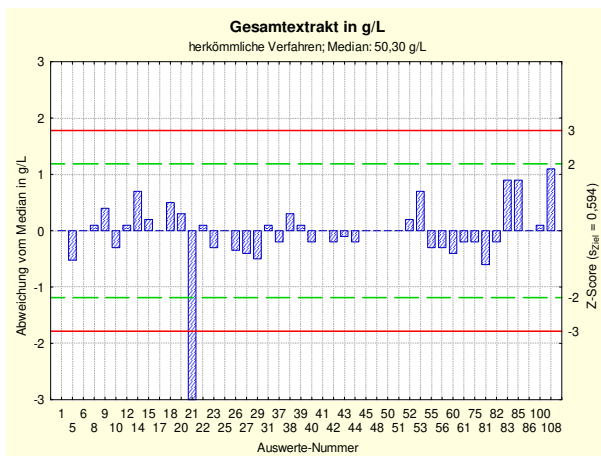
**5.3.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	49,7
Mittelwert	50,33
Median	50,30
Maximalwert	51,4
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,383
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,057
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,578
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,565)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,24
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,65
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,68)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,04
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,10)

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

**5.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	50,400	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	3	49,933	0,173
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	42	50,305	0,341
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	39	50,981	0,771
dens/FTIR	Berechnung nach Tabarie auf Basis densitometr. Dichte + FTIR-Alkohol	1	51,300	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	1	48,600	
k. A.	keine Verfahrensangabe	5	51,756	2,118



## 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
01	LwK 4.5	29,78	0,355	0,35	0,42	
02	LwK 4.5	29,45	0,025	0,02	0,03	
05	LwK 4.5	30,40	0,975	0,97	1,16	
06	LwK 4.5	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
08	LwK 4.5	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
09	LwK 4.7	31,28	1,855	1,85	2,22	
10	LwK 4.1	27,90	-1,525	-1,52	-1,82	
12	LwK 4.5	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
14	LwK 4.5	29,80	0,375	0,37	0,45	
15	LwK 4.5	29,30	-0,125	-0,12	-0,15	
18	LwK 4.5	29,61	0,185	0,18	0,22	
20	LwK 4.7	29,50	0,075	0,07	0,09	
21	LwK 4.7	28,80	-0,625	-0,62	-0,75	
22	LwK 4.7	29,00	-0,425	-0,42	-0,51	
23	LwK 4.4	29,50	0,075	0,07	0,09	
25	LwK 4.5	29,20	-0,224	-0,22	-0,27	
26	LwK 4.7	29,80	0,375	0,37	0,45	
27	LwK 4.4	30,05	0,625	0,62	0,75	
29	LwK 4.5	29,58	0,155	0,15	0,19	
31	LwK 4.5	29,10	-0,325	-0,32	-0,39	
37	LwK 4.3	27,82	-1,605	-1,60	-1,92	
38	LwK 4.5	30,15	0,725	0,72	0,87	
39	LwK 4.7	29,99	0,565	0,56	0,67	
40	LwK 4.5	29,65	0,221	0,22	0,26	
41	LwK 4.5	29,32	-0,105	-0,10	-0,13	
42	LwK 4.5	29,68	0,252	0,25	0,30	
43	LwK 4.4	28,10	-1,325	-1,32	-1,58	
44	LwK 4.5	29,40	-0,025	-0,02	-0,03	
45	LwK 4.5	29,30	-0,125	-0,12	-0,15	
48	LwK 4.5	29,85	0,425	0,42	0,51	
50	LwK 4.5	29,78	0,355	0,35	0,42	
51	LwK 4.4	29,10	-0,325	-0,32	-0,39	
52	LwK 4.5	30,74	1,315	1,31	1,57	
53	LwK 4.5	29,60	0,175	0,17	0,21	
55	LwK 4.5	28,90	-0,525	-0,52	-0,63	
56	LwK 4.5	28,73	-0,695	-0,69	-0,83	
60	LwK 4.4	31,46	2,035	2,03	2,43	
61	LwK 4.5	27,90	-1,525	-1,52	-1,82	
65	LwK 4.4	30,20	0,775	0,77	0,93	
70	LwK 4.5	29,30	-0,125	-0,12	-0,15	
74	LwK 4.4	32,50	3,075	3,07	3,67	
75	LwK 4.4	30,40	0,975	0,97	1,16	
80	LwK 4.4	28,30	-1,125	-1,12	-1,34	
81	LwK 4.7	28,10	-1,325	-1,32	-1,58	
82	LwK 4.5	29,79	0,365	0,36	0,44	
83	LwK 4.3	29,83	0,405	0,40	0,48	
85	LwK 4.4	30,20	0,775	0,77	0,93	
86	LwK 4.4	31,70	2,275	2,27	2,72	
97	LwK 4.7	29,02	-0,405	-0,40	-0,48	
100	LwK 4.7	28,90	-0,525	-0,52	-0,63	
106	LwK 4.4	29,40	-0,025	-0,02	-0,03	
108	LwK 4.4	30,40	0,975	0,97	1,16	
111	NMR	28,11	-1,316	-1,32	-1,57	
112	NMR	27,46	-1,967	-1,97	-2,35	
113	NMR	29,20	-0,228	-0,23	-0,27	
114	NMR	27,85	-1,579	-1,58	-1,89	
115	NMR	29,19	-0,235	-0,23	-0,28	
116	NMR	28,97	-0,451	-0,45	-0,54	

**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	29,80	0,375	0,37	0,45	
205	LwK 4.8	29,95	0,525	0,52	0,63	
206	LwK 4.8	30,30	0,875	0,87	1,04	
207	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
208	LwK 4.8	29,70	0,275	0,27	0,33	
210	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
211	LwK 4.8	30,26	0,835	0,83	1,00	
212	LwK 4.8	30,50	1,075	1,07	1,28	
214	LwK 4.8	30,30	0,875	0,87	1,04	
215	LwK 4.8	27,80	-1,625	-1,62	-1,94	
216	LwK 4.8	28,35	-1,075	-1,07	-1,28	
217	LwK 4.8	27,82	-1,605	-1,60	-1,92	
219	LwK 4.8	30,70	1,275	1,27	1,52	
220	LwK 4.8	31,75	2,325	2,32	2,78	
222	LwK 4.8	29,80	0,375	0,37	0,45	
223	LwK 4.8	29,80	0,375	0,37	0,45	
224	LwK 4.8	30,46	1,035	1,03	1,24	
225	LwK 4.8	30,03	0,605	0,60	0,72	
226	LwK 4.8	29,70	0,275	0,27	0,33	
227	LwK 4.8	30,76	1,335	1,33	1,59	
228	LwK 4.8	29,79	0,365	0,36	0,44	
229	LwK 4.8	29,25	-0,175	-0,17	-0,21	
231	LwK 4.8	31,90	2,475	2,47	2,96	
232	LwK 4.8	28,86	-0,565	-0,56	-0,67	
234	LwK 4.8	31,23	1,805	1,80	2,16	
235	LwK 4.8	25,00	-4,425	-4,42	-5,28	(***)
236	LwK 4.8	29,50	0,075	0,07	0,09	
237	LwK 4.8	30,15	0,725	0,72	0,87	
240	LwK 4.8	30,99	1,565	1,56	1,87	
241	LwK 4.8	27,50	-1,925	-1,92	-2,30	
242	LwK 4.8	29,93	0,505	0,50	0,60	
243	LwK 4.8	30,20	0,775	0,77	0,93	
244	LwK 4.8	29,95	0,525	0,52	0,63	
245	LwK 4.8	29,97	0,545	0,54	0,65	
246	LwK 4.8	29,00	-0,425	-0,42	-0,51	
247	LwK 4.8	28,60	-0,825	-0,82	-0,99	
248	LwK 4.8	30,43	1,005	1,00	1,20	
249	LwK 4.8	29,60	0,175	0,17	0,21	
250	LwK 4.8	29,92	0,495	0,49	0,59	
251	LwK 4.8	28,71	-0,715	-0,71	-0,85	
252	LwK 4.8	31,38	1,955	1,95	2,33	
254	LwK 4.8	31,40	1,975	1,97	2,36	
255	LwK 4.8	30,00	0,575	0,57	0,69	
256	LwK 4.8	29,50	0,075	0,07	0,09	
257	LwK 4.8	30,88	1,455	1,45	1,74	
258	LwK 4.8	29,12	-0,305	-0,30	-0,36	
259	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	
260	LwK 4.8	29,60	0,175	0,17	0,21	
261	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	
262	LwK 4.8	31,30	1,875	1,87	2,24	
263	LwK 4.8	28,89	-0,535	-0,53	-0,64	
264	LwK 4.8	29,90	0,475	0,47	0,57	
265	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	
266	LwK 4.8	30,85	1,425	1,42	1,70	
267	LwK 4.8	28,80	-0,625	-0,62	-0,75	
268	LwK 4.8	30,12	0,695	0,69	0,83	
269	LwK 4.8	31,60	2,175	2,17	2,60	
270	LwK 4.8	30,80	1,375	1,37	1,64	
271	LwK 4.8	29,43	0,005	0,00	0,01	
272	LwK 4.8	31,00	1,575	1,57	1,88	
273	LwK 4.8	29,96	0,535	0,53	0,64	
275	LwK 4.8	30,75	1,325	1,32	1,58	
276	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	LwK 4.8	29,92	0,495	0,49	0,59	
279	LwK 4.8	29,60	0,175	0,17	0,21	
280	LwK 4.8	28,61	-0,815	-0,81	-0,97	
281	LwK 4.8	30,40	0,975	0,97	1,16	
282	LwK 4.8	30,40	0,975	0,97	1,16	
283	LwK 4.8	30,30	0,875	0,87	1,04	
284	LwK 4.8	28,80	-0,625	-0,62	-0,75	
285	LwK 4.8	30,14	0,715	0,71	0,85	
320	LwK 4.8	29,86	0,435	0,43	0,52	
337	LwK 4.8	30,09	0,665	0,66	0,79	
365	LwK 4.8	30,50	1,075	1,07	1,28	

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

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	29,80	0,375	0,37	0,45	
202	LwK 4.8	29,90	0,475	0,47	0,57	
203	LwK 4.8	30,37	0,945	0,94	1,13	
204	LwK 4.8	29,11	-0,315	-0,31	-0,38	
205	LwK 4.8	29,96	0,535	0,53	0,64	
207	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
208	LwK 4.8	29,68	0,255	0,25	0,30	
210	LwK 4.8	29,00	-0,425	-0,42	-0,51	
211	LwK 4.8	29,57	0,145	0,14	0,17	
212	LwK 4.8	30,63	1,205	1,20	1,44	
214	LwK 4.8	29,40	-0,025	-0,02	-0,03	
215	LwK 4.8	27,80	-1,625	-1,62	-1,94	
216	LwK 4.8	25,89	-3,535	-3,53	-4,22	
217	LwK 4.8	27,19	-2,235	-2,23	-2,67	
218	LwK 4.8	28,95	-0,475	-0,47	-0,57	
219	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
220	LwK 4.8	29,07	-0,355	-0,35	-0,42	
221	LwK 4.8	31,61	2,185	2,18	2,61	
222	LwK 4.8	29,80	0,375	0,37	0,45	
223	LwK 4.8	29,80	0,375	0,37	0,45	
224	LwK 4.8	30,32	0,895	0,89	1,07	
225	LwK 4.8	30,03	0,605	0,60	0,72	
226	LwK 4.8	30,50	1,075	1,07	1,28	
227	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
228	LwK 4.8	30,35	0,925	0,92	1,10	
229	LwK 4.8	28,98	-0,445	-0,44	-0,53	
231	LwK 4.8	29,50	0,075	0,07	0,09	
232	LwK 4.8	28,86	-0,565	-0,56	-0,67	
234	LwK 4.8	28,85	-0,575	-0,57	-0,69	
235	LwK 4.8	25,00	-4,425	-4,42	-5,28	(***)
236	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
237	LwK 4.8	29,07	-0,355	-0,35	-0,42	
240	LwK 4.8	29,19	-0,235	-0,23	-0,28	
241	LwK 4.8	28,75	-0,675	-0,67	-0,81	
242	LwK 4.8	28,90	-0,525	-0,52	-0,63	
243	LwK 4.8	29,76	0,335	0,33	0,40	
244	LwK 4.8	29,55	0,125	0,12	0,15	
245	LwK 4.8	28,29	-1,135	-1,13	-1,36	
246	LwK 4.8	29,00	-0,425	-0,42	-0,51	
247	LwK 4.8	29,01	-0,415	-0,41	-0,50	
249	LwK 4.8	29,60	0,175	0,17	0,21	
250	LwK 4.8	29,99	0,565	0,56	0,67	
251	LwK 4.8	28,72	-0,705	-0,70	-0,84	
252	LwK 4.8	31,38	1,955	1,95	2,33	
254	LwK 4.8	29,50	0,075	0,07	0,09	
256	LwK 4.8	29,60	0,175	0,17	0,21	
257	LwK 4.8	29,85	0,425	0,42	0,51	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
258	LwK 4.8	29,47	0,045	0,04	0,05	
259	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	
260	LwK 4.8	28,50	-0,925	-0,92	-1,10	
261	LwK 4.8	30,10	0,675	0,67	0,81	
262	LwK 4.8	28,60	-0,825	-0,82	-0,99	
263	LwK 4.8	29,35	-0,075	-0,07	-0,09	
264	LwK 4.8	29,90	0,475	0,47	0,57	
265	LwK 4.8	29,90	0,475	0,47	0,57	
266	LwK 4.8	30,85	1,425	1,42	1,70	
267	LwK 4.8	28,70	-0,725	-0,72	-0,87	
268	LwK 4.8	29,88	0,455	0,45	0,54	
269	LwK 4.8	29,20	-0,225	-0,22	-0,27	
271	LwK 4.8	29,19	-0,235	-0,23	-0,28	
272	LwK 4.8	29,57	0,145	0,14	0,17	
273	LwK 4.8	30,45	1,025	1,02	1,22	
275	LwK 4.8	29,25	-0,175	-0,17	-0,21	
276	LwK 4.8	28,20	-1,225	-1,22	-1,46	
277	LwK 4.8	29,92	0,495	0,49	0,59	
278	LwK 4.8	29,57	0,145	0,14	0,17	
279	LwK 4.8	28,50	-0,925	-0,92	-1,10	
280	LwK 4.8	28,76	-0,665	-0,66	-0,79	
281	LwK 4.8	28,25	-1,175	-1,17	-1,40	
282	LwK 4.8	30,40	0,975	0,97	1,16	
284	LwK 4.8	28,90	-0,525	-0,52	-0,63	
285	LwK 4.8	31,62	2,195	2,19	2,62	
287	LwK 4.8	33,82	4,395	4,39	5,25	(***)
288	LwK 4.8	33,40	3,975	3,97	4,75	
311	LwK 4.8	28,68	-0,745	-0,74	-0,89	
320	LwK 4.8	29,87	0,445	0,44	0,53	
337	LwK 4.8	30,54	1,115	1,11	1,33	
365	LwK 4.8	29,40	-0,025	-0,02	-0,03	

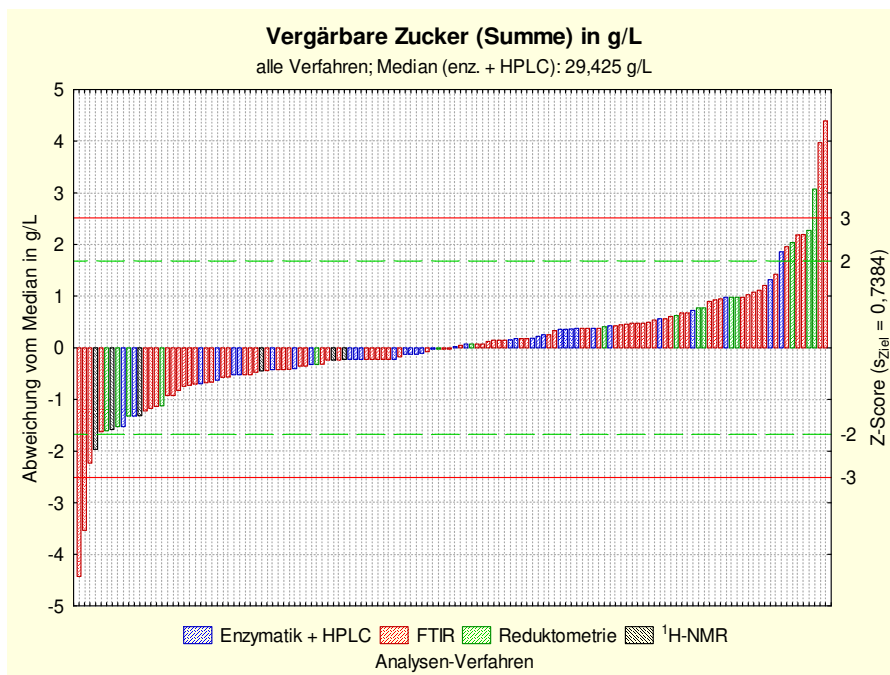
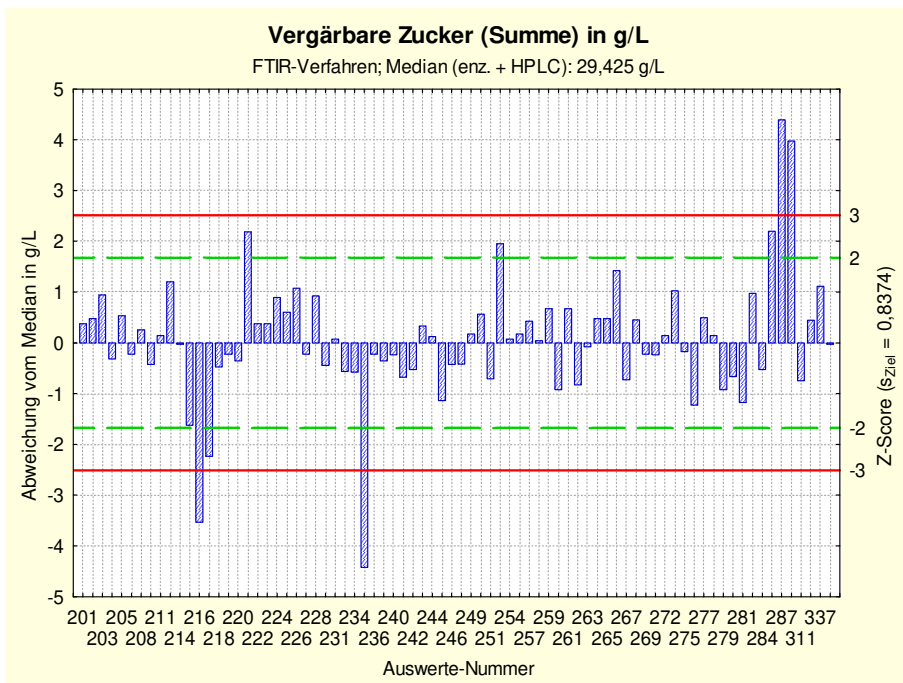
(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der enzymatischen und HPLC-Werte ab.

**5.4.4 Deskriptive Ergebnisse**

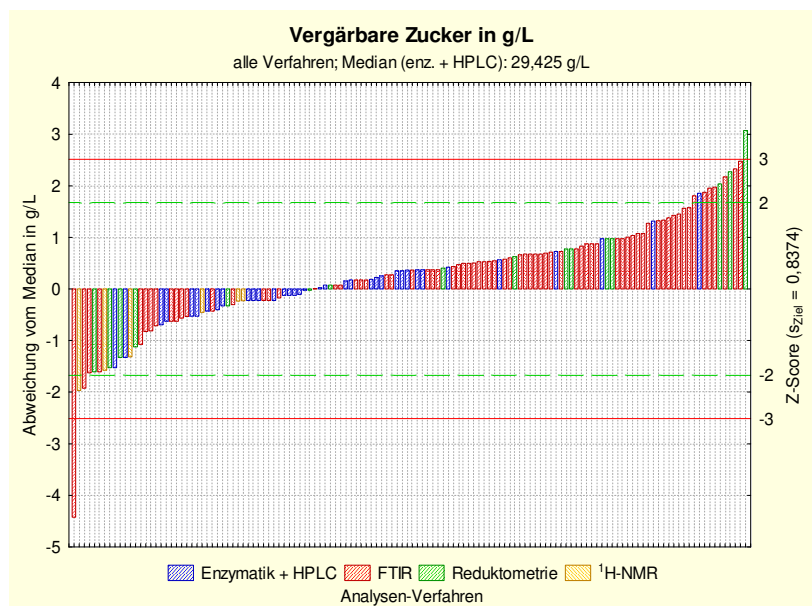
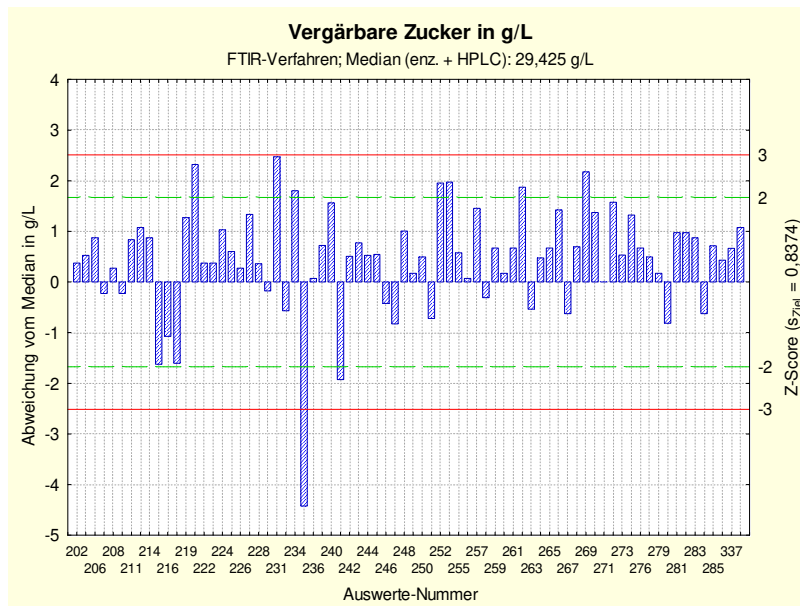
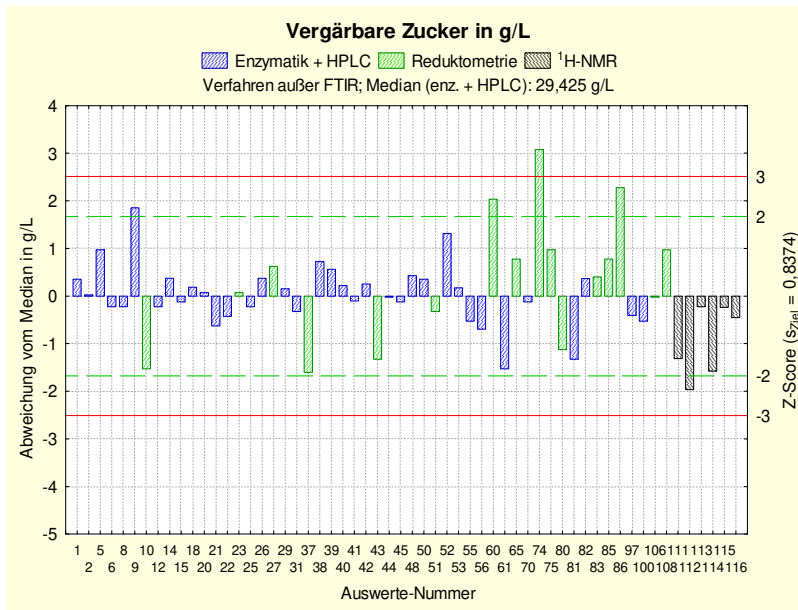
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymat. alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	27,90
Mittelwert	29,453
Median	29,425
Maximalwert	31,28
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,637
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,106
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,001
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,837
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,584)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,64
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,76
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(1,09)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,11
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,13
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,18)

5.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	27,900	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	28,825	1,612
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	13	30,085	1,355
	reduktometrische Verfahren	16	29,804	1,415
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	27	29,482	0,415
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	29,296	0,833
	enzymatische und HPLC-Verfahren	36	29,440	0,504
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	74	29,947	0,872
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	78	29,466	0,807
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	28,462	0,855







## 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	12,96	-0,070	-0,14	-0,18	
02	enzymat., autom.	13,35	0,320	0,64	0,81	
04	enzymat., autom.	13,26	0,230	0,46	0,58	
05	enzymat., autom.	13,50	0,470	0,94	1,19	
08	enzymat. Hand	13,00	-0,030	-0,06	-0,08	
09	HPLC	15,01	1,980	3,95	5,02	(**)
10	enzymat., autom.	12,65	-0,380	-0,76	-0,96	
12	enzymat., autom.	12,80	-0,230	-0,46	-0,58	
14	enzymat., autom.	13,07	0,040	0,08	0,10	
15	enzymat., autom.	13,00	-0,030	-0,06	-0,08	
18	enzymat., autom.	13,08	0,050	0,10	0,13	
20	HPLC	13,03	0,000	0,00	0,00	
21	HPLC	12,66	-0,370	-0,74	-0,94	
22	HPLC	12,80	-0,230	-0,46	-0,58	
25	enzymat., autom.	13,04	0,010	0,02	0,03	
26	HPLC	13,20	0,170	0,34	0,43	
29	enzymat., autom.	12,90	-0,130	-0,26	-0,33	
31	enzymat., autom.	12,73	-0,301	-0,60	-0,76	
38	enzymat., autom.	13,03	0,000	0,00	0,00	
39	HPLC	13,30	0,270	0,54	0,68	
40	enzymat., autom.	12,97	-0,056	-0,11	-0,14	
41	enzymat., autom.	12,88	-0,150	-0,30	-0,38	
42	enzymat., autom.	12,99	-0,037	-0,07	-0,09	
44	enzymat., autom.	12,70	-0,330	-0,66	-0,84	
45	enzymat., autom.	13,10	0,070	0,14	0,18	
48	enzymat., autom.	13,18	0,148	0,30	0,37	
50	enzymat., autom.	13,31	0,280	0,56	0,71	
52	enzymat., autom.	13,41	0,380	0,76	0,96	
53	enzymat., autom.	13,13	0,100	0,20	0,25	
56	enzymat., autom.	12,88	-0,150	-0,30	-0,38	
61	HPLC	12,90	-0,130	-0,26	-0,33	
70	enzymat., autom.	13,05	0,020	0,04	0,05	
81	HPLC	12,40	-0,630	-1,26	-1,60	
82	enzymat. Hand	13,50	0,470	0,94	1,19	
89	HPLC	13,90	0,870	1,74	2,20	
97	HPLC	12,79	-0,240	-0,48	-0,61	
111	NMR	12,26	-0,765	-1,53	-1,94	
112	NMR	12,14	-0,891	-1,78	-2,26	
113	NMR	12,79	-0,243	-0,49	-0,62	
114	NMR	12,11	-0,919	-1,83	-2,33	
115	NMR	12,58	-0,450	-0,90	-1,14	
116	NMR	12,44	-0,593	-1,18	-1,50	

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

### 5.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	13,40	0,370	0,74	0,91	
202	FTIR	13,70	0,670	1,34	1,64	
203	FTIR	13,86	0,830	1,66	2,03	
204	FTIR	12,95	-0,080	-0,16	-0,20	
205	FTIR	13,78	0,750	1,50	1,84	
207	FTIR	13,30	0,270	0,54	0,66	
208	FTIR	13,08	0,050	0,10	0,12	
210	FTIR	12,80	-0,230	-0,46	-0,56	
211	FTIR	13,46	0,430	0,86	1,05	
212	FTIR	14,04	1,010	2,02	2,48	
214	FTIR	14,00	0,970	1,94	2,38	
215	FTIR	12,70	-0,330	-0,66	-0,81	
216	FTIR	11,80	-1,230	-2,46	-3,01	
217	FTIR	12,49	-0,540	-1,08	-1,32	
218	FTIR	12,62	-0,410	-0,82	-1,00	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	13,30	0,270	0,54	0,66	
220	FTIR	12,98	-0,050	-0,10	-0,12	
221	FTIR	14,15	1,120	2,24	2,75	
222	FTIR	12,90	-0,130	-0,26	-0,32	
223	FTIR	13,50	0,470	0,94	1,15	
224	FTIR	13,72	0,690	1,38	1,69	
225	FTIR	13,51	0,480	0,96	1,18	
226	FTIR	13,70	0,670	1,34	1,64	
227	FTIR	13,77	0,740	1,48	1,81	
228	FTIR	14,12	1,090	2,18	2,67	
229	FTIR	13,07	0,040	0,08	0,10	
231	FTIR	13,50	0,470	0,94	1,15	
232	FTIR	13,25	0,220	0,44	0,54	
234	FTIR	12,98	-0,050	-0,10	-0,12	
235	FTIR	12,70	-0,330	-0,66	-0,81	
236	FTIR	13,60	0,570	1,14	1,40	
237	FTIR	14,65	1,620	3,23	3,97	
240	FTIR	13,22	0,190	0,38	0,47	
241	FTIR	12,45	-0,580	-1,16	-1,42	
242	FTIR	13,10	0,070	0,14	0,17	
243	FTIR	13,41	0,380	0,76	0,93	
244	FTIR	13,26	0,230	0,46	0,56	
245	FTIR	12,82	-0,210	-0,42	-0,51	
246	FTIR	12,70	-0,330	-0,66	-0,81	
247	FTIR	13,50	0,470	0,94	1,15	
249	FTIR	13,40	0,370	0,74	0,91	
250	FTIR	13,86	0,830	1,66	2,03	
251	FTIR	12,92	-0,110	-0,22	-0,27	
252	FTIR	14,03	1,000	2,00	2,45	
254	FTIR	13,90	0,870	1,74	2,13	
256	FTIR	13,40	0,370	0,74	0,91	
257	FTIR	13,75	0,720	1,44	1,76	
258	FTIR	13,43	0,400	0,80	0,98	
259	FTIR	14,10	1,070	2,14	2,62	
260	FTIR	13,40	0,370	0,74	0,91	
261	FTIR	14,20	1,170	2,34	2,87	
262	FTIR	13,60	0,570	1,14	1,40	
263	FTIR	13,40	0,370	0,74	0,91	
264	FTIR	13,85	0,820	1,64	2,01	
265	FTIR	13,60	0,570	1,14	1,40	
266	FTIR	14,62	1,590	3,17	3,90	
267	FTIR	12,70	-0,330	-0,66	-0,81	
268	FTIR	13,42	0,390	0,78	0,96	
269	FTIR	12,90	-0,130	-0,26	-0,32	
271	FTIR	13,76	0,730	1,46	1,79	
272	FTIR	12,86	-0,170	-0,34	-0,42	
273	FTIR	13,49	0,460	0,92	1,13	
275	FTIR	12,64	-0,390	-0,78	-0,96	
276	FTIR	13,00	-0,030	-0,06	-0,07	
277	FTIR	13,17	0,140	0,28	0,34	
278	FTIR	12,95	-0,080	-0,16	-0,20	
279	FTIR	13,00	-0,030	-0,06	-0,07	
280	FTIR	13,46	0,430	0,86	1,05	
281	FTIR	13,20	0,170	0,34	0,42	
282	FTIR	14,10	1,070	2,14	2,62	
284	FTIR	12,30	-0,730	-1,46	-1,79	
285	FTIR	15,20	2,170	4,33	5,32	(***)
287	FTIR	14,70	1,670	3,33	4,09	
288	FTIR	14,33	1,300	2,60	3,19	
311	FTIR	12,65	-0,380	-0,76	-0,93	
320	FTIR	13,35	0,320	0,64	0,78	
337	FTIR	13,35	0,320	0,64	0,78	
365	FTIR	13,00	-0,030	-0,06	-0,07	

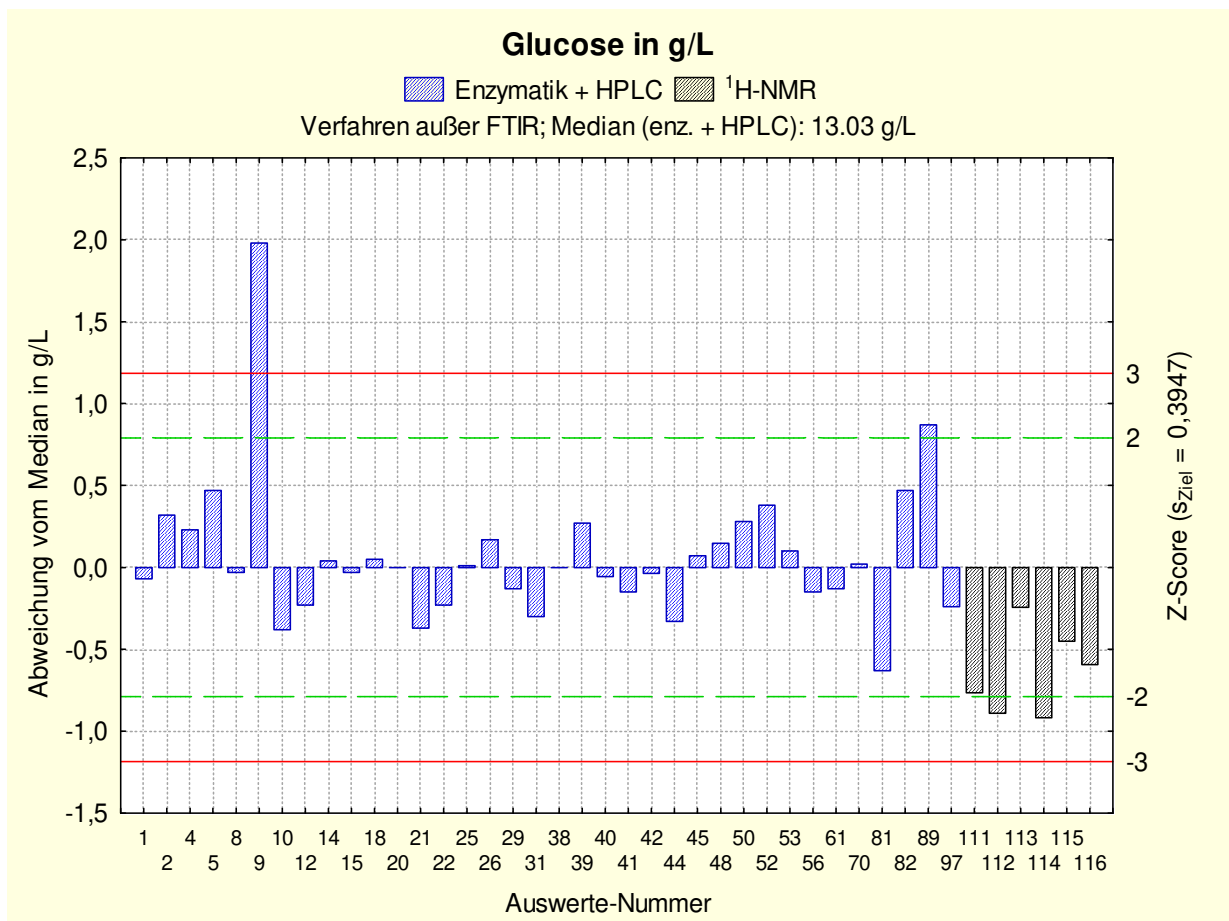
(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

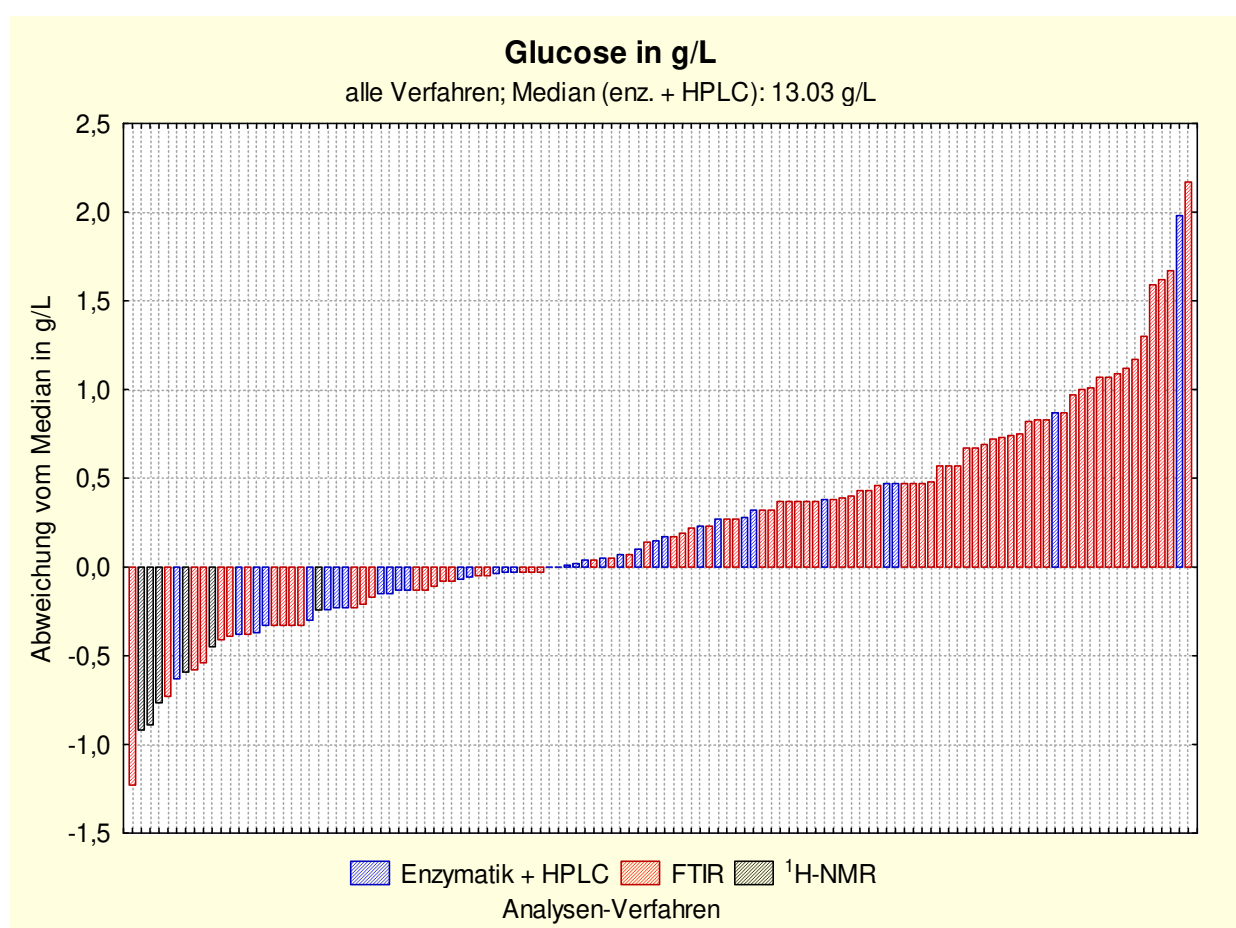
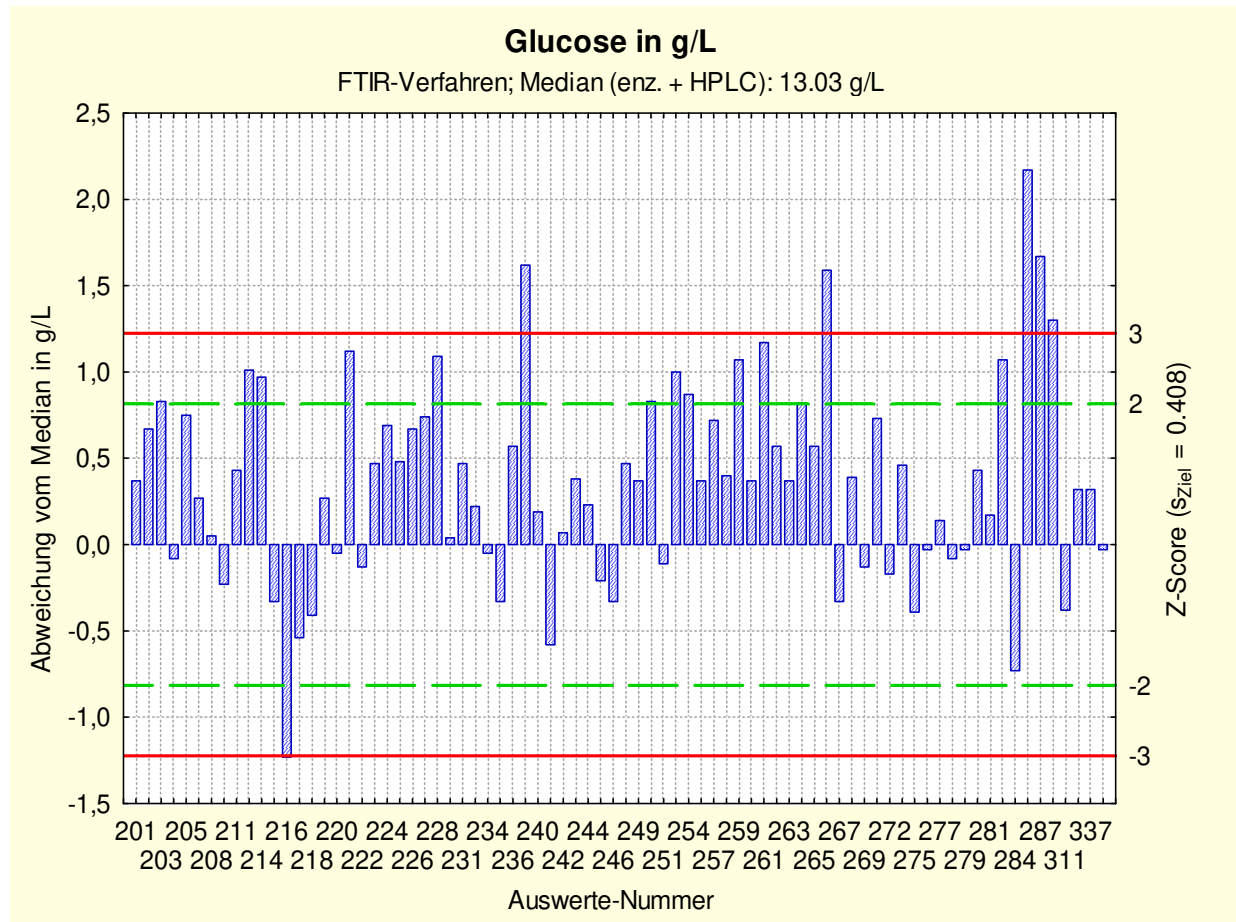
**5.5.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	36	35
Minimalwert	12,40	12,40
Mittelwert	13,096	13,042
Median	13,030	13,030
Maximalwert	15,01	13,90
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,435	0,289
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,072	0,049
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,501	0,501
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,395	0,395
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,408	0,408
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,87	0,58
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,10	0,73
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,07	0,71
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,14	0,10
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,18	0,12
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,18	0,12

**5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	10	13,090	0,571
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	13,041	0,240
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	13,135	0,304
	herkömmliche Verfahren	36	13,046	0,279
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	13,379	0,569
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	12,387	0,301





## 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	16,82	0,486	0,80	1,00	
02	enzymat., autom.	16,10	-0,234	-0,39	-0,48	
04	enzymat., autom.	16,27	-0,064	-0,11	-0,13	
05	enzymat., autom.	16,90	0,566	0,93	1,17	
08	enzymat. Hand	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
09	HPLC	16,27	-0,064	-0,11	-0,13	
10	enzymat., autom.	15,87	-0,464	-0,76	-0,96	
12	enzymat., autom.	16,40	0,066	0,11	0,14	
14	enzymat., autom.	16,76	0,426	0,70	0,88	
15	enzymat., autom.	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
18	enzymat., autom.	16,53	0,196	0,32	0,41	
20	HPLC	16,47	0,136	0,22	0,28	
21	HPLC	16,14	-0,194	-0,32	-0,40	
22	HPLC	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
25	enzymat., autom.	16,16	-0,173	-0,29	-0,36	
26	HPLC	16,60	0,266	0,44	0,55	
29	enzymat., autom.	16,65	0,316	0,52	0,65	
31	enzymat., autom.	16,33	-0,004	-0,01	-0,01	
38	enzymat., autom.	17,12	0,786	1,30	1,62	
39	HPLC	16,69	0,356	0,59	0,74	
40	enzymat., autom.	16,67	0,338	0,56	0,70	
41	enzymat., autom.	16,44	0,106	0,17	0,22	
42	enzymat., autom.	16,33	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	16,67	0,336	0,55	0,69	
45	enzymat., autom.	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
48	enzymat., autom.	16,67	0,336	0,55	0,69	
50	enzymat., autom.	16,47	0,136	0,22	0,28	
52	enzymat., autom.	17,25	0,916	1,51	1,89	
53	enzymat., autom.	16,44	0,106	0,17	0,22	
56	enzymat., autom.	15,85	-0,484	-0,80	-1,00	
61	HPLC	12,85	-3,484	-5,74	-7,20	(**)
70	enzymat., autom.	16,26	-0,074	-0,12	-0,15	
81	HPLC	15,70	-0,634	-1,04	-1,31	
82	enzymat. Hand	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
89	HPLC	16,12	-0,214	-0,35	-0,44	
97	HPLC	16,23	-0,104	-0,17	-0,21	
111	NMR	15,76	-0,570	-0,94	-1,18	
112	NMR	15,31	-1,019	-1,68	-2,11	
113	NMR	16,33	-0,001	-0,00	-0,00	
114	NMR	15,66	-0,678	-1,12	-1,40	
115	NMR	16,61	0,276	0,45	0,57	
116	NMR	16,46	0,127	0,21	0,26	

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

### 5.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	16,40	0,066	0,11	0,14	
202	FTIR	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
203	FTIR	16,51	0,176	0,29	0,36	
204	FTIR	16,16	-0,174	-0,29	-0,36	
205	FTIR	16,18	-0,154	-0,25	-0,32	
207	FTIR	15,90	-0,434	-0,72	-0,90	
208	FTIR	16,60	0,266	0,44	0,55	
210	FTIR	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
211	FTIR	16,11	-0,224	-0,37	-0,46	
212	FTIR	16,59	0,256	0,42	0,53	
214	FTIR	15,40	-0,934	-1,54	-1,93	
215	FTIR	15,10	-1,234	-2,03	-2,55	
216	FTIR	14,09	-2,244	-3,70	-4,64	
217	FTIR	14,70	-1,634	-2,69	-3,38	
218	FTIR	16,33	-0,004	-0,01	-0,01	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	15,90	-0,434	-0,72	-0,90	
220	FTIR	16,09	-0,244	-0,40	-0,50	
221	FTIR	17,46	1,126	1,86	2,33	
222	FTIR	16,90	0,566	0,93	1,17	
223	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
224	FTIR	16,60	0,266	0,44	0,55	
225	FTIR	16,52	0,186	0,31	0,38	
226	FTIR	16,80	0,466	0,77	0,96	
227	FTIR	15,43	-0,904	-1,49	-1,87	
228	FTIR	16,23	-0,104	-0,17	-0,21	
229	FTIR	15,91	-0,424	-0,70	-0,88	
231	FTIR	16,00	-0,334	-0,55	-0,69	
232	FTIR	15,61	-0,724	-1,19	-1,50	
234	FTIR	15,87	-0,464	-0,76	-0,96	
235	FTIR	12,30	-4,034	-6,65	-8,34	(***)
236	FTIR	15,60	-0,734	-1,21	-1,52	
237	FTIR	14,42	-1,914	-3,15	-3,96	
240	FTIR	15,97	-0,364	-0,60	-0,75	
241	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
242	FTIR	15,80	-0,534	-0,88	-1,10	
243	FTIR	16,35	0,016	0,03	0,03	
244	FTIR	16,29	-0,044	-0,07	-0,09	
245	FTIR	15,47	-0,864	-1,42	-1,79	
246	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
247	FTIR	15,51	-0,824	-1,36	-1,70	
249	FTIR	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
250	FTIR	16,13	-0,204	-0,34	-0,42	
251	FTIR	15,80	-0,534	-0,88	-1,10	
252	FTIR	17,35	1,016	1,67	2,10	
254	FTIR	15,60	-0,734	-1,21	-1,52	
256	FTIR	16,20	-0,134	-0,22	-0,28	
257	FTIR	16,10	-0,234	-0,39	-0,48	
258	FTIR	16,04	-0,294	-0,48	-0,61	
259	FTIR	16,00	-0,334	-0,55	-0,69	
260	FTIR	15,10	-1,234	-2,03	-2,55	
261	FTIR	15,90	-0,434	-0,72	-0,90	
262	FTIR	15,00	-1,334	-2,20	-2,76	
263	FTIR	15,95	-0,384	-0,63	-0,79	
264	FTIR	16,05	-0,284	-0,47	-0,59	
265	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
266	FTIR	16,23	-0,104	-0,17	-0,21	
267	FTIR	16,00	-0,334	-0,55	-0,69	
268	FTIR	16,46	0,126	0,21	0,26	
269	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
271	FTIR	15,43	-0,904	-1,49	-1,87	
272	FTIR	16,71	0,376	0,62	0,78	
273	FTIR	16,96	0,626	1,03	1,29	
275	FTIR	16,61	0,276	0,45	0,57	
276	FTIR	15,20	-1,134	-1,87	-2,34	
277	FTIR	16,75	0,416	0,69	0,86	
278	FTIR	16,62	0,286	0,47	0,59	
279	FTIR	15,50	-0,834	-1,37	-1,72	
280	FTIR	15,30	-1,034	-1,70	-2,14	
281	FTIR	15,05	-1,284	-2,12	-2,65	
282	FTIR	16,30	-0,034	-0,06	-0,07	
284	FTIR	16,60	0,266	0,44	0,55	
285	FTIR	16,42	0,086	0,14	0,18	
287	FTIR	19,12	2,786	4,59	5,76	(***)
288	FTIR	19,07	2,736	4,51	5,65	(***)
311	FTIR	16,03	-0,304	-0,50	-0,63	
320	FTIR	16,52	0,186	0,31	0,38	
337	FTIR	17,19	0,856	1,41	1,77	
365	FTIR	16,40	0,066	0,11	0,14	

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

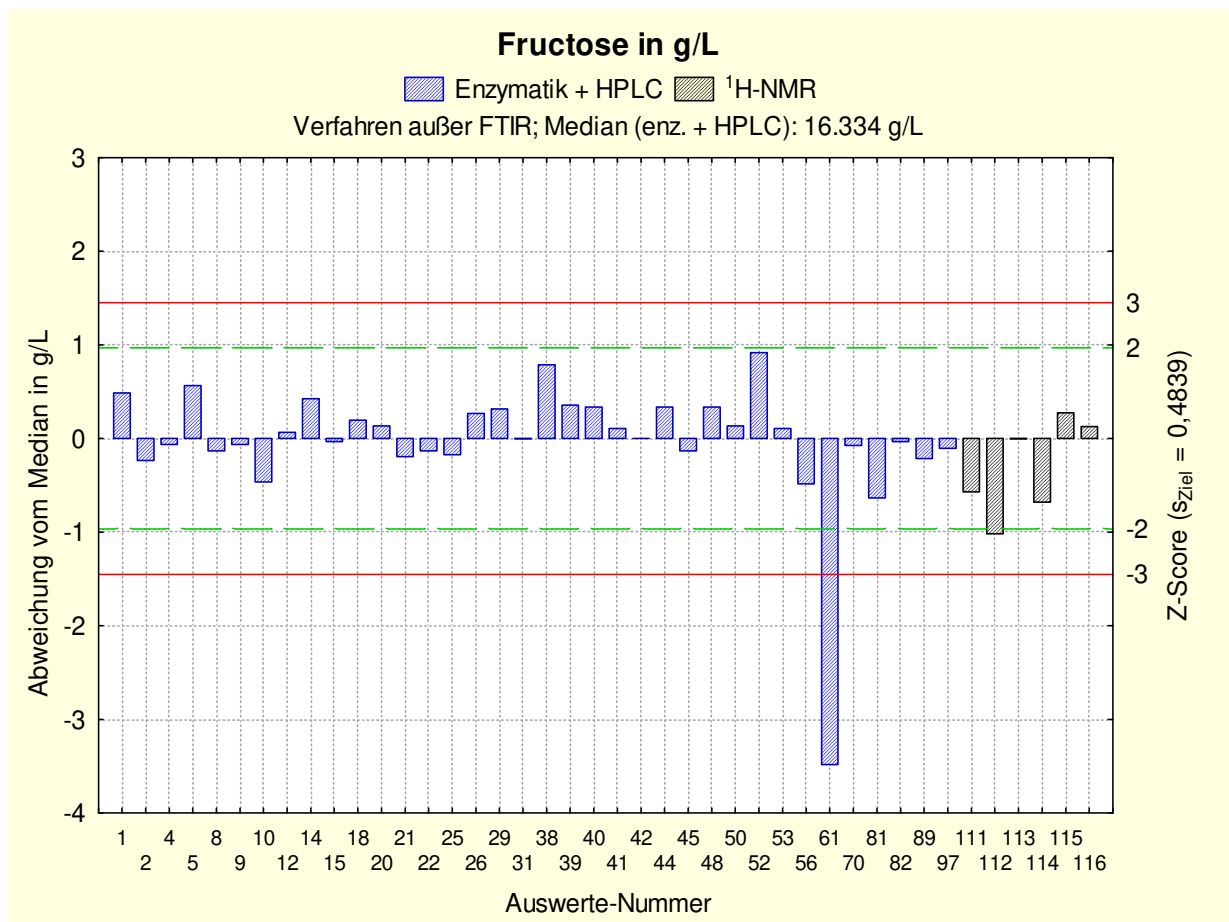
**5.6.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	36	35
Minimalwert	12,85	15,70
Mittelwert	16,312	16,411
Median	16,332	16,334
Maximalwert	17,25	17,25
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,679	0,335
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,113	0,057
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,607	0,607
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,484	0,484
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>ÜFTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	(0,330)	(0,330)
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,12	0,55
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,40	0,69
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	(2,06)	(1,02)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,19	0,09
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,23	0,12
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	(0,34)	(0,17)

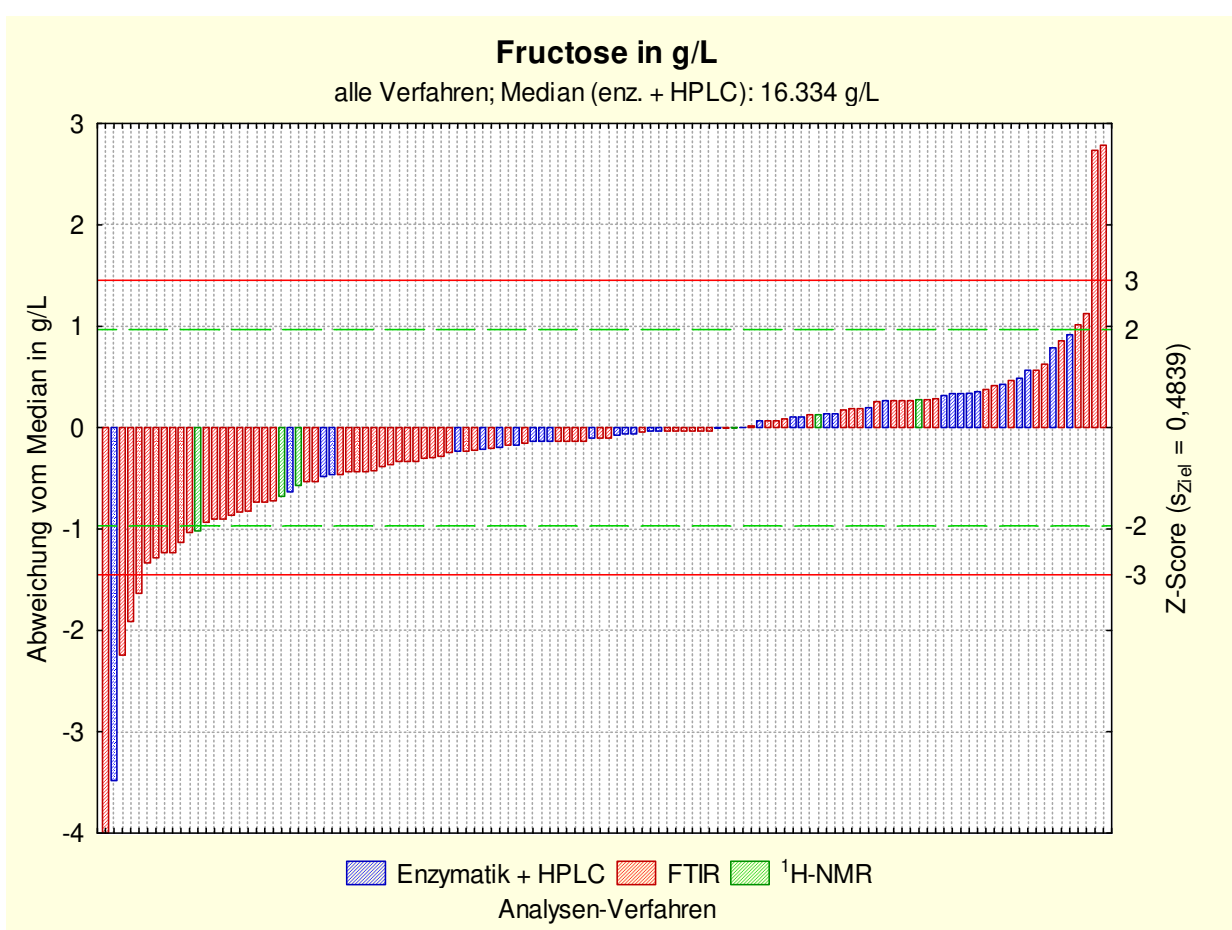
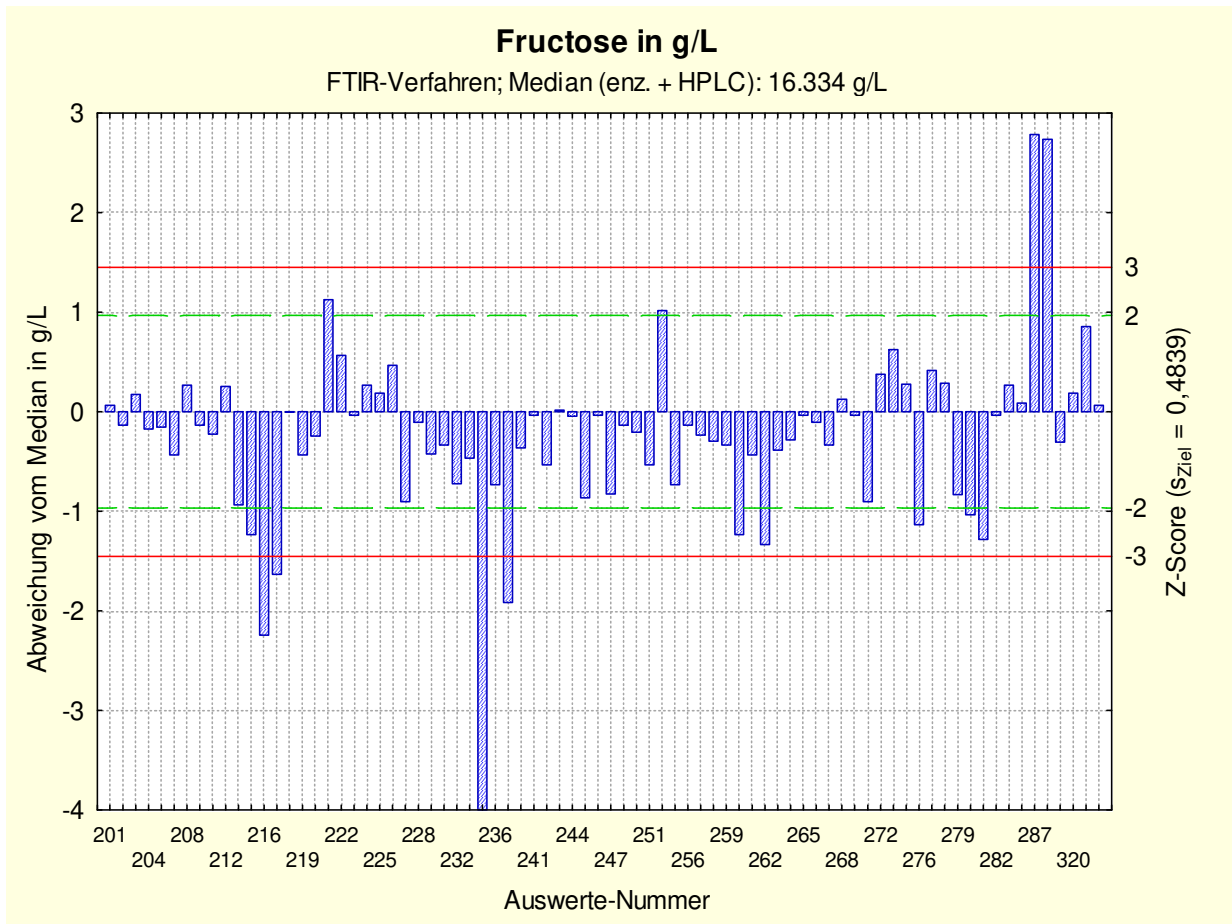
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s<sub>exp herk</sub> bewertet.

**5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	16,199	0,371
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	16,450	0,330
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	16,416	0,331
	herkömmliche Verfahren	36	16,385	0,327
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	16,097	0,591
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	16,023	0,586







## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,84	-0,175	-0,67	
04	enzymat. autom.	6,00	-0,015	-0,06	
05	enzymat. autom.	5,95	-0,065	-0,25	
09	enzymat. autom.	6,38	0,365	1,41	
10	enzymat. Hand	5,89	-0,125	-0,48	
14	enzymat. autom.	5,85	-0,165	-0,64	
21	HPLC	6,65	0,635	2,44	
22	HPLC	6,00	-0,015	-0,06	
26	HPLC	6,80	0,785	3,02	
39	HPLC	6,90	0,885	3,41	
56	enzymat. autom.	6,03	0,015	0,06	
61	HPLC	6,50	0,485	1,87	
81	HPLC	6,10	0,085	0,33	
82	enzymat. Hand	5,77	-0,245	-0,94	
92	enzymat. Hand	5,89	-0,125	-0,48	
97	HPLC	7,04	1,025	3,95	
111	NMR	6,48	0,467	1,80	
112	NMR	5,59	-0,422	-1,63	
113	NMR	5,94	-0,076	-0,29	
114	NMR	6,06	0,047	0,18	
115	NMR	5,88	-0,135	-0,52	
116	NMR	6,03	0,018	0,07	

### 5.7.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	16
Minimalwert	5,77
Mittelwert	6,224
Median	6,015
Maximalwert	7,04
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,423
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,106
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,260
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,63
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,21
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,41
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,30

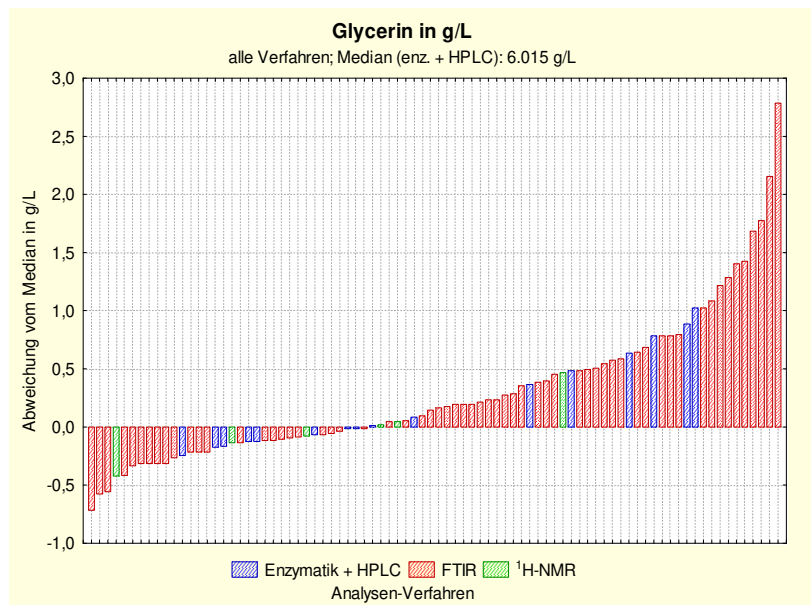
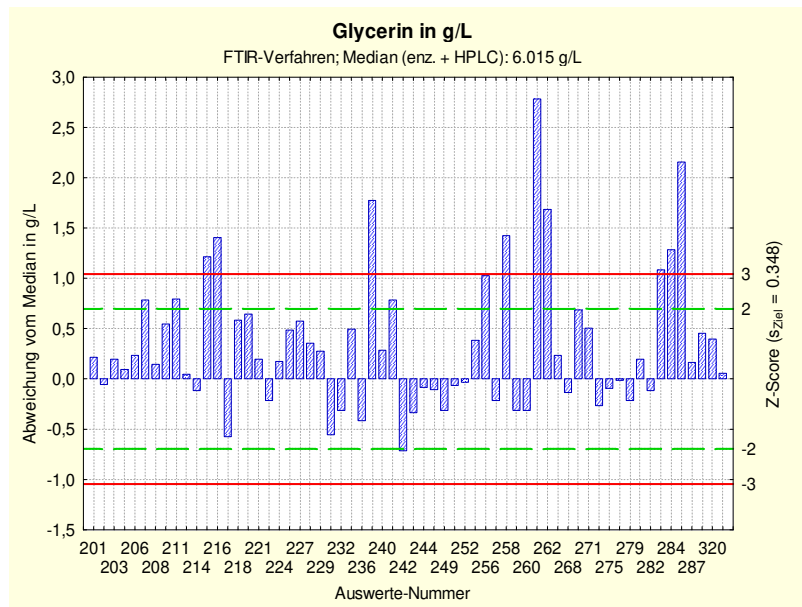
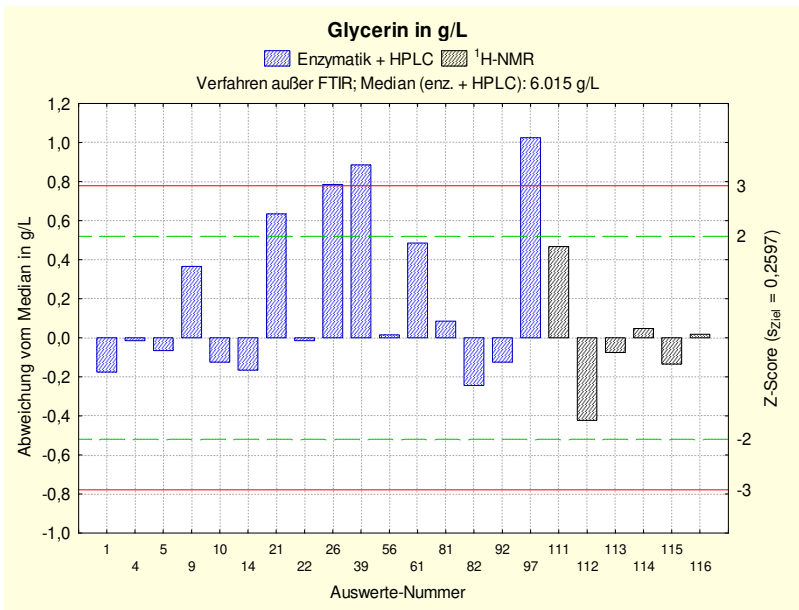
### 5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	7	6,583	0,424
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	6,043	0,227
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	5,848	0,064
	herkömmliche Verfahren	16	6,200	0,439
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	62	6,280	0,564
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	6,000	0,322

**5.7.4 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,23	0,215	0,83	0,62	
202	FTIR	5,96	-0,055	-0,21	-0,16	
203	FTIR	6,21	0,195	0,75	0,56	
205	FTIR	6,11	0,095	0,37	0,27	
206	FTIR	6,25	0,235	0,90	0,68	
207	FTIR	6,80	0,785	3,02	2,26	
208	FTIR	6,16	0,145	0,56	0,42	
210	FTIR	6,56	0,545	2,10	1,57	
211	FTIR	6,81	0,795	3,06	2,28	
212	FTIR	6,06	0,045	0,17	0,13	
214	FTIR	5,90	-0,115	-0,44	-0,33	
215	FTIR	7,23	1,215	4,68	3,49	
216	FTIR	7,42	1,405	5,41	4,04	
217	FTIR	5,44	-0,575	-2,21	-1,65	
218	FTIR	6,60	0,585	2,25	1,68	
220	FTIR	6,66	0,645	2,48	1,85	
221	FTIR	6,21	0,195	0,75	0,56	
223	FTIR	5,80	-0,215	-0,83	-0,62	
224	FTIR	6,19	0,175	0,67	0,50	
226	FTIR	6,50	0,485	1,87	1,39	
227	FTIR	6,59	0,575	2,21	1,65	
228	FTIR	6,37	0,355	1,37	1,02	
229	FTIR	6,29	0,275	1,06	0,79	
231	FTIR	5,46	-0,555	-2,14	-1,59	
232	FTIR	5,70	-0,315	-1,21	-0,91	
234	FTIR	6,51	0,495	1,91	1,42	
236	FTIR	5,60	-0,415	-1,60	-1,19	
237	FTIR	7,79	1,775	6,83	5,10	(***)
240	FTIR	6,30	0,285	1,10	0,82	
241	FTIR	6,80	0,785	3,02	2,26	
242	FTIR	5,30	-0,715	-2,75	-2,05	
243	FTIR	5,68	-0,335	-1,29	-0,96	
244	FTIR	5,93	-0,085	-0,33	-0,24	
245	FTIR	5,91	-0,105	-0,40	-0,30	
249	FTIR	5,70	-0,315	-1,21	-0,91	
250	FTIR	5,95	-0,065	-0,25	-0,19	
252	FTIR	5,98	-0,035	-0,13	-0,10	
254	FTIR	6,40	0,385	1,48	1,11	
256	FTIR	7,04	1,025	3,95	2,95	
257	FTIR	5,80	-0,215	-0,83	-0,62	
258	FTIR	7,44	1,425	5,49	4,09	
259	FTIR	5,70	-0,315	-1,21	-0,91	
260	FTIR	5,70	-0,315	-1,21	-0,91	
261	FTIR	8,80	2,785	10,72	8,00	(***)
262	FTIR	7,70	1,685	6,49	4,84	
264	FTIR	6,25	0,235	0,90	0,68	
268	FTIR	5,88	-0,135	-0,52	-0,39	
269	FTIR	6,70	0,685	2,64	1,97	
271	FTIR	6,52	0,505	1,94	1,45	
272	FTIR	5,75	-0,265	-1,02	-0,76	
275	FTIR	5,92	-0,095	-0,37	-0,27	
276	FTIR	6,00	-0,015	-0,06	-0,04	
279	FTIR	5,80	-0,215	-0,83	-0,62	
280	FTIR	6,21	0,195	0,75	0,56	
282	FTIR	5,90	-0,115	-0,44	-0,33	
283	FTIR	7,10	1,085	4,18	3,12	
284	FTIR	7,30	1,285	4,95	3,69	
285	FTIR	8,17	2,155	8,30	6,19	(***)
287	FTIR	6,18	0,165	0,64	0,47	
288	FTIR	6,47	0,455	1,75	1,31	
320	FTIR	6,41	0,395	1,52	1,14	
337	FTIR	6,07	0,055	0,21	0,16	

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



## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,55	0,030	0,63	
02	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
04	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
05	potentiometr.	3,47	-0,050	-1,05	
06	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
08	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
09	potentiometr.	3,58	0,060	1,26	
10	potentiometr.	3,36	-0,160	-3,36	
12	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
14	potentiometr.	3,59	0,070	1,47	
15	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
18	potentiometr.	3,59	0,066	1,39	
20	potentiometr.	3,40	-0,120	-2,52	
21	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
22	potentiometr.	3,51	-0,010	-0,21	
25	potentiometr.	3,44	-0,080	-1,68	
26	potentiometr.	3,59	0,070	1,47	
27	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
29	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
31	potentiometr.	3,56	0,040	0,84	
37	potentiometr.	3,28	-0,240	-5,04	(**)
38	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
39	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
40	potentiometr.	3,51	-0,010	-0,21	
41	potentiometr.	3,55	0,030	0,63	
42	potentiometr.	3,46	-0,060	-1,26	
43	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
44	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
45	potentiometr.	3,66	0,140	2,94	
50	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
53	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
56	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
60	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
61	potentiometr.	3,21	-0,310	-6,51	(**)
65	potentiometr.	3,43	-0,090	-1,89	
70	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
74	potentiometr.	3,41	-0,110	-2,31	
75	potentiometr.	3,35	-0,170	-3,57	
77	potentiometr.	3,57	0,050	1,05	
78	potentiometr.	3,56	0,040	0,84	
81	potentiometr.	3,63	0,110	2,31	
82	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
83	potentiometr.	3,51	-0,010	-0,21	
85	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
86	potentiometr.	3,77	0,250	5,25	(**)
106	potentiometr.	3,35	-0,170	-3,57	

Die mit (\*\*) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	46	3,513	0,0750
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	3,466	0,0798
	alle Verfahren	125	3,483	0,0836

**5.8.3 FTIR-Laboregebnisse**

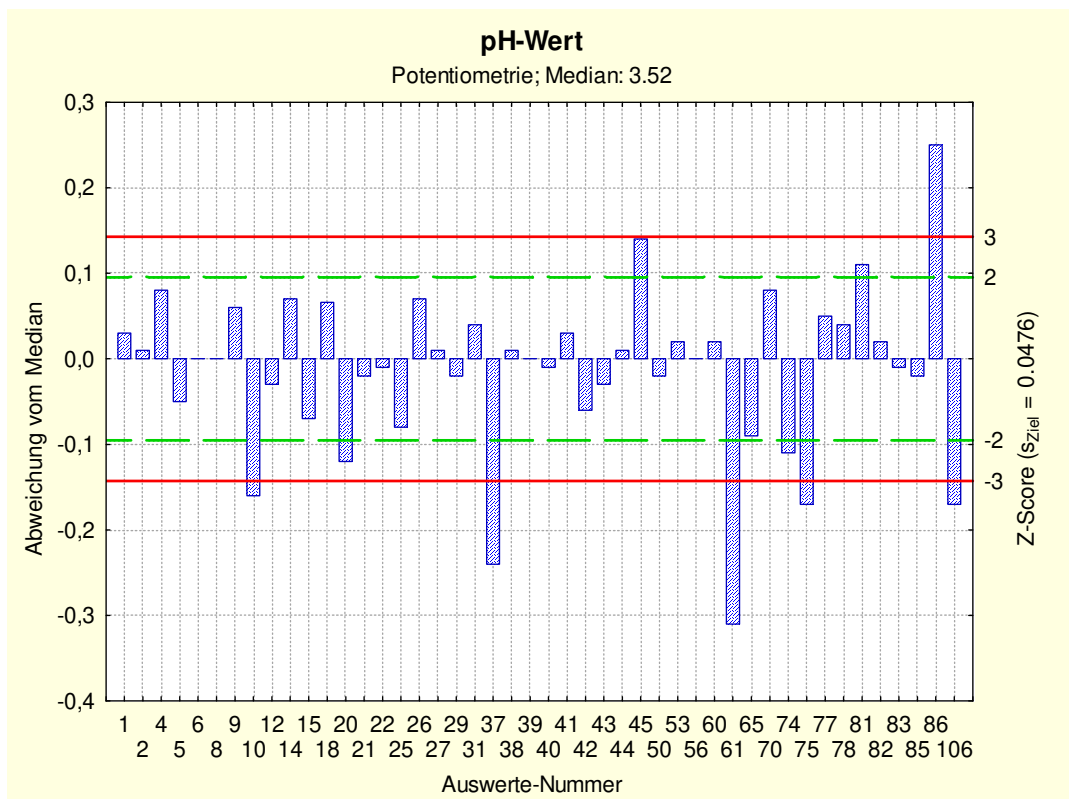
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,41	-0,110	-2,23	
202	FTIR	3,51	-0,010	-0,20	
203	FTIR	3,44	-0,080	-1,62	
204	FTIR	3,58	0,060	1,22	
205	FTIR	3,44	-0,080	-1,62	
206	FTIR	3,49	-0,030	-0,61	
207	FTIR	3,40	-0,120	-2,43	
208	FTIR	3,55	0,030	0,61	
210	FTIR	3,34	-0,180	-3,65	
211	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
212	FTIR	3,45	-0,070	-1,42	
214	FTIR	3,45	-0,070	-1,42	
215	FTIR	3,39	-0,130	-2,64	
216	FTIR	3,28	-0,240	-4,87	
217	FTIR	3,42	-0,100	-2,03	
218	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
219	FTIR	3,57	0,050	1,01	
220	FTIR	3,46	-0,060	-1,22	
221	FTIR	3,37	-0,150	-3,04	
222	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
223	FTIR	3,36	-0,160	-3,25	
224	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
225	FTIR	3,39	-0,130	-2,64	
226	FTIR	3,56	0,040	0,81	
227	FTIR	3,50	-0,020	-0,41	
228	FTIR	3,52	0,000	0,00	
229	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
231	FTIR	3,44	-0,080	-1,62	
232	FTIR	3,46	-0,060	-1,22	
234	FTIR	3,49	-0,030	-0,61	
235	FTIR	3,39	-0,130	-2,64	
236	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
237	FTIR	3,56	0,040	0,81	
240	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
241	FTIR	3,40	-0,120	-2,43	
242	FTIR	3,40	-0,120	-2,43	
243	FTIR	3,50	-0,020	-0,41	
244	FTIR	3,49	-0,030	-0,61	
245	FTIR	3,45	-0,070	-1,42	
247	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
249	FTIR	3,45	-0,070	-1,42	
250	FTIR	3,43	-0,090	-1,83	
251	FTIR	3,53	0,010	0,20	
252	FTIR	3,49	-0,030	-0,61	
254	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
255	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
256	FTIR	3,57	0,050	1,01	
257	FTIR	3,28	-0,240	-4,87	
258	FTIR	3,37	-0,150	-3,04	
259	FTIR	3,47	-0,050	-1,01	
260	FTIR	3,61	0,090	1,83	
261	FTIR	3,38	-0,140	-2,84	
262	FTIR	3,56	0,040	0,81	
264	FTIR	3,49	-0,030	-0,61	
265	FTIR	3,56	0,040	0,81	
266	FTIR	3,52	0,000	0,00	
267	FTIR	3,34	-0,180	-3,65	
268	FTIR	3,50	-0,020	-0,41	
269	FTIR	3,40	-0,120	-2,43	
270	FTIR	3,71	0,190	3,85	
271	FTIR	3,59	0,070	1,42	
272	FTIR	3,36	-0,160	-3,25	
273	FTIR	3,40	-0,120	-2,43	
275	FTIR	3,41	-0,110	-2,23	
276	FTIR	3,62	0,100	2,03	
277	FTIR	3,51	-0,010	-0,20	

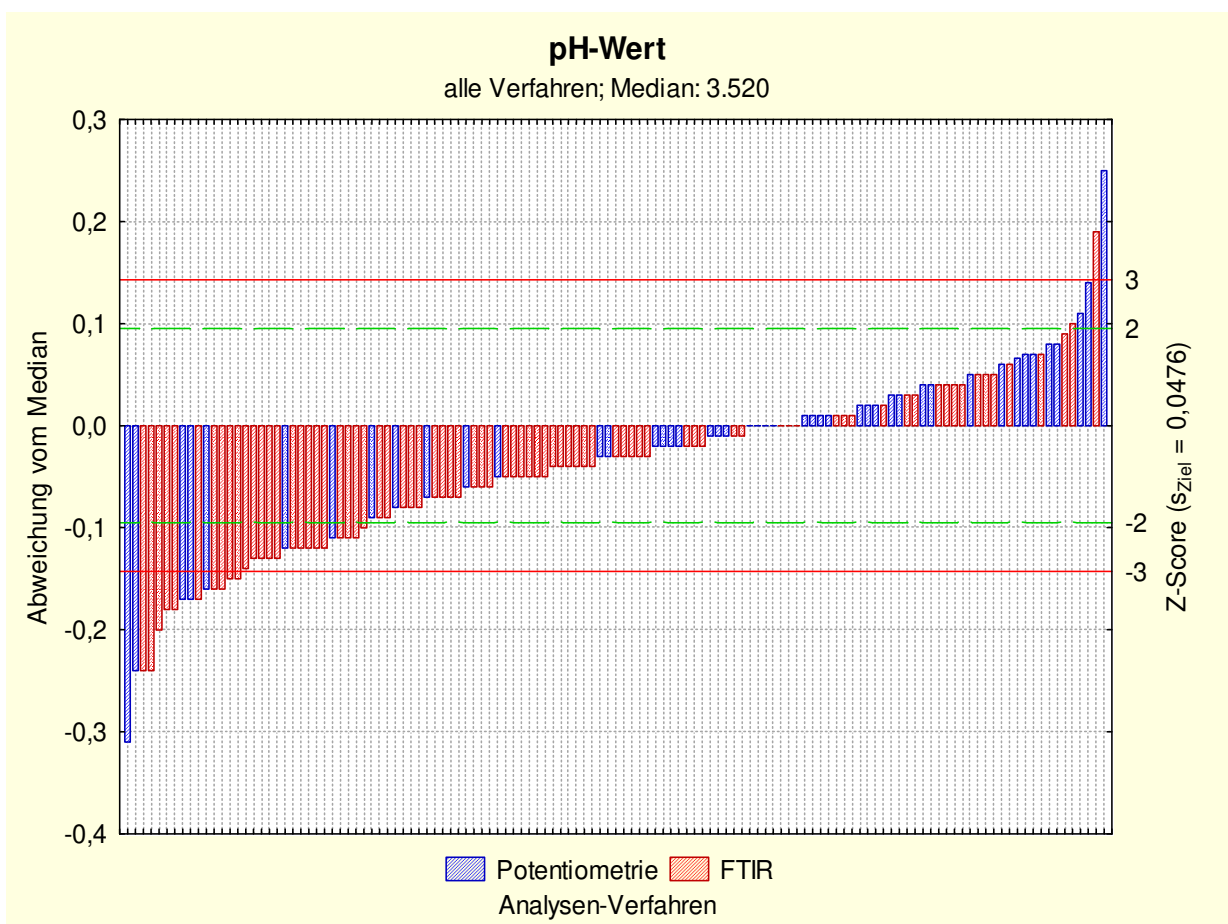
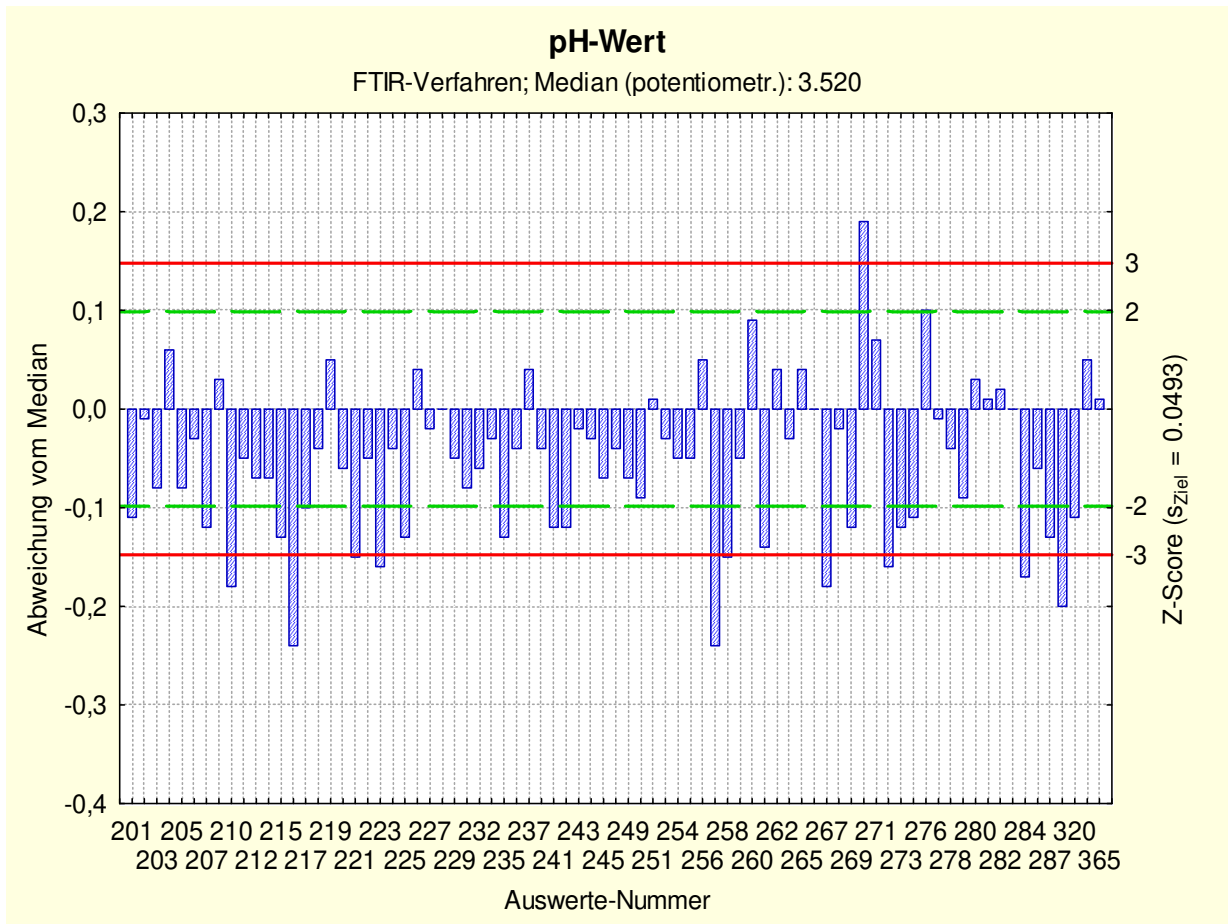
**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	3,48	-0,040	-0,81	
279	FTIR	3,43	-0,090	-1,83	
280	FTIR	3,55	0,030	0,61	
281	FTIR	3,53	0,010	0,20	
282	FTIR	3,54	0,020	0,41	
283	FTIR	3,52	0,000	0,00	
284	FTIR	3,35	-0,170	-3,45	
285	FTIR	3,46	-0,060	-1,22	
287	FTIR	3,39	-0,130	-2,64	
288	FTIR	3,32	-0,200	-4,06	
320	FTIR	3,41	-0,110	-2,23	
337	FTIR	3,57	0,050	1,01	
365	FTIR	3,53	0,010	0,20	

**5.8.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	46	43
Minimalwert	3,21	3,35
Mittelwert	3,507	3,513
Median	3,520	3,520
Maximalwert	3,77	3,66
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0965	0,0705
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0142	0,0107
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,03	1,48
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,96	1,43
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,30	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,29	0,21







**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	5,13	-0,160	-0,69	-1,49	
02	LwK 5.2.1	5,14	-0,150	-0,64	-1,40	
04	LwK 5.2.1	5,22	-0,070	-0,30	-0,65	
05	LwK 5.1	5,19	-0,100	-0,43	-0,93	
06	LwK 5.2.1	5,26	-0,030	-0,13	-0,28	
07	LwK 5.2.1	5,46	0,170	0,73	1,59	
08	LwK 5.2.1	5,27	-0,020	-0,09	-0,19	
09	LwK 5.2.1	5,23	-0,060	-0,26	-0,56	
10	LwK 5.1	5,10	-0,190	-0,82	-1,77	
12	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
14	LwK 5.1	5,41	0,120	0,52	1,12	
15	LwK 5.2.1	5,53	0,240	1,03	2,24	
18	LwK 5.2.1	5,34	0,050	0,21	0,47	
20	LwK 5.1	5,32	0,030	0,13	0,28	
21	LwK 5.1	5,15	-0,140	-0,60	-1,31	
22	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
23	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
25	LwK 5.1	5,34	0,050	0,21	0,47	
26	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
27	LwK 5.1	5,40	0,110	0,47	1,03	
29	LwK 5.2.1	5,25	-0,040	-0,17	-0,37	
31	LwK 5.1	5,00	-0,290	-1,25	-2,71	
37	LwK 5.1	5,41	0,120	0,52	1,12	
38	LwK 5.1	5,17	-0,118	-0,51	-1,10	
39	LwK 5.2.1	5,25	-0,040	-0,17	-0,37	
40	LwK 5.1	5,26	-0,030	-0,13	-0,28	
41	LwK 5.1	5,35	0,060	0,26	0,56	
42	LwK 5.1	5,14	-0,150	-0,64	-1,40	
43	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
44	LwK 5.1	5,24	-0,050	-0,21	-0,47	
45	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
48	LwK 5.1	5,10	-0,190	-0,82	-1,77	
50	LwK 5.1	5,28	-0,010	-0,04	-0,09	
51	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
52	LwK 5.2.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
53	LwK 5.2.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
55	LwK 5.2.1	5,50	0,210	0,90	1,96	
56	LwK 5.2.1	5,27	-0,020	-0,09	-0,19	
60	LwK 5.2.1	5,33	0,040	0,17	0,37	
61	LwK 5.1	5,10	-0,190	-0,82	-1,77	
65	LwK 5.1	5,33	0,040	0,17	0,37	
70	LwK 5.1	5,37	0,080	0,34	0,75	
74	LwK 5.1	5,74	0,450	1,93	4,20	
75	LwK 5.1	5,00	-0,290	-1,25	-2,71	
77	LwK 5.2.2	5,10	-0,190	-0,82	-1,77	
78	LwK 5.2.2	5,20	-0,090	-0,39	-0,84	
81	LwK 5.2.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
82	LwK 5.1	5,20	-0,090	-0,39	-0,84	
83	LwK 5.2.2	5,40	0,110	0,47	1,03	
85	LwK 5.1	5,10	-0,190	-0,82	-1,77	
86	LwK 5.1	5,90	0,610	2,62	5,69	(**)
100	LwK 5.1	5,30	0,010	0,04	0,09	
106	LwK 5.1	5,20	-0,090	-0,39	-0,84	

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

**5.9.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,12	-0,180	-0,77	-1,24	
202	LwK 5.3	5,17	-0,130	-0,56	-0,90	
203	LwK 5.3	5,05	-0,250	-1,07	-1,72	
204	LwK 5.3	5,34	0,040	0,17	0,28	
205	LwK 5.3	4,92	-0,380	-1,63	-2,62	
206	LwK 5.3	5,27	-0,030	-0,13	-0,21	
207	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
208	LwK 5.3	5,19	-0,110	-0,47	-0,76	
210	LwK 5.3	4,87	-0,430	-1,84	-2,97	
211	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
212	LwK 5.3	5,18	-0,120	-0,51	-0,83	
214	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
215	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
216	LwK 5.3	5,61	0,310	1,33	2,14	
217	LwK 5.3	5,05	-0,250	-1,07	-1,72	
218	LwK 5.3	5,18	-0,120	-0,51	-0,83	
219	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
220	LwK 5.3	5,11	-0,190	-0,81	-1,31	
221	LwK 5.3	4,93	-0,370	-1,59	-2,55	
223	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
224	LwK 5.3	5,25	-0,050	-0,21	-0,34	
225	LwK 5.3	5,27	-0,030	-0,13	-0,21	
226	LwK 5.3	4,94	-0,360	-1,54	-2,48	
227	LwK 5.3	5,26	-0,040	-0,17	-0,28	
228	LwK 5.3	5,34	0,040	0,17	0,28	
229	LwK 5.3	5,15	-0,150	-0,64	-1,03	
231	LwK 5.3	5,04	-0,260	-1,11	-1,79	
232	LwK 5.3	5,27	-0,030	-0,13	-0,21	
234	LwK 5.3	5,03	-0,270	-1,16	-1,86	
235	LwK 5.3	5,00	-0,300	-1,29	-2,07	
236	LwK 5.3	5,10	-0,200	-0,86	-1,38	
237	LwK 5.3	5,12	-0,180	-0,77	-1,24	
240	LwK 5.3	5,29	-0,010	-0,04	-0,07	
241	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
242	LwK 5.3	5,15	-0,150	-0,64	-1,03	
243	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
244	LwK 5.3	5,19	-0,110	-0,47	-0,76	
245	LwK 5.3	5,17	-0,130	-0,56	-0,90	
246	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
247	LwK 5.3	5,11	-0,190	-0,81	-1,31	
248	LwK 5.3	5,44	0,140	0,60	0,97	
249	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
250	LwK 5.3	5,24	-0,060	-0,26	-0,41	
251	LwK 5.3	5,22	-0,080	-0,34	-0,55	
252	LwK 5.3	5,26	-0,040	-0,17	-0,28	
254	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
255	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
256	LwK 5.3	5,42	0,120	0,51	0,83	
257	LwK 5.3	5,44	0,140	0,60	0,97	
258	LwK 5.3	5,46	0,160	0,69	1,10	
259	LwK 5.3	4,70	-0,600	-2,57	-4,14	
260	LwK 5.3	4,90	-0,400	-1,71	-2,76	
261	LwK 5.3	5,40	0,100	0,43	0,69	
262	LwK 5.3	4,90	-0,400	-1,71	-2,76	
263	LwK 5.3	5,13	-0,170	-0,73	-1,17	
264	LwK 5.3	5,05	-0,250	-1,07	-1,72	
265	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
266	LwK 5.3	4,95	-0,350	-1,50	-2,41	
267	LwK 5.3	5,00	-0,300	-1,29	-2,07	
268	LwK 5.3	5,18	-0,120	-0,51	-0,83	
269	LwK 5.3	5,02	-0,280	-1,20	-1,93	
270	LwK 5.3	4,94	-0,360	-1,54	-2,48	
271	LwK 5.3	5,02	-0,280	-1,20	-1,93	
272	LwK 5.3	4,98	-0,320	-1,37	-2,21	
273	LwK 5.3	4,88	-0,420	-1,80	-2,90	
275	LwK 5.3	5,17	-0,130	-0,56	-0,90	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

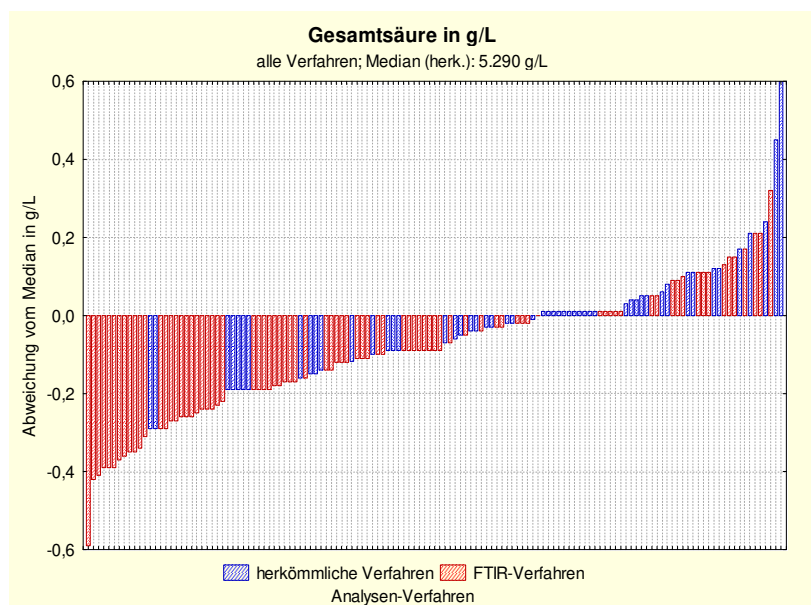
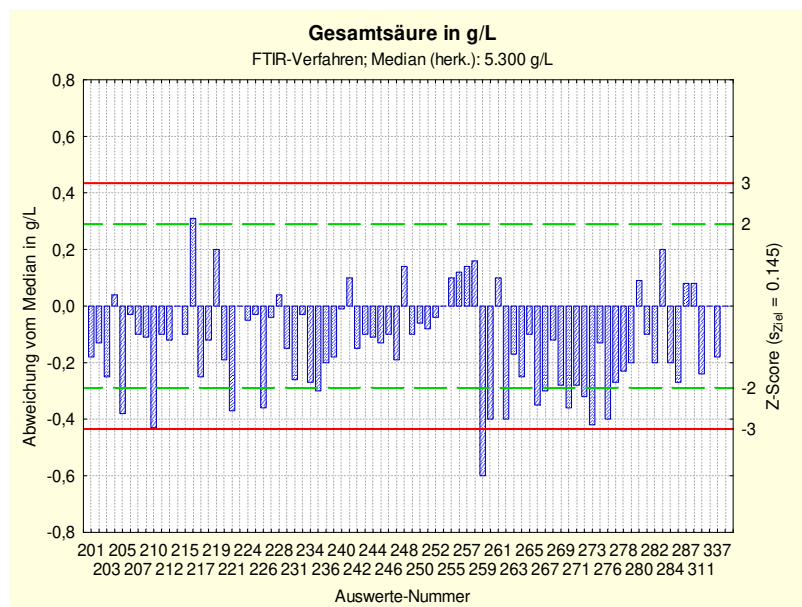
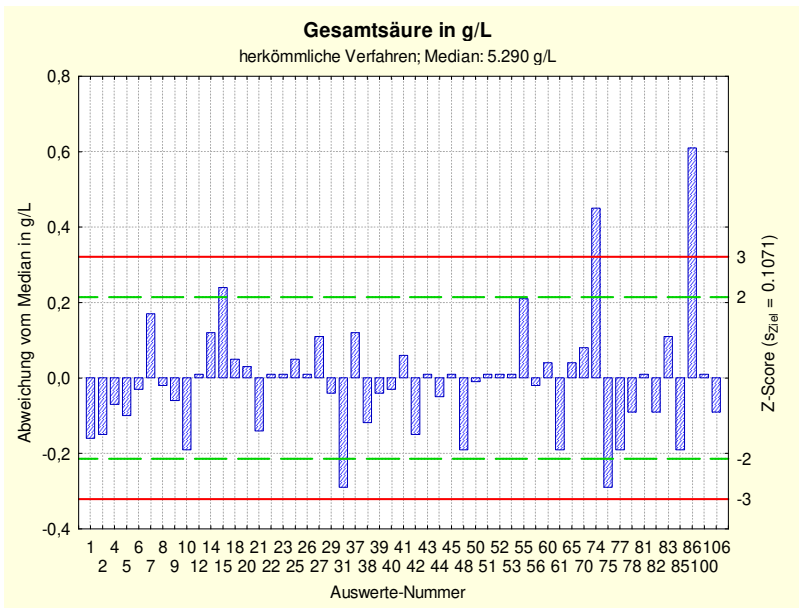
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 5.3	4,90	-0,400	-1,71	-2,76	
277	LwK 5.3	5,03	-0,270	-1,16	-1,86	
278	LwK 5.3	5,07	-0,230	-0,99	-1,59	
279	LwK 5.3	5,10	-0,200	-0,86	-1,38	
280	LwK 5.3	5,39	0,090	0,39	0,62	
281	LwK 5.3	5,20	-0,100	-0,43	-0,69	
282	LwK 5.3	5,10	-0,200	-0,86	-1,38	
283	LwK 5.3	5,50	0,200	0,86	1,38	
284	LwK 5.3	5,10	-0,200	-0,86	-1,38	
285	LwK 5.3	5,03	-0,270	-1,16	-1,86	
287	LwK 5.3	5,38	0,080	0,34	0,55	
288	LwK 5.3	5,38	0,080	0,34	0,55	
311	LwK 5.3	5,06	-0,240	-1,03	-1,66	
320	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	
337	LwK 5.3	5,12	-0,180	-0,77	-1,24	
365	LwK 5.3	5,30	0,000	0,00	0,00	

**5.9.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	53	52
Minimalwert	5,00	5,00
Mittelwert	5,283	5,271
Median	5,300	5,290
Maximalwert	5,90	5,74
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,157	0,132
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,022	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,233	0,233
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,145	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,67	0,57
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,46	1,23
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,08	0,91
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,09	0,08
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,20	0,17
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,15	0,12

**5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	33	5,261	0,128
	OIV-MA-AS-313-01;	17	5,291	0,108
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung			
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	3	5,233	0,173
	herkömmliche Verfahren	53	5,271	0,118
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	5,169	0,180



## 5.10 Weinsäure [g/L]

### 5.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: alle herkömmlichen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,91	-0,220	-2,05	
02	HPLC	1,95	-0,180	-1,67	
04	photometr.	2,15	0,020	0,19	
05	HPLC	2,06	-0,070	-0,65	
07	HPLC	2,54	0,410	3,81	
08	HPLC	1,98	-0,150	-1,39	
09	photometr., autom.	1,97	-0,160	-1,49	
10	photometr.	2,13	0,000	0,00	
12	photometr., autom.	2,10	-0,030	-0,28	
15	photometr., autom.	2,30	0,170	1,58	
18	IC	2,13	0,000	0,00	
20	HPLC	1,98	-0,150	-1,39	
21	HPLC	0,89	-1,240	-11,53	(*)
22	HPLC	2,15	0,022	0,20	
26	HPLC	2,18	0,050	0,46	
29	photometr., autom.	2,15	0,020	0,19	
31	photometr., autom.	2,03	-0,100	-0,93	
38	photometr., autom.	2,23	0,100	0,93	
39	HPLC	1,87	-0,261	-2,43	
40	photometr., autom.	2,20	0,070	0,65	
41	photometr., autom.	2,09	-0,040	-0,37	
45	photometr., autom.	2,41	0,280	2,60	
48	photometr., autom.	2,13	0,000	0,00	
50	photometr., autom.	2,24	0,110	1,02	
53	photometr., autom.	2,20	0,070	0,65	
56	photometr., autom.	2,16	0,030	0,28	
61	photometr., autom.	2,10	-0,030	-0,28	
81	HPLC	1,90	-0,230	-2,14	
82	photometr.	2,23	0,096	0,89	
92	HPLC	1,93	-0,200	-1,86	
95	photometr., autom.	1,97	-0,160	-1,49	
100	HPLC	2,30	0,170	1,58	
111	NMR	1,79	-0,343	-3,19	
112	NMR	1,83	-0,296	-2,75	
113	NMR	1,88	-0,251	-2,33	
114	NMR	<0.5			
115	NMR	1,94	-0,190	-1,77	
116	NMR	1,91	-0,221	-2,05	

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

### 5.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,77	-0,360	-3,35	-1,59	
202	FTIR	1,84	-0,290	-2,70	-1,28	
203	FTIR	1,85	-0,280	-2,60	-1,23	
204	FTIR	2,09	-0,040	-0,37	-0,18	
205	FTIR	1,93	-0,200	-1,86	-0,88	
207	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
208	FTIR	1,99	-0,140	-1,30	-0,62	
210	FTIR	1,92	-0,210	-1,95	-0,93	
211	FTIR	2,01	-0,120	-1,12	-0,53	
212	FTIR	2,01	-0,120	-1,12	-0,53	
214	FTIR	1,60	-0,530	-4,93	-2,33	
215	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
216	FTIR	1,50	-0,630	-5,86	-2,78	
217	FTIR	1,91	-0,220	-2,05	-0,97	
218	FTIR	1,81	-0,320	-2,98	-1,41	
219	FTIR	2,00	-0,130	-1,21	-0,57	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	1,67	-0,460	-4,28	-2,03	
221	FTIR	1,39	-0,740	-6,88	-3,26	
222	FTIR	2,07	-0,060	-0,56	-0,26	
223	FTIR	1,70	-0,430	-4,00	-1,89	
224	FTIR	2,12	-0,010	-0,09	-0,04	
226	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
227	FTIR	1,83	-0,300	-2,79	-1,32	
228	FTIR	2,19	0,060	0,56	0,26	
229	FTIR	1,96	-0,170	-1,58	-0,75	
231	FTIR	2,03	-0,100	-0,93	-0,44	
232	FTIR	1,75	-0,380	-3,53	-1,67	
234	FTIR	1,91	-0,220	-2,05	-0,97	
235	FTIR	2,00	-0,130	-1,21	-0,57	
236	FTIR	1,70	-0,430	-4,00	-1,89	
237	FTIR	1,82	-0,310	-2,88	-1,37	
240	FTIR	1,77	-0,360	-3,35	-1,59	
241	FTIR	2,08	-0,050	-0,46	-0,22	
242	FTIR	2,95	0,820	7,63	3,61	
243	FTIR	1,40	-0,730	-6,79	-3,22	
244	FTIR	2,07	-0,060	-0,56	-0,26	
245	FTIR	1,98	-0,150	-1,39	-0,66	
247	FTIR	1,61	-0,520	-4,84	-2,29	
249	FTIR	2,20	0,070	0,65	0,31	
250	FTIR	1,74	-0,390	-3,63	-1,72	
252	FTIR	2,05	-0,080	-0,74	-0,35	
254	FTIR	1,70	-0,430	-4,00	-1,89	
256	FTIR	2,47	0,340	3,16	1,50	
257	FTIR	1,67	-0,460	-4,28	-2,03	
258	FTIR	2,09	-0,040	-0,37	-0,18	
259	FTIR	2,40	0,270	2,51	1,19	
260	FTIR	2,00	-0,130	-1,21	-0,57	
261	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
262	FTIR	1,80	-0,330	-3,07	-1,45	
265	FTIR	0,70	-1,430	-13,30	-6,30	(*)
266	FTIR	1,80	-0,330	-3,07	-1,45	
267	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
268	FTIR	1,99	-0,140	-1,30	-0,62	
269	FTIR	1,77	-0,360	-3,35	-1,59	
270	FTIR	2,04	-0,090	-0,84	-0,40	
271	FTIR	1,68	-0,450	-4,18	-1,98	
272	FTIR	1,84	-0,290	-2,70	-1,28	
273	FTIR	1,72	-0,410	-3,81	-1,81	
275	FTIR	1,66	-0,470	-4,37	-2,07	
276	FTIR	1,60	-0,530	-4,93	-2,33	
277	FTIR	1,86	-0,270	-2,51	-1,19	
278	FTIR	1,73	-0,400	-3,72	-1,76	
279	FTIR	1,80	-0,330	-3,07	-1,45	
280	FTIR	1,85	-0,280	-2,60	-1,23	
281	FTIR	2,08	-0,050	-0,46	-0,22	
282	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
284	FTIR	1,90	-0,230	-2,14	-1,01	
285	FTIR	1,88	-0,250	-2,32	-1,10	
287	FTIR	1,64	-0,490	-4,56	-2,16	
288	FTIR	1,45	-0,680	-6,32	-3,00	
320	FTIR	2,30	0,170	1,58	0,75	
337	FTIR	1,42	-0,710	-6,60	-3,13	
365	FTIR	0,80	-1,330	-12,37	-5,86	(*)

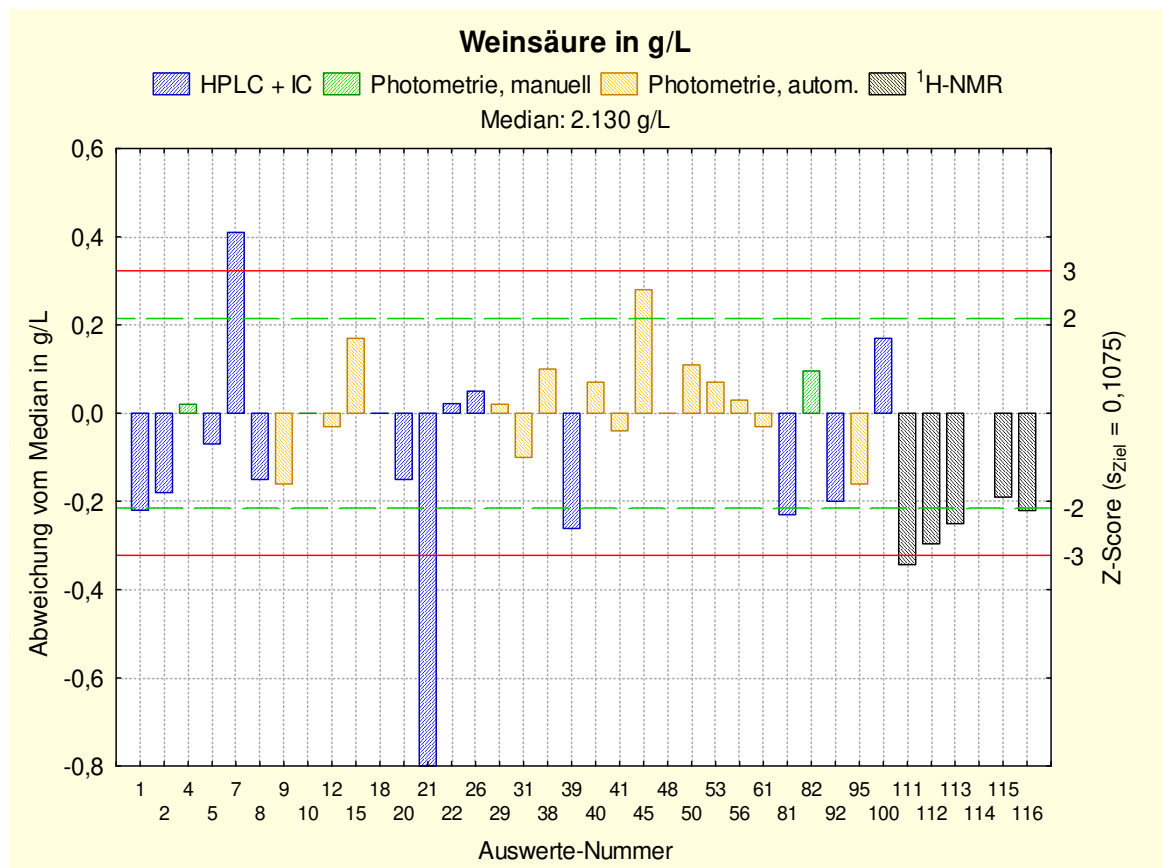
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

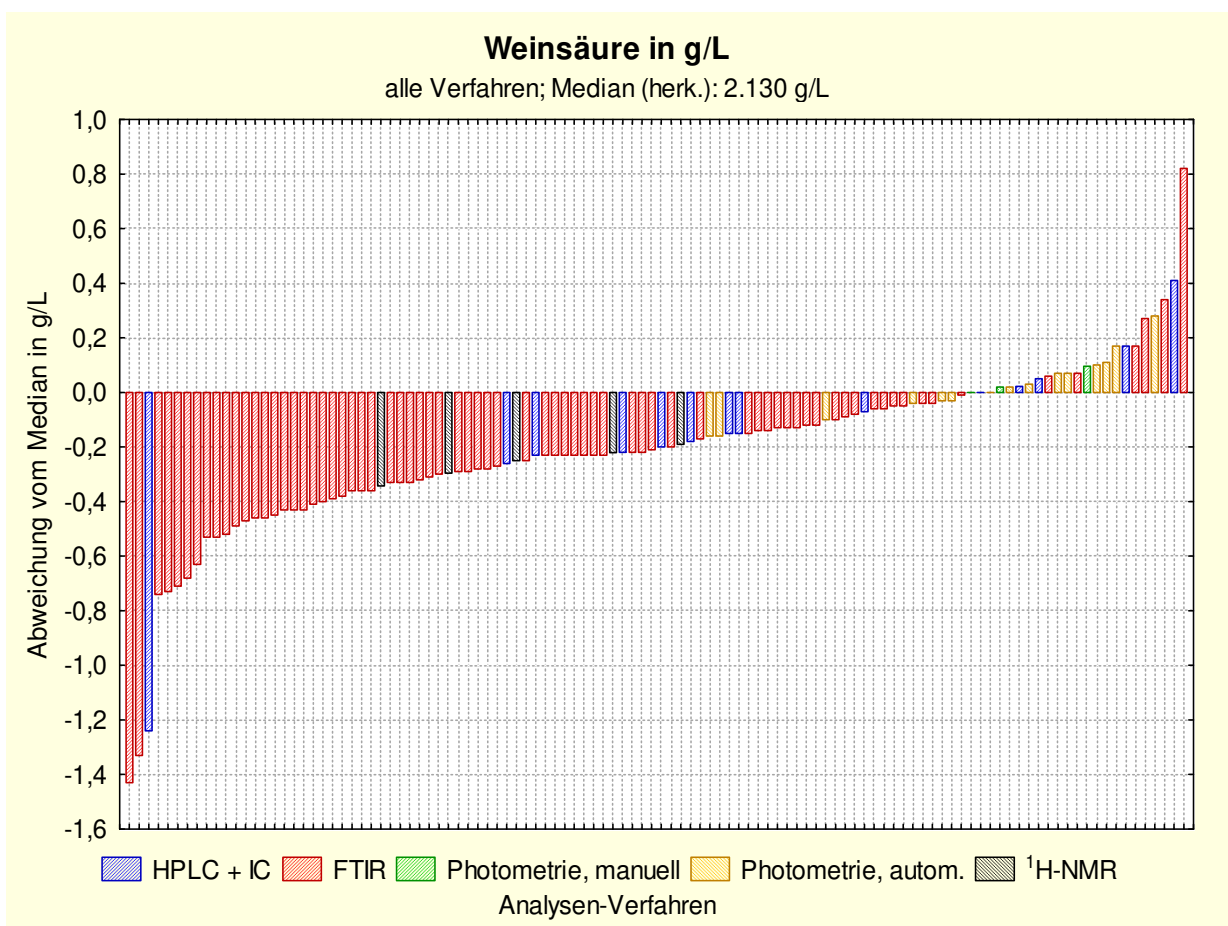
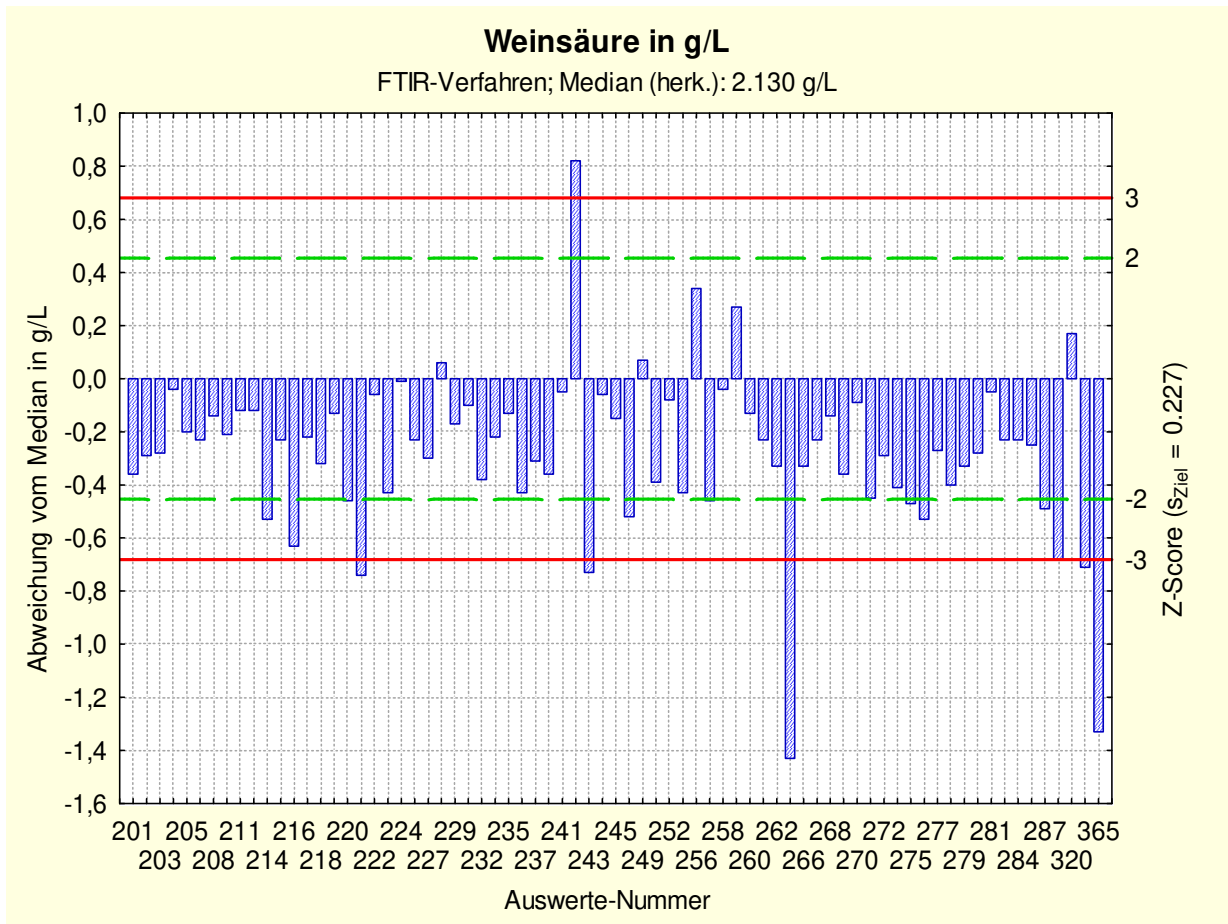
**5.10.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC		Photometrie	herk. Verf.
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	13	12	18	31
Minimalwert	1,87	1,87	1,97	1,87
Mittelwert	2,068	2,028	2,155	2,118
Median	1,980	1,980	2,150	2,130
Maximalwert	2,54	2,30	2,41	2,54
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,192	0,135	0,109	0,153
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,053	0,039	0,026	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,101	0,101	0,108	0,108
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )				
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,227	0,227	0,227	0,227
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,90	1,33	1,01	1,42
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )				
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,85	0,59	0,48	0,67
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,53	0,38	0,24	0,26
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )				
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,23	0,17	0,11	0,12

**5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	13	2,017	0,192
IC	Ionenchromatographie	1	2,130	
	HPLC + Ionenchromatographie	14	2,028	0,188
photometr.	photometrisch nach Rebelein	3	2,165	0,050
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	15	2,146	0,118
	photometrische Verfahren	18	2,152	0,104
	alle herkömmlichen Verfahren	32	2,102	0,156
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	1,863	0,213
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,870	0,069







## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO<sub>2</sub>-Einfluss und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,860	0,0750	1,63	
04	OIV SO2-korr.	0,870	0,0850	1,85	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,750	-0,0350	-0,76	
07	OIV o. SO2-korr.	0,830	0,0450	0,98	
08	OIV SO2-korr.	0,785	0,0000	0,00	
09	OIV SO2-korr.	0,785	0,0000	0,00	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,850	0,0650	1,41	
18	IC	0,910	0,1250	2,71	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,800	0,0150	0,33	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,780	-0,0050	-0,11	
27	Halbmikro SO2 unber.	0,835	0,0500	1,09	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,760	-0,0250	-0,54	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,908	0,1230	2,67	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,739	-0,0460	-1,00	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,785	0,0000	0,00	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,810	0,0250	0,54	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,813	0,0280	0,61	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,760	-0,0250	-0,54	
43	Gerhardt SO2 korr.	0,700	-0,0850	-1,85	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,830	0,0450	0,98	
45	Gerhardt SO2 korr.	0,604	-0,1811	-3,93	
53	Gerhardt SO2 korr.	0,950	0,1650	3,58	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,870	0,0850	1,85	
56	Rentschler mod. ausg.	0,795	0,0100	0,22	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,644	-0,1410	-3,06	
65	Halbmikro SO2 unber.	1,000	0,2150	4,67	
67	Wädenswil SO2 korr.	0,787	0,0020	0,04	
69	Wädenswil SO2 unber.	0,800	0,0150	0,33	
70	Gerhardt SO2 korr.	1,020	0,2350	5,10	(**)
74	Wädensw. SO2 ausg.	0,630	-0,1550	-3,37	
83	Halbmikro SO2 unber.	0,780	-0,0050	-0,11	
86	Wasserdampfdest.	0,950	0,1650	3,58	
92	OIV SO2-korr.	0,831	0,0460	1,00	
98	Halbmikro SO2 ausg.	0,798	0,0130	0,28	
100	Gerhardt SO2 korr.	0,760	-0,0250	-0,54	
106	Halbmikro SO2 unber.	1,050	0,2650	5,75	(***)

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

(\*\*\*) 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	0,680	-0,1060	-2,30	-1,19	
202	FTIR	0,770	-0,0160	-0,35	-0,18	
204	FTIR	0,830	0,0440	0,95	0,49	
205	FTIR	0,830	0,0440	0,95	0,49	
207	FTIR	0,600	-0,1860	-4,03	-2,09	
208	FTIR	0,771	-0,0150	-0,33	-0,17	
210	FTIR	0,750	-0,0360	-0,78	-0,40	
212	FTIR	0,690	-0,0960	-2,08	-1,08	
214	FTIR	0,680	-0,1060	-2,30	-1,19	
215	FTIR	0,490	-0,2960	-6,42	-3,32	
216	FTIR	0,540	-0,2460	-5,34	-2,76	
217	FTIR	0,620	-0,1660	-3,60	-1,86	
218	FTIR	0,610	-0,1760	-3,82	-1,98	
219	FTIR	0,620	-0,1660	-3,60	-1,86	
220	FTIR	0,610	-0,1760	-3,82	-1,98	
221	FTIR	0,790	0,0040	0,09	0,04	
223	FTIR	0,690	-0,0960	-2,08	-1,08	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

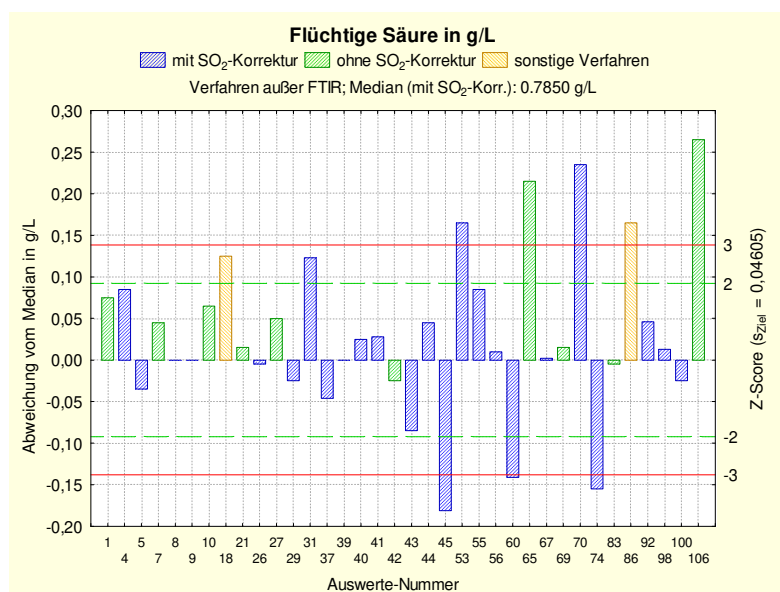
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	FTIR	0,660	-0,1260	-2,73	-1,41	
225	FTIR	0,660	-0,1260	-2,73	-1,41	
226	FTIR	0,740	-0,0460	-1,00	-0,52	
227	FTIR	0,780	-0,0060	-0,13	-0,07	
228	FTIR	0,650	-0,1360	-2,95	-1,53	
229	FTIR	0,844	0,0580	1,26	0,65	
231	FTIR	0,770	-0,0160	-0,35	-0,18	
232	FTIR	0,800	0,0140	0,30	0,16	
234	FTIR	0,570	-0,2160	-4,69	-2,42	
235	FTIR	0,540	-0,2460	-5,34	-2,76	
236	FTIR	0,670	-0,1160	-2,52	-1,30	
237	FTIR	0,750	-0,0360	-0,78	-0,40	
240	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
241	FTIR	0,890	0,1040	2,26	1,17	
242	FTIR	0,820	0,0340	0,74	0,38	
243	FTIR	0,920	0,1340	2,91	1,50	
244	FTIR	0,680	-0,1060	-2,30	-1,19	
245	FTIR	0,910	0,1240	2,69	1,39	
246	FTIR	0,710	-0,0760	-1,65	-0,85	
247	FTIR	0,930	0,1440	3,12	1,62	
249	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
250	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
251	FTIR	0,810	0,0240	0,52	0,27	
252	FTIR	0,800	0,0140	0,30	0,16	
254	FTIR	0,660	-0,1260	-2,73	-1,41	
255	FTIR	0,670	-0,1160	-2,52	-1,30	
256	FTIR	0,780	-0,0060	-0,13	-0,07	
257	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
258	FTIR	0,550	-0,2360	-5,12	-2,65	
260	FTIR	0,620	-0,1660	-3,60	-1,86	
261	FTIR	0,740	-0,0460	-1,00	-0,52	
262	FTIR	0,480	-0,3060	-6,64	-3,43	
264	FTIR	0,820	0,0340	0,74	0,38	
265	FTIR	0,620	-0,1660	-3,60	-1,86	
266	FTIR	0,830	0,0440	0,95	0,49	
267	FTIR	0,760	-0,0260	-0,56	-0,29	
268	FTIR	0,640	-0,1460	-3,17	-1,64	
269	FTIR	0,790	0,0040	0,09	0,04	
270	FTIR	0,830	0,0440	0,95	0,49	
271	FTIR	0,650	-0,1360	-2,95	-1,53	
272	FTIR	0,580	-0,2060	-4,47	-2,31	
273	FTIR	0,580	-0,2060	-4,47	-2,31	
275	FTIR	0,970	0,1840	3,99	2,07	
276	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
277	FTIR	0,530	-0,2560	-5,55	-2,87	
278	FTIR	0,720	-0,0660	-1,43	-0,74	
279	FTIR	0,420	-0,3660	-7,94	-4,11	
280	FTIR	0,730	-0,0560	-1,21	-0,63	
281	FTIR	0,660	-0,1260	-2,73	-1,41	
282	FTIR	0,790	0,0040	0,09	0,04	
283	FTIR	0,710	-0,0760	-1,65	-0,85	
284	FTIR	0,840	0,0540	1,17	0,61	
285	FTIR	0,640	-0,1460	-3,17	-1,64	
287	FTIR	0,950	0,1640	3,56	1,84	
288	FTIR	0,830	0,0440	0,95	0,49	
320	FTIR	0,680	-0,1060	-2,30	-1,19	
337	FTIR	0,730	-0,0560	-1,21	-0,63	
365	FTIR	0,660	-0,1260	-2,73	-1,41	

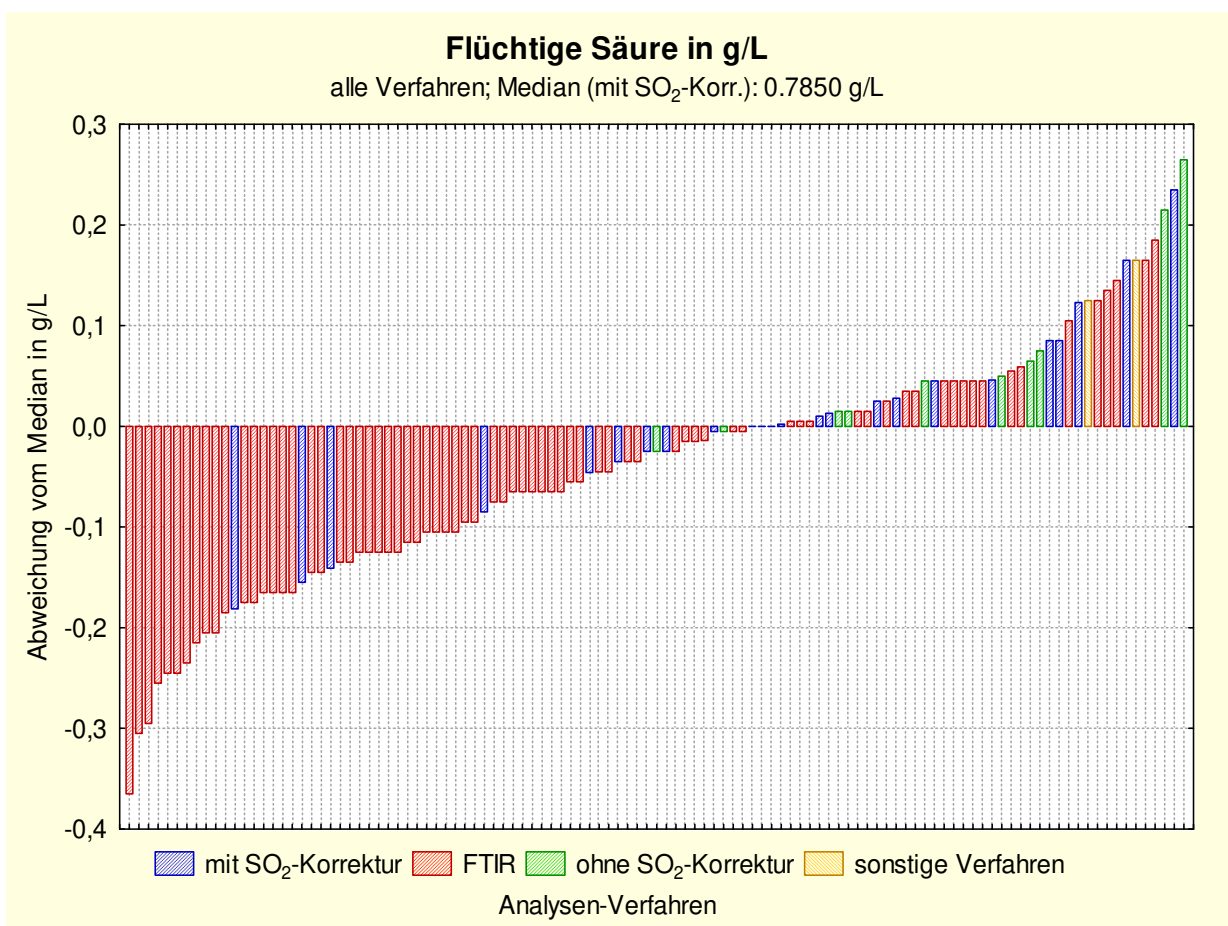
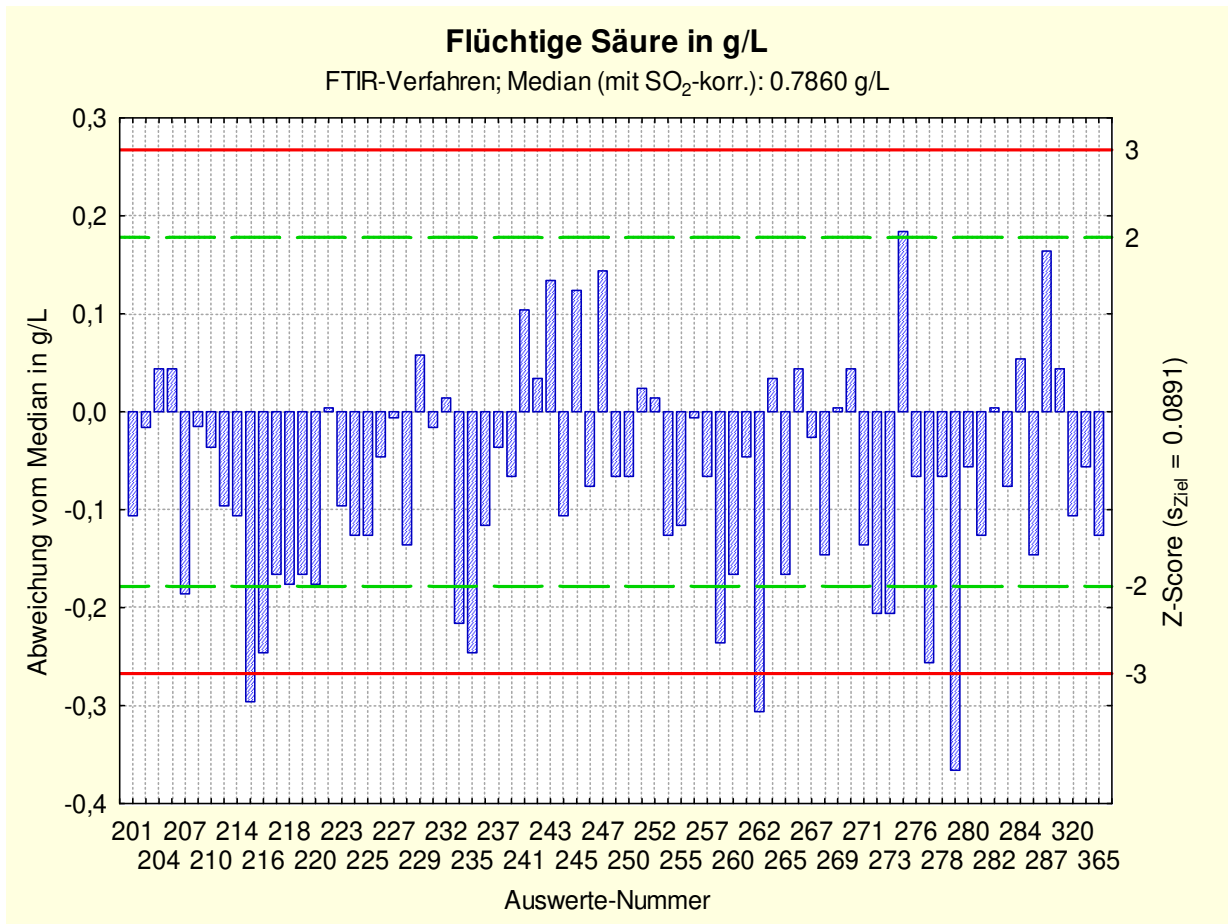
5.11.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder SO <sub>2</sub> -Ausschluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	23
Minimalwert	0,604	0,604
Mittelwert	0,7918	0,7819
Median	0,7860	0,7850
Maximalwert	1,020	0,950
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,094	0,083
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,019	0,017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,046	0,046
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)	(0,029)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,05	1,80
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	(3,24)	(2,86)
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	1,06	0,93
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,42	0,38
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	(0,65)	(0,59)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,22	0,19

5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	8	0,8645	0,1131
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,7980	
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,8235	0,1355
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,8000	
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,6300	
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,7155	0,1147
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	2	0,7965	0,0265
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	11	0,8013	0,1149
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO2-korr.	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	4	0,8150	0,0414
ohne SO2-korr.	ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,8300	
Rentschler mod	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,7950	
Wasserdampfdest.	Wasserdampfdestillation (ohne nähere Angaben)	1	0,9500	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	24	0,7912	0,0821
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,7138	0,1122
IC	Ionenchromatographie (fehlerhaft zugeordnet)	1	0,9100	





## 5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,750	-0,070	-1,46	
10	enzymat. autom.	0,840	0,020	0,42	
12	enzymat. autom.	0,830	0,010	0,21	
14	enzymat. autom.	0,880	0,060	1,26	
15	enzymat. autom.	0,720	-0,100	-2,09	
29	enzymat. autom.	0,790	-0,030	-0,63	
38	enzymat. autom.	0,808	-0,012	-0,25	
41	enzymat. autom.	0,740	-0,080	-1,67	
42	enzymat. autom.	0,800	-0,020	-0,42	
44	enzymat. autom.	0,890	0,070	1,46	
45	enzymat. autom.	0,830	0,010	0,21	
48	enzymat. autom.	0,820	0,000	0,00	
50	enzymat. autom.	0,837	0,017	0,36	
53	enzymat. autom.	0,960	0,140	2,93	
56	enzymat. autom.	0,785	-0,035	-0,73	(*)
61	enzymat. autom.	0,820	0,000	0,00	
70	enzymat. autom.	0,770	-0,050	-1,05	
92	enzymat. autom.	0,800	-0,020	-0,42	
95	enzymat. autom.	0,830	0,010	0,21	

(\*\*) Dieser Wert bleibt wegen abweichenden Verfahrens bei den Berechnungen unberücksichtigt.

### 5.12.2 Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: HPLC, enzymatisch, manuell, <sup>1</sup>H-Kernresonanzspektroskopie

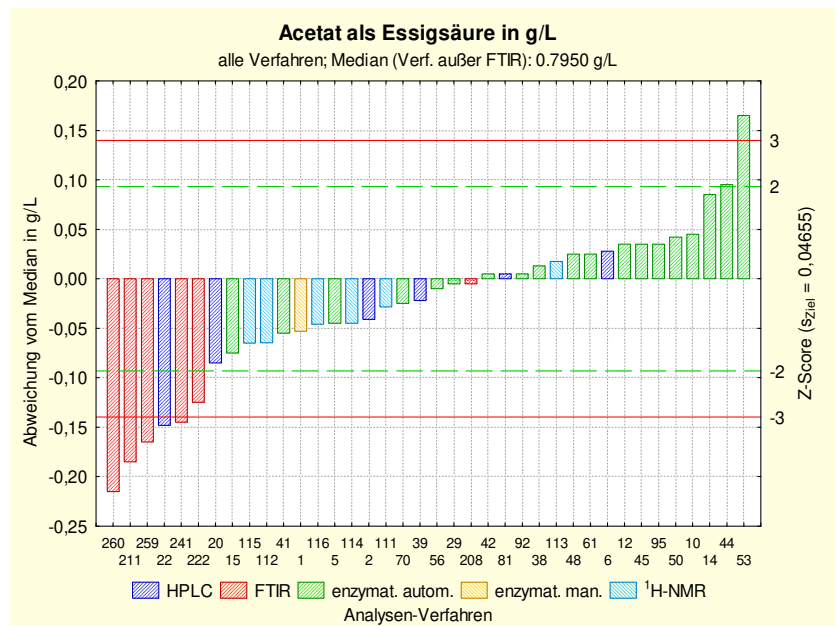
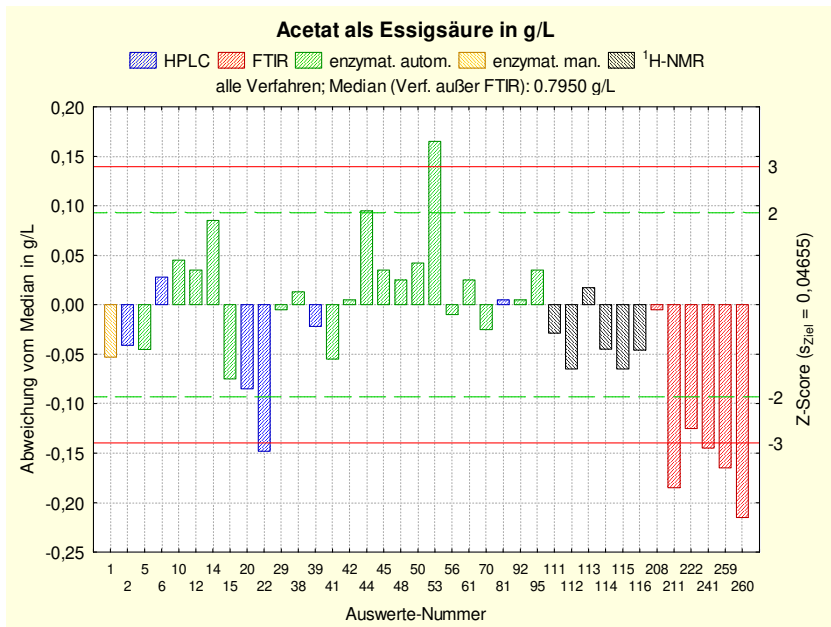
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,742	-0,008	-0,18	
02	HPLC	0,754	0,004	0,09	
06	HPLC	0,823	0,073	1,65	
20	HPLC	0,710	-0,040	-0,90	
22	HPLC	0,647	-0,103	-2,33	
39	HPLC	0,773	0,023	0,52	
81	HPLC	0,800	0,050	1,13	
111	NMR	0,767	0,016	0,37	
112	NMR	0,730	-0,020	-0,45	
113	NMR	0,812	0,062	1,41	
114	NMR	0,750	0,000	0,00	
115	NMR	0,730	-0,020	-0,45	
116	NMR	0,749	-0,001	-0,02	
208	FTIR	0,790	0,040	0,90	
211	FTIR	0,610	-0,140	-3,16	
222	FTIR	0,670	-0,080	-1,81	
241	FTIR	0,650	-0,100	-2,26	
259	FTIR	0,630	-0,120	-2,71	
260	FTIR	0,580	-0,170	-3,84	

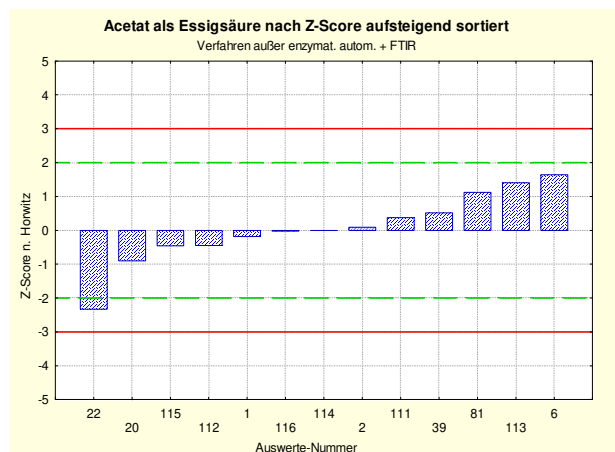
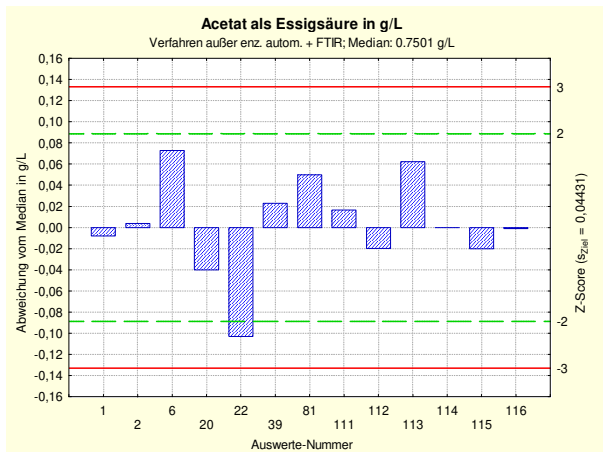
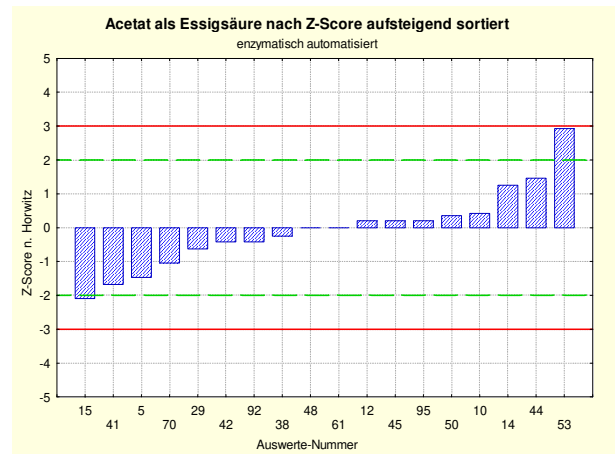
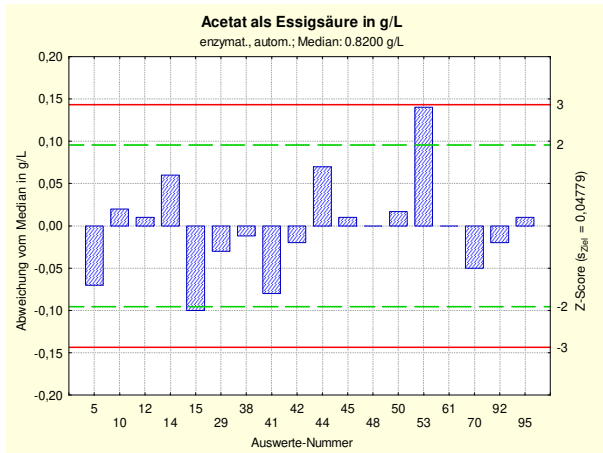
### 5.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	19	0,8134	0,0504
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	0,7523	0,0703
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,7420	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	6	0,7537	0,0282
	HPLC, enzymat. manuell + <sup>1</sup> H-NMR	13	0,7556	0,0425
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,6472	0,0639

5.12.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	Verfahren ohne FTIR alle Daten	enzymatisch, automat. ber. Daten	HPLC, enz.man., <sup>1</sup> H-NMR alle Daten
Gültige Werte	32	18	13
Minimalwert	0,647	0,720	0,647
Mittelwert	0,790	0,818	0,753
Median	0,795	0,820	0,750
Maximalwert	0,960	0,960	0,823
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,060	0,057	0,046
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,011	0,013	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,047	0,048	0,044
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )			
Zielstandardabweichung, experimentell (S <sub>Ü FTIR</sub> )			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,29	1,19	1,04
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (s <sub>L</sub> /S <sub>Ü FTIR</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,23	0,28	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /S <sub>Ü FTIR</sub> )			





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

#### 5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,921	0,000	0,00	0,00	
02	HPLC	0,905	-0,016	-0,30	-0,39	
05	HPLC	0,970	0,049	0,93	1,19	
07	HPLC	0,860	-0,061	-1,16	-1,48	
08	HPLC	0,840	-0,081	-1,54	-1,96	
18	IC	1,330	0,409	7,75	9,90	(**)
20	HPLC	0,960	0,039	0,74	0,94	
21	HPLC	0,890	-0,031	-0,59	-0,75	
22	HPLC	0,940	0,019	0,36	0,46	
26	HPLC	1,100	0,179	3,39	4,33	
39	HPLC	0,870	-0,051	-0,97	-1,24	
81	HPLC	0,800	-0,121	-2,29	-2,93	
92	HPLC	0,977	0,056	1,06	1,36	
100	HPLC	1,000	0,079	1,50	1,91	
111	NMR	0,891	-0,030	-0,56	-0,72	
112	NMR	0,913	-0,008	-0,16	-0,20	
113	NMR	0,925	0,004	0,07	0,09	
114	NMR	<0,2				
115	NMR	0,900	-0,021	-0,40	-0,51	
116	NMR	0,937	0,016	0,31	0,39	

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

#### 5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,900	-0,030	-0,56	-0,72	
04	enz.(L-), autom.	0,940	0,010	0,19	0,24	
05	enz.(L-), autom.	0,928	-0,002	-0,04	-0,05	
09	enz.(L-), autom.	0,869	-0,061	-1,15	-1,47	
10	enz.(L-), autom.	1,790	0,860	16,17	20,71	(*)
12	enz.(L-), autom.	0,900	-0,030	-0,56	-0,72	
14	enz.(L-), autom.	0,980	0,050	0,94	1,20	
15	enz.(L-), autom.	0,900	-0,030	-0,56	-0,72	
29	enz.(L-), autom.	0,913	-0,017	-0,32	-0,41	
31	enz.(L-), autom.	0,960	0,030	0,56	0,72	
38	enz.(L-), autom.	1,000	0,070	1,32	1,69	
40	enz.(L-), autom.	0,930	0,000	0,00	0,00	
41	enz.(L-), autom.	1,040	0,110	2,07	2,65	
42	enz.(L-), autom.	0,930	0,000	0,00	0,00	
44	enz.(L-), autom.	0,940	0,010	0,19	0,24	
45	enz.(L-), autom.	1,120	0,190	3,57	4,58	
48	enz.(L-), autom.	0,939	0,009	0,17	0,22	
50	enz.(L-), autom.	0,940	0,010	0,19	0,24	
53	enz.(L-), autom.	0,930	0,000	0,00	0,00	
55	enz.(L-), autom.	0,870	-0,060	-1,13	-1,45	
56	enz.(L-), autom.	0,940	0,010	0,19	0,24	
61	enz.(L-), autom.	1,100	0,170	3,20	4,09	
65	enz.(L-) Hand	0,867	-0,063	-1,18	-1,52	
70	enz.(L-), autom.	0,937	0,007	0,12	0,16	
82	enz.(L-) Hand	0,890	-0,040	-0,75	-0,96	
92	enz.(L-), autom.	0,890	-0,040	-0,75	-0,96	
95	enz.(L-), autom.	0,935	0,005	0,09	0,12	
106	enz.(L-) Hand	0,840	-0,090	-1,69	-2,17	

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



**5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,410	0,479	9,01	2,20	
202	FTIR	0,624	-0,306	-5,76	-1,41	
203	FTIR	0,860	-0,071	-1,32	-0,32	
204	FTIR	1,010	0,080	1,49	0,36	
205	FTIR	0,720	-0,211	-3,96	-0,97	
207	FTIR	0,600	-0,331	-6,21	-1,52	
208	FTIR	0,870	-0,060	-1,14	-0,28	
210	FTIR	1,070	0,140	2,62	0,64	
211	FTIR	1,320	0,390	7,32	1,79	
212	FTIR	0,620	-0,311	-5,84	-1,42	
214	FTIR	1,600	0,670	12,58	3,07	
215	FTIR	1,100	0,170	3,19	0,78	
216	FTIR	1,720	0,789	14,84	3,62	
217	FTIR	1,330	0,400	7,51	1,83	
218	FTIR	1,400	0,469	8,82	2,15	
219	FTIR	1,100	0,170	3,19	0,78	
220	FTIR	1,450	0,519	9,76	2,38	
221	FTIR	0,580	-0,351	-6,59	-1,61	
222	FTIR	0,540	-0,390	-7,34	-1,79	
223	FTIR	1,300	0,370	6,94	1,69	
224	FTIR	0,680	-0,250	-4,71	-1,15	
225	FTIR	0,820	-0,111	-2,08	-0,51	
226	FTIR	0,800	-0,130	-2,45	-0,60	
227	FTIR	1,220	0,289	5,44	1,33	
228	FTIR	1,240	0,310	5,82	1,42	
229	FTIR	1,110	0,180	3,37	0,82	
231	FTIR	0,980	0,049	0,93	0,23	
232	FTIR	1,430	0,499	9,39	2,29	
234	FTIR	1,540	0,610	11,45	2,80	
236	FTIR	0,700	-0,231	-4,33	-1,06	
237	FTIR	1,390	0,459	8,64	2,11	
240	FTIR	1,370	0,440	8,26	2,02	
241	FTIR	0,920	-0,010	-0,20	-0,05	
242	FTIR	0,840	-0,091	-1,70	-0,42	
243	FTIR	1,650	0,719	13,52	3,30	
244	FTIR	0,640	-0,290	-5,46	-1,33	
245	FTIR	0,850	-0,081	-1,51	-0,37	
247	FTIR	1,270	0,340	6,38	1,56	
249	FTIR	0,900	-0,030	-0,57	-0,14	
250	FTIR	0,760	-0,170	-3,20	-0,78	
252	FTIR	0,610	-0,321	-6,02	-1,47	
254	FTIR	1,400	0,469	8,82	2,15	
255	FTIR	1,300	0,370	6,94	1,69	
256	FTIR	0,530	-0,400	-7,53	-1,84	
257	FTIR	0,810	-0,120	-2,26	-0,55	
258	FTIR	1,220	0,289	5,44	1,33	
259	FTIR	1,500	0,570	10,70	2,61	
260	FTIR	0,400	-0,530	-9,97	-2,43	
261	FTIR	1,100	0,170	3,19	0,78	
262	FTIR	1,300	0,370	6,94	1,69	
265	FTIR	1,000	0,070	1,31	0,32	
266	FTIR	1,840	0,910	17,09	4,17	
267	FTIR	1,000	0,070	1,31	0,32	
268	FTIR	1,370	0,440	8,26	2,02	
269	FTIR	1,380	0,449	8,45	2,06	
270	FTIR	0,940	0,009	0,18	0,04	
271	FTIR	1,000	0,070	1,31	0,32	
272	FTIR	1,590	0,660	12,39	3,03	
273	FTIR	1,230	0,299	5,63	1,37	
275	FTIR	1,490	0,560	10,51	2,57	
276	FTIR	1,300	0,370	6,94	1,69	
277	FTIR	1,030	0,100	1,87	0,46	
278	FTIR	<= 0				
279	FTIR	1,300	0,370	6,94	1,69	
280	FTIR	2,010	1,079	20,29	4,95	
281	FTIR	1,200	0,269	5,06	1,24	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

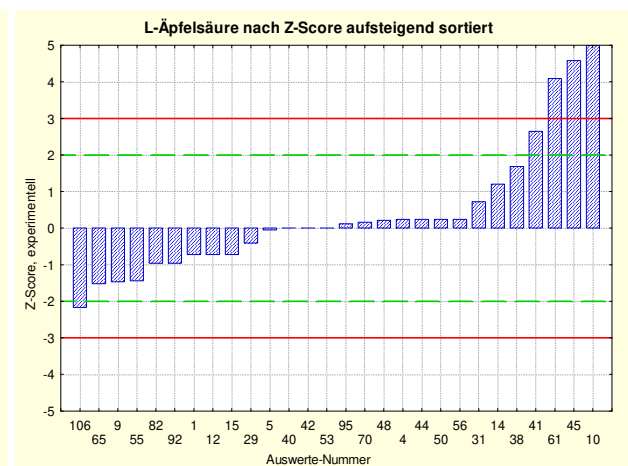
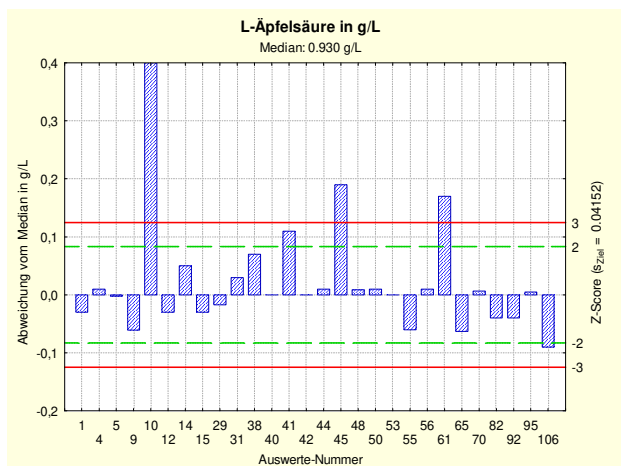
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
282	FTIR	0,700	-0,231	-4,33	-1,06	
284	FTIR	1,600	0,670	12,58	3,07	
285	FTIR	1,370	0,440	8,26	2,02	
287	FTIR	<= 0				
288	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,860	-0,071	-1,32	-0,32	
337	FTIR	0,700	-0,231	-4,33	-1,06	
365	FTIR	0,700	-0,231	-4,33	-1,06	

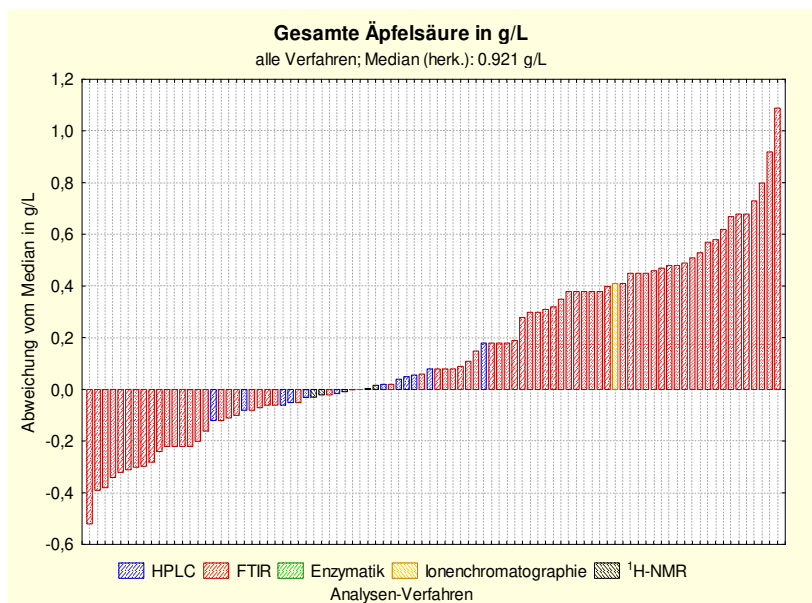
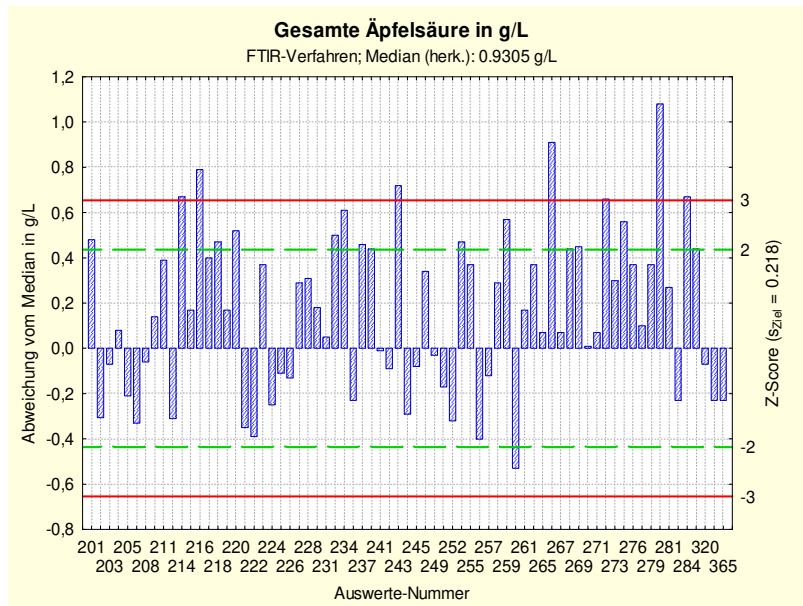
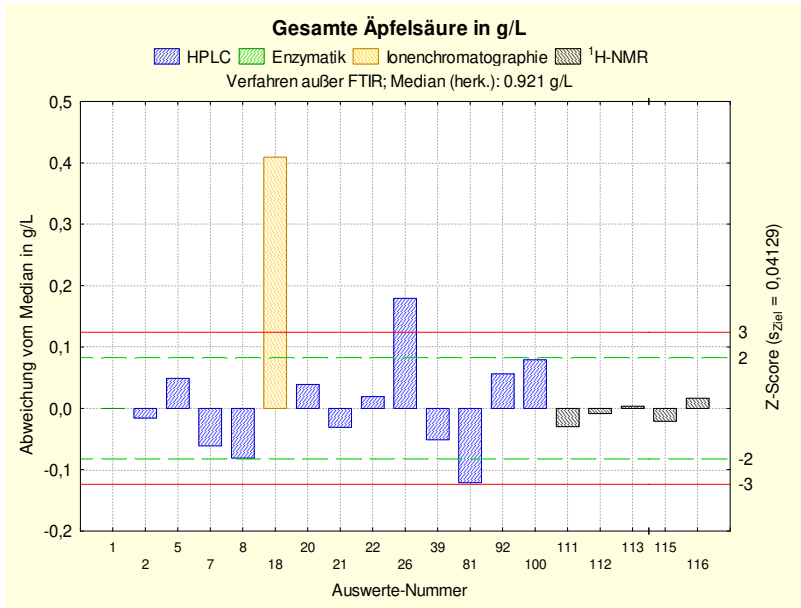
**5.13.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	ber. Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	14	13	27
Minimalwert	0,80	0,80	0,84
Mittelwert	0,955	0,926	0,938
Median	0,930	0,921	0,930
Maximalwert	1,33	1,10	1,12
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,132	0,079	0,065
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,035	0,022	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,053	0,053	0,053
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,042	0,041	0,042
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218	0,218	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,48	1,49	1,22
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	3,17	1,90	1,56
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,60	0,36	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,66	0,41	0,24
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,85	0,53	0,30
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,16	0,10	

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	0,9216	0,0813
IC	Ionenchromatographie	1	1,3300	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	0,9210	
	Gesamte Äpfelsäure: herkömmliche Verfahren	14	0,9341	0,0915
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	1,0940	0,3834
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	0,9132	0,0209
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	24	0,9442	0,0521
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	0,8747	0,0294
	L-Äpfelsäure: alle Verfahren	28	0,9333	0,0532





## 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	1,80	0,024	0,26	
02	HPLC	1,98	0,204	2,21	
04	enzymat. autom.	1,85	0,074	0,80	
05	enzymat. autom.	1,81	0,036	0,39	
07	HPLC	1,74	-0,036	-0,39	
08	HPLC	1,88	0,104	1,13	
09	enzymat. autom.	1,64	-0,136	-1,48	
18	IC	1,80	0,024	0,26	
20	HPLC	1,81	0,034	0,37	
21	HPLC	1,21	-0,566	-6,14	(**)
22	HPLC	1,78	0,000	0,00	
26	HPLC	1,60	-0,176	-1,91	
39	HPLC	1,57	-0,206	-2,24	
65	enzymat. Hand	1,73	-0,041	-0,45	
70	enzymat. autom.	1,74	-0,036	-0,39	
81	HPLC	1,70	-0,076	-0,82	
92	HPLC	2,01	0,231	2,51	
95	enzymat. autom.	1,85	0,074	0,80	
100	HPLC	1,50	-0,276	-3,00	
106	enzymat. Hand	1,66	-0,116	-1,26	
111	NMR	1,67	-0,109	-1,18	
112	NMR	1,55	-0,223	-2,42	
113	NMR	1,70	-0,074	-0,80	
114	NMR	1,69	-0,082	-0,89	
115	NMR	1,89	0,114	1,24	
116	NMR	1,65	-0,127	-1,38	

(\*\*) Dieser Wert bleibt 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	1,337	-0,007	-0,10	-0,09	
04	enz.(L-) autom.	1,36	0,016	0,22	0,21	
05	enz.(L-) autom.	1,35	0,006	0,08	0,08	
09	enz.(L-) autom.	1,27	-0,074	-1,02	-0,95	
10	enz.(L-) autom.	1,33	-0,014	-0,19	-0,18	
12	enz.(L-) autom.	1,40	0,056	0,77	0,72	
14	enz.(L-) autom.	1,34	0,000	0,00	0,00	
15	enz.(L-) autom.	1,40	0,056	0,77	0,72	
29	enz.(L-) autom.	1,56	0,219	3,01	2,82	
31	enz.(L-) autom.	1,43	0,086	1,18	1,11	
38	enz.(L-) autom.	1,38	0,034	0,47	0,44	
40	enz.(L-) autom.	1,19	-0,159	-2,19	-2,05	
41	enz.(L-) autom.	1,27	-0,074	-1,02	-0,95	
42	enz.(L-) autom.	1,43	0,086	1,18	1,11	
44	enz.(L-) autom.	1,33	-0,014	-0,19	-0,18	
45	enz.(L-) autom.	2,05	0,706	9,71	9,10	(*)
48	enz.(L-) autom.	1,35	0,006	0,08	0,08	
50	enz.(L-) autom.	1,32	-0,024	-0,33	-0,31	
53	enz.(L-) autom.	1,96	0,616	8,47	7,94	(**)
55	enz.(L-) autom.	1,26	-0,084	-1,16	-1,08	
56	enz.(L-) autom.	1,34	-0,004	-0,06	-0,05	
61	enz.(L-) autom.	0,80	-0,544	-7,48	-7,02	(**)
65	enz.(L-) Hand	1,32	-0,028	-0,38	-0,36	
70	enz.(L-) autom.	1,30	-0,044	-0,61	-0,57	
82	enz.(L-) Hand	1,43	0,090	1,24	1,16	
90	enz.(L-) autom.	1,38	0,036	0,50	0,46	
95	enz.(L-) autom.	1,38	0,036	0,50	0,46	
106	enz.(L-) Hand	1,25	-0,094	-1,29	-1,21	

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

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

**5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,00	0,242	2,65	1,16	
202	FTIR	1,67	-0,088	-0,96	-0,42	
203	FTIR	1,65	-0,108	-1,18	-0,52	
204	FTIR	1,31	-0,448	-4,90	-2,14	
205	FTIR	2,06	0,302	3,31	1,44	
207	FTIR	1,80	0,042	0,46	0,20	
208	FTIR	1,68	-0,078	-0,85	-0,37	
210	FTIR	1,37	-0,388	-4,25	-1,86	
211	FTIR	1,88	0,122	1,34	0,58	
212	FTIR	1,37	-0,388	-4,25	-1,86	
214	FTIR	1,80	0,042	0,46	0,20	
215	FTIR	1,60	-0,158	-1,73	-0,76	
216	FTIR	1,38	-0,378	-4,14	-1,81	
217	FTIR	1,89	0,132	1,44	0,63	
218	FTIR	1,87	0,112	1,23	0,54	
219	FTIR	1,40	-0,358	-3,92	-1,71	
220	FTIR	2,10	0,342	3,74	1,64	
221	FTIR	0,92	-0,838	-9,17	-4,01	
222	FTIR	1,19	-0,568	-6,22	-2,72	
223	FTIR	1,70	-0,058	-0,63	-0,28	
224	FTIR	1,36	-0,398	-4,36	-1,90	
225	FTIR	1,49	-0,268	-2,93	-1,28	
226	FTIR	1,80	0,042	0,46	0,20	
227	FTIR	1,74	-0,018	-0,20	-0,09	
228	FTIR	1,53	-0,228	-2,50	-1,09	
229	FTIR	1,58	-0,178	-1,95	-0,85	
231	FTIR	1,56	-0,198	-2,17	-0,95	
232	FTIR	1,76	0,002	0,02	0,01	
234	FTIR	2,07	0,312	3,42	1,49	
236	FTIR	1,40	-0,358	-3,92	-1,71	
237	FTIR	1,37	-0,388	-4,25	-1,86	
240	FTIR	1,80	0,042	0,46	0,20	
241	FTIR	1,07	-0,688	-7,53	-3,29	
242	FTIR	1,96	0,202	2,21	0,97	
243	FTIR	1,60	-0,158	-1,73	-0,76	
244	FTIR	1,39	-0,368	-4,03	-1,76	
245	FTIR	1,74	-0,018	-0,20	-0,09	
247	FTIR	1,23	-0,528	-5,78	-2,53	
249	FTIR	1,40	-0,358	-3,92	-1,71	
250	FTIR	1,51	-0,248	-2,71	-1,19	
252	FTIR	1,51	-0,248	-2,71	-1,19	
254	FTIR	1,70	-0,058	-0,63	-0,28	
255	FTIR	1,60	-0,158	-1,73	-0,76	
256	FTIR	1,52	-0,238	-2,61	-1,14	
257	FTIR	2,36	0,602	6,59	2,88	
259	FTIR	1,40	-0,358	-3,92	-1,71	
260	FTIR	1,30	-0,458	-5,01	-2,19	
261	FTIR	1,60	-0,158	-1,73	-0,76	
262	FTIR	1,50	-0,258	-2,82	-1,23	
265	FTIR	1,70	-0,058	-0,63	-0,28	
266	FTIR	1,89	0,132	1,44	0,63	
267	FTIR	1,20	-0,558	-6,11	-2,67	
268	FTIR	1,46	-0,298	-3,26	-1,43	
269	FTIR	1,85	0,092	1,01	0,44	
270	FTIR	1,54	-0,218	-2,39	-1,04	
271	FTIR	1,97	0,212	2,32	1,01	
272	FTIR	1,46	-0,298	-3,26	-1,43	
273	FTIR	1,81	0,052	0,57	0,25	
275	FTIR	1,90	0,142	1,55	0,68	
276	FTIR	2,00	0,242	2,65	1,16	
277	FTIR	1,64	-0,118	-1,29	-0,56	
278	FTIR	0,91	-0,848	-9,28	-4,06	
279	FTIR	1,90	0,142	1,55	0,68	
280	FTIR	1,71	-0,048	-0,53	-0,23	
281	FTIR	1,42	-0,338	-3,70	-1,62	
282	FTIR	1,90	0,142	1,55	0,68	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

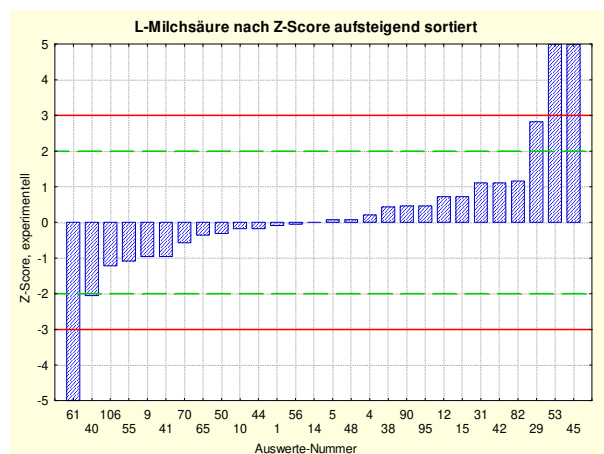
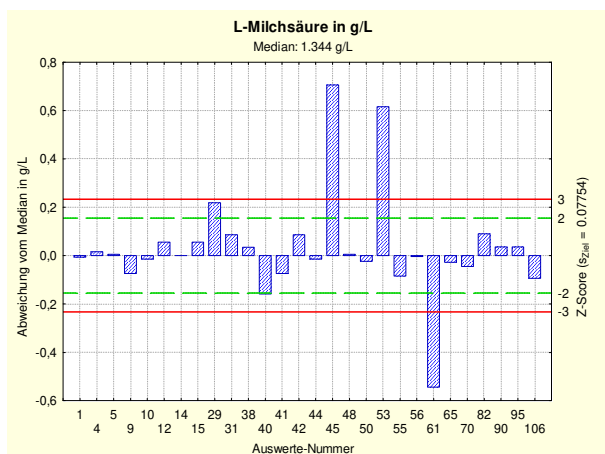
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
284	FTIR	1,60	-0,158	-1,73	-0,76	
285	FTIR	1,72	-0,038	-0,42	-0,18	
287	FTIR	1,94	0,182	1,99	0,87	
288	FTIR	1,97	0,212	2,32	1,01	
320	FTIR	1,67	-0,088	-0,96	-0,42	
337	FTIR	1,48	-0,278	-3,04	-1,33	
365	FTIR	1,20	-0,558	-6,11	-2,67	

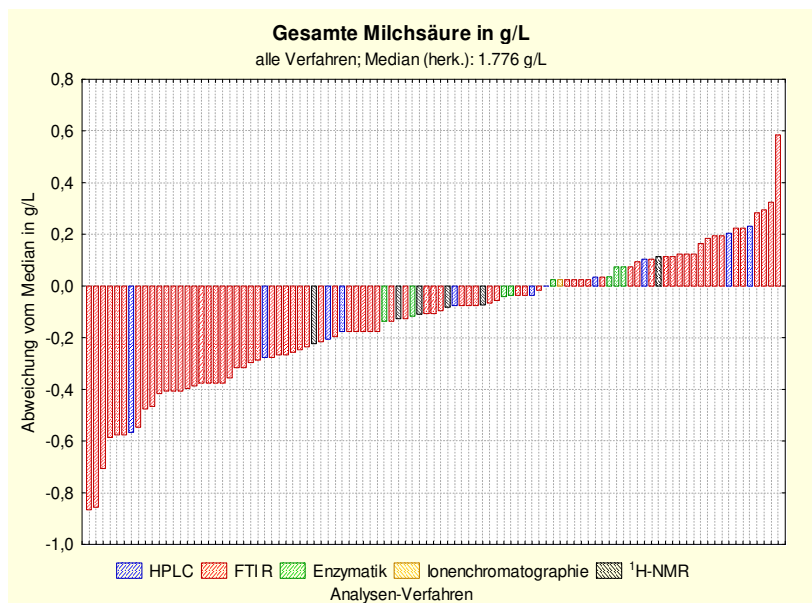
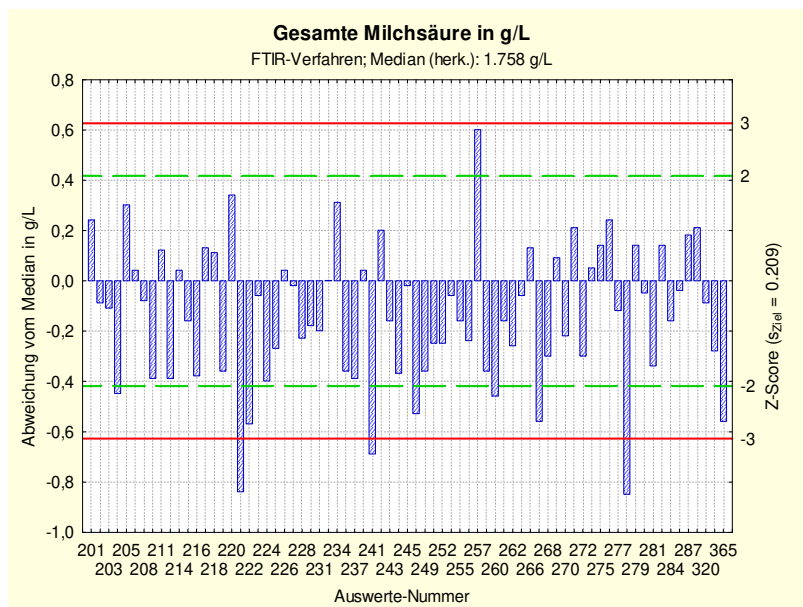
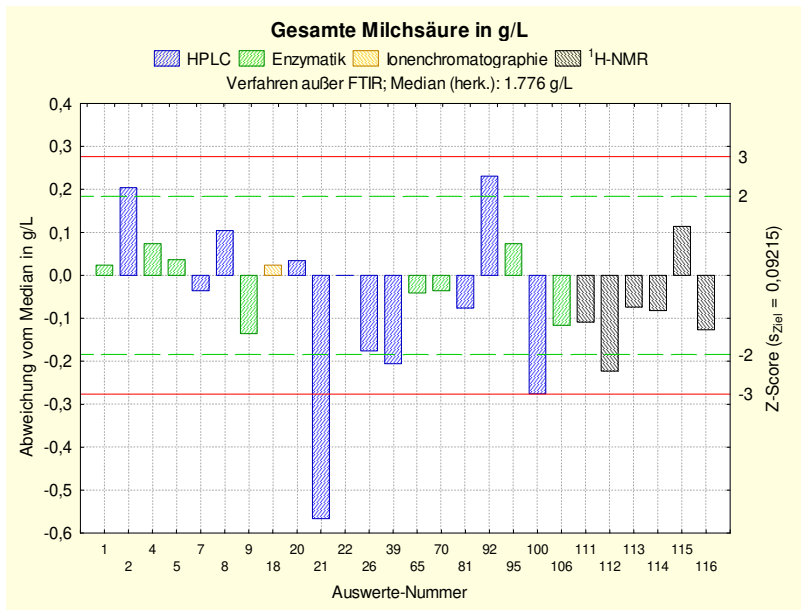
**5.14.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	20	19	27	25
Minimalwert	1,21	1,50	0,80	1,19
Mittelwert	1,733	1,761	1,351	1,348
Median	1,758	1,776	1,344	1,344
Maximalwert	2,01	2,01	1,96	1,56
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,177	0,131	0,177	0,075
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,040	0,030	0,034	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,091	0,092	0,073	0,073
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,078	0,078
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,209	0,209		
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,94	1,42	2,43	1,04
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			2,28	0,97
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,85	0,63		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,43	0,33	0,47	0,21
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			0,44	0,19
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,19	0,14		

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	1,723	0,221
IC	Ionenchromatographie	1	1,800	
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	1,781	0,096
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	1,732	0,079
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	20	1,748	0,149
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	1,625	0,283
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,686	0,106
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	24	1,355	0,0836
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	4	1,332	0,0811
	alle Verfahren L-Milchsäure	28	1,351	0,0812





## 5.15 Reduktone [mg/L]

### 5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	3,0	-2,00	-3,19	
12	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
25	Glyoxal/potentiometr.	5,6	0,63	1,00	
26	Glyoxal/potentiometr.	10,0	5,00	7,96	(*)
29	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
39	Glyoxal/potentiometr.	4,5	-0,50	-0,80	
41	Glyoxal/Stärke	7,0	2,00	3,19	
42	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
43	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
56	Glyoxal/MTT	0,2	-4,80	-7,64	(*)
57	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
61	Glyoxal/Stärke	0,0	-5,00	-7,96	(*)
66	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
67	Glyoxal/potentiometr.	11,0	6,00	9,56	(*)
69	Glyoxal/potentiometr.	5,0	0,00	0,00	
70	Glyoxal/potentiometr.	9,1	4,11	6,55	(**)
71	Glyoxal/potentiometr.	7,0	2,00	3,19	
72	Glyoxal/potentiometr.	7,0	2,00	3,19	
73	Glyoxal/Stärke	37,0	32,00	50,96	(*)
75	Glyoxal/Stärke	10,0	5,00	7,96	(*)
78	Glyoxal/Stärke	1,0	-4	-6,37	(*)
80	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
84	Glyoxal/Stärke	12,0	7,00	11,15	(*)
85	Glyoxal/potentiometr.	16,0	11,00	17,52	(*)

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

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

#### Anmerkung:

Da der Quotient  $s_L/s_H$  über 2,0 und der Quotient  $u_M/s_H$  über 0,5 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Bewertung der Laborleistung dar und werden deshalb in grauer Schriftfarbe dargestellt.

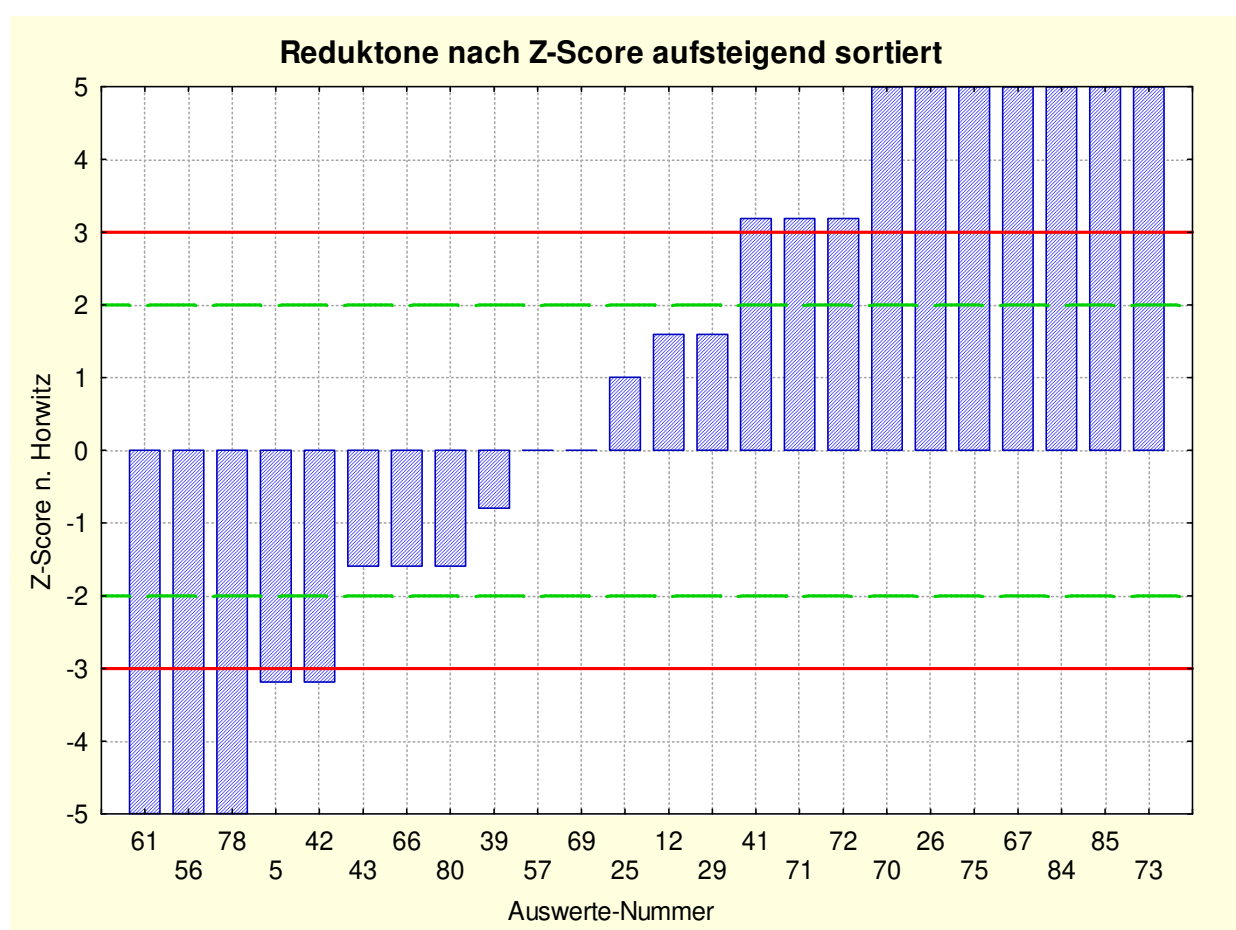
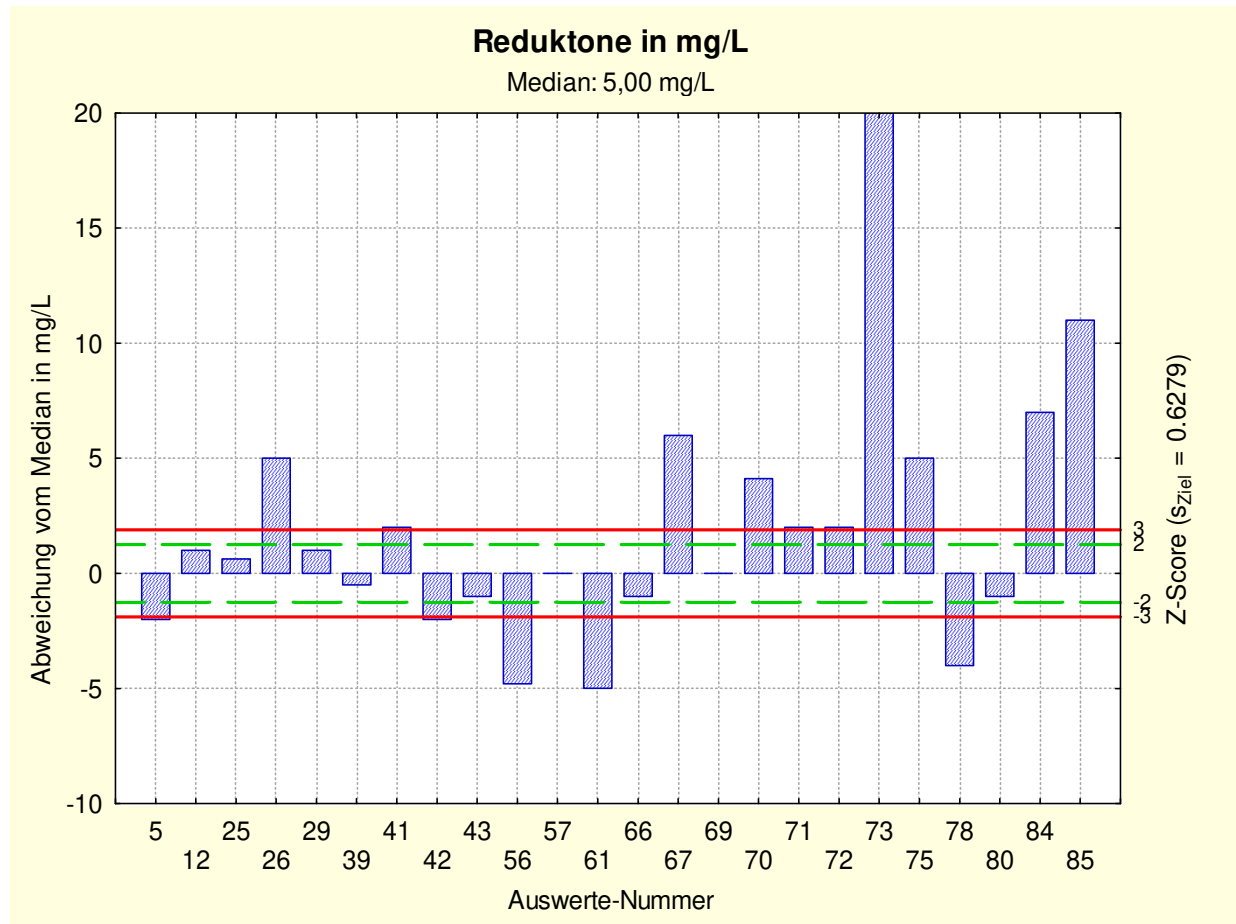
### 5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	15	14
Minimalwert	3,0	3,0
Mittelwert	5,35	5,08
Median	5,00	5,00
Maximalwert	9,1	7,0
Standardabweichung (sL)	1,705	1,402
Standardfehler des Mittelwertes	0,440	0,375
Zielstandardabweichung n. Horwitz (sH)	0,628	0,628
Zielstandardabweichung, experimentell (sexp)		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,72	2,23
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,70	0,60
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		

### 5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	3,00	
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	12	5,58	4,355
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	10	7,76	3,054
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	0,20	
	alle Verfahren	24	6,23	4,183





## 5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

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

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.2	43,2	5,20	1,48	
04	LwK 6.3	41,0	3,00	0,85	
05	LwK 6.2	34,6	-3,40	-0,97	
06	LwK 6.2	36,2	-1,80	-0,51	
08	LwK 6.2	38,8	0,80	0,23	
09	LwK 6.2	39,8	1,80	0,51	
10	LwK 6.4	35,0	-3,00	-0,85	
12	LwK 6.3	51,0	13,00	3,70	
45	LwK 6.3	54,0	16,00	4,55	
53	LwK 6.3	35,0	-3,00	-0,85	
55	LwK 6.4	32,0	-6,00	-1,71	
56	LwK 6.4	42,3	4,30	1,22	
57	LwK 6.4	38,0	0,00	0,00	
91	LwK 6.2	38,0	0,00	0,00	
92	LwK 6.3	30,4	-7,60	-2,16	
102	LwK 6.3	44,0	6,00	1,71	
104	LwK 6.2	36,6	-1,40	-0,40	
202	LwK 6.5	45,7	7,70	2,19	
205	LwK 6.5	28,0	-10,00	-2,84	
206	LwK 6.5	32,4	-5,60	-1,59	
208	LwK 6.5	38,1	0,10	0,03	
210	LwK 6.5	30,0	-8,00	-2,27	
212	LwK 6.5	49,0	11,00	3,13	
215	LwK 6.5	50,0	12,00	3,41	
218	LwK 6.5	35,0	-3,00	-0,85	
224	LwK 6.5	36,0	-2,00	-0,57	
236	LwK 6.5	33,0	-5,00	-1,42	
237	LwK 6.5	32,0	-6,00	-1,71	
244	LwK 6.5	43,0	5,00	1,42	
249	LwK 6.5	36,0	-2,00	-0,57	
251	LwK 6.5	35,0	-3,00	-0,85	
252	LwK 6.5	37,0	-1,00	-0,28	
254	LwK 6.5	45,0	7,00	1,99	
258	LwK 6.5	39,5	1,50	0,43	
262	LwK 6.5	39,0	1,00	0,28	
263	LwK 6.5	41,8	3,79	1,08	
264	LwK 6.5	25,5	-12,50	-3,55	
266	LwK 6.5	48,0	10,00	2,84	
267	LwK 6.5	26,0	-12,00	-3,41	
281	LwK 6.5	39,0	1,00	0,28	
282	LwK 6.5	43,0	5,00	1,42	
283	LwK 6.5	34,0	-4,00	-1,14	
285	LwK 6.5	35,0	-3,00	-0,85	
337	LwK 6.5	33,0	-5,00	-1,42	
365	LwK 6.5	41,0	3,00	0,85	

### 5.16.2 Laborergebnisse jodometrisch

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
14	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	8,00	2,18	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	42,4	2,40	0,65	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	1,00	0,27	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	50,0	10,00	2,72	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	40,1	0,10	0,03	

**Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch**

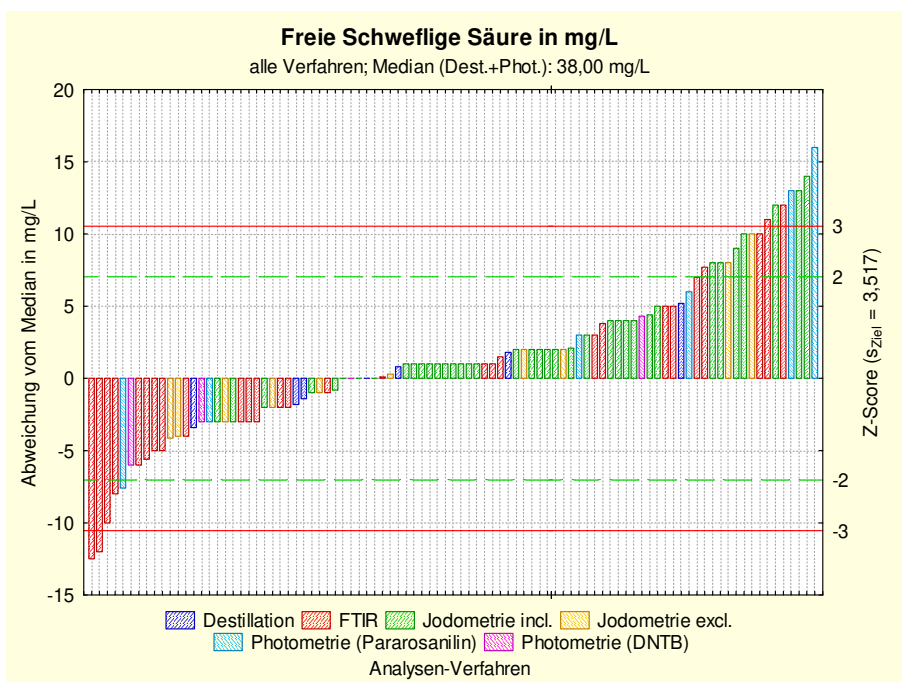
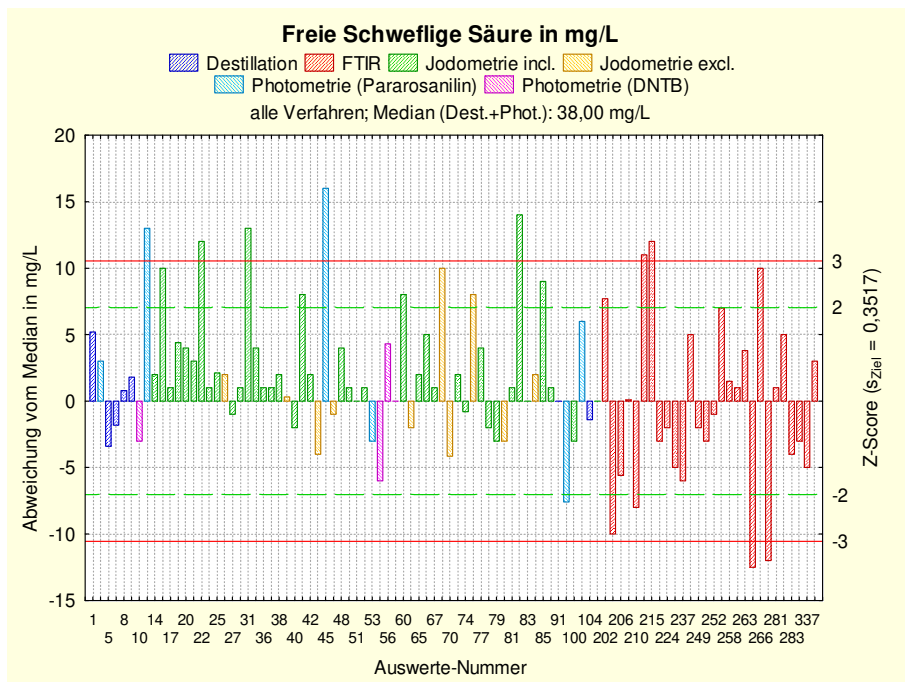
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	
29	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	11,00	2,99	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
37	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
38	Redox incl.	40,0	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,3	-1,70	-0,46	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	6,00	1,63	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	
48	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
51	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	6,00	1,63	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,0	3,00	0,82	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
69	LwK 6.1 (excl.Red.)	48,0	8,00	2,18	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,9	-6,14	-1,67	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
74	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,2	-2,80	-0,76	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,0	6,00	1,63	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	
79	Redox incl.	35,0	-5,00	-1,36	
80	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-5,00	-1,36	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
82	LwK 6.1 (incl.Red.)	52,0	12,00	3,27	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
85	LwK 6.1 (incl.Red.)	47,0	7,00	1,91	
86	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
100	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	-5,00	-1,36	
106	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	

**5.16.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie alle Daten	Verfahren ohne Reduktoneinfluss alle Daten	jodometrisch incl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	17	45	40
Minimalwert	30,4	25,5	35,0
Mittelwert	39,41	38,22	40,87
Median	38,00	38,00	40,00
Maximalwert	54,0	54,0	52,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	6,196	6,450	4,153
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,503	0,961	0,657
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> ) - n. Horwitz incl. Reduktone <sup>1)</sup> (s <sub>H</sub> incl. Red.)	3,517	3,517	3,673
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,76	1,83	1,13
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,43	0,27	0,18
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			

**5.16.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox incl.	Jodometrische Bestimmung mit pH-Meter mV-Modus und der Redoxelektrode, incl. Reduktone	2	37,50	4,01
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - ohne Abzug der Reduktone	38	40,51	3,42
	jodometrische Verfahren inklusive Reduktone	40	40,32	3,38
LwK 6.1 excl.Red.	- mit Abzug der Reduktone	10	38,61	5,05
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	38,07	2,96
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	6	42,57	10,29
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	4	36,82	4,98
	Destillations- und photometrische Verfahren	17	38,76	5,45
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	37,47	7,12
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	45	38,03	6,29



## 5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 5.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	132,0	32,00	4,00	5,97	(**)
04	LwK 7.7	105,0	5,00	0,63	0,93	
05	LwK 7.3	98,8	-1,20	-0,15	-0,22	
06	LwK 7.4.2	100,0	0,00	0,00	0,00	
08	LwK 7.3	105,0	5,00	0,63	0,93	
09	LwK 7.3	103,0	3,00	0,38	0,56	
10	LwK 7.4.2	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
12	LwK 7.4.2	110,0	10,00	1,25	1,87	
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	12,00	1,50	2,24	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	15,00	1,88	2,80	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	5,00	0,63	0,93	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,1	10,10	1,26	1,89	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	8,00	1,00	1,49	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	10,00	1,25	1,87	
22	LwK 7.4.2m	106,0	6,00	0,75	1,12	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,9	9,89	1,24	1,85	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	9,00	1,13	1,68	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,5	-7,50	-0,94	-1,40	
29	LwK 7.4.1	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	125,0	25,00	3,13	4,67	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	7,00	0,88	1,31	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	9,00	1,13	1,68	
37	LwK 7.4.1	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
38	LwK 7.7	106,0	6,00	0,75	1,12	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,6	8,60	1,07	1,61	
40	LwK 7.4.1	97,5	-2,50	-0,31	-0,47	
41	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	8,00	1,00	1,49	
42	LwK 7.4.2	100,0	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	-10,00	-1,25	-1,87	
44	LwK 7.4.1	104,0	4,00	0,50	0,75	
45	LwK 7.7	80,0	-20,00	-2,50	-3,73	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	9,00	1,13	1,68	
48	LwK 7.4.2	96,0	-4,00	-0,50	-0,75	
50	LwK 7.4.2	101,0	1,00	0,13	0,19	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	4,00	0,50	0,75	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	101,0	1,00	0,13	0,19	
53	LwK 7.4.1	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
55	LwK 7.7	103,7	3,70	0,46	0,69	
56	LwK 7.7	108,6	8,60	1,07	1,61	
57	LwK 7.4.2	91,0	-9,00	-1,13	-1,68	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	116,0	16,00	2,00	2,99	
61	LwK 7.3	90,0	-10,00	-1,25	-1,87	
65	LwK 7.4.2	94,0	-6,00	-0,75	-1,12	
66	LwK 7.5.3(incl. Red.)	108,0	8,00	1,00	1,49	
67	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	4,00	0,50	0,75	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	121,0	21,00	2,63	3,92	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,4	5,36	0,67	1,00	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	10,00	1,25	1,87	
74	LwK 7.1	80,1	-19,90	-2,49	-3,71	
75	LwK 7.4.2	92,0	-8,00	-1,00	-1,49	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	4,00	0,50	0,75	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	101,0	1,00	0,13	0,19	
80	LwK 7.5.3(excl. Red.)	100,0	0,00	0,00	0,00	
81	LwK 7.2	102,4	2,40	0,30	0,45	
82	LwK 7.4.1	106,0	6,00	0,75	1,12	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	110,0	10,00	1,25	1,87	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	102,0	2,00	0,25	0,37	
85	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,0	19,00	2,38	3,55	

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

**Fortsetzung: Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	14,00	1,75	2,61	
91	LwK 7.3	111,0	11,00	1,38	2,05	
92	LwK 7.6	92,5	-7,50	-0,94	-1,40	
96	LwK 7.4.2	101,0	1,00	0,13	0,19	
97	LwK 7.4.2	104,0	4,00	0,50	0,75	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	5,00	0,63	0,93	
100	LwK 7.4.2	118,0	18,00	2,25	3,36	
102	LwK 7.6	103,0	3,00	0,38	0,56	
103	LwK 7.7	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
104	LwK 7.3	103,5	3,50	0,44	0,65	
106	LwK 7.4.2	90,0	-10,00	-1,25	-1,87	
202	LwK 7.8	102,0	2,00	0,25	0,37	
205	LwK 7.8	101,0	1,00	0,13	0,19	
206	LwK 7.8	109,0	9,00	1,13	1,68	
207	FTIR(direkt)	45,0	-55,00	-6,88	-10,27	(*)
208	LwK 7.8	143,0	43,00	5,38	8,03	(***)
210	LwK 7.8	114,0	14,00	1,75	2,61	
212	LwK 7.8	123,0	23,00	2,88	4,29	
215	LwK 7.8	114,0	14,00	1,75	2,61	
218	LwK 7.8	119,0	19,00	2,38	3,55	
224	LwK 7.8	11,0	-89,00	-11,13	-16,61	(*)
236	LwK 7.8	109,0	9,00	1,13	1,68	
237	LwK 7.8	101,0	1,00	0,13	0,19	
244	LwK 7.8	115,0	15,00	1,88	2,80	
249	LwK 7.8	112,0	12,00	1,50	2,24	
251	LwK 7.8	104,0	4,00	0,50	0,75	
252	LwK 7.8	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
254	LwK 7.8	109,0	9,00	1,13	1,68	
258	LwK 7.8	139,0	39,00	4,88	7,28	(***)
262	LwK 7.8	109,0	9,00	1,13	1,68	
263	LwK 7.8	96,7	-3,28	-0,41	-0,61	
264	LwK 7.8	101,5	1,50	0,19	0,28	
266	LwK 7.8	124,0	24,00	3,00	4,48	
267	LwK 7.8	101,0	1,00	0,13	0,19	
281	LwK 7.8	100,0	0,00	0,00	0,00	
282	LwK 7.8	118,0	18,00	2,25	3,36	
283	LwK 7.8	121,0	21,00	2,63	3,92	
285	LwK 7.8	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
337	LwK 7.8	100,0	0,00	0,00	0,00	
365	LwK 7.8	87,0	-13,00	-1,63	-2,43	

Die mit (\*) gekennzeichneten Werte weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.  
Die mit (\*\*\*) gekennzeichneten Werten weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.  
Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren (LwK 7.8) sind die  $Z\text{-Score}_{\text{Horwitz}}$  gültig. Die  $Z\text{-Score}_{\text{exper.}}$  in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

**5.17.2 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	29	28
Minimalwert	80,1	80,1
Mittelwert	100,91	99,80
Median	100,00	100,00
Maximalwert	132,0	118,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	9,520	7,544
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	1,768	1,426
Zielstandardabweichung nach Horwitz ( $s_H$ )	8,000	8,000
Zielstandardabweichung experimentell ( $s_{\text{exp}}$ )	5,357	5,357
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,19	0,94
Quotient ( $s_L/s_{\text{exp herk.}}$ )	1,78	1,41
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,22	0,18
Quotient ( $u_M/s_{\text{exp herk.}}$ )	0,33	0,27

**5.17.3 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	80,10	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	1	102,40	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	104,66	10,51
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	99,71	4,41
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	99,05	7,13
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	106,00	
	alle Destillationsverfahren	29	100,25	7,24
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	21	108,17	4,61
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	108,50	12,03
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein	4	105,25	5,02
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	27	107,18	5,87
erweiterte Basis				
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	5	106,44	11,75
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse unter Reduktonabzug	1	125,00	
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	100,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	7	108,42	13,52
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	2	97,75	8,42
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	102,10	7,20
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	108,38	11,79
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	45,00	

