



**Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz**

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

**und**

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

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2019“**

**Teil 3**

**Durchführung und Ergebnisse der Untersuchung  
von zwei Weißweinen FT19P04a und FT19P04b  
und eines Roséweines FT19P05**

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

Stand: 25.02.2020



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>8</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	8
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT19P04a, FT19P04b und FT19P05	9
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	17
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT19P04a, FT19P04b und FT19P05</b>	<b>18</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	18
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	23
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P04a</b>	<b>28</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	28
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	28
4.1.2	Deskriptive Ergebnisse	28
4.1.3	FTIR-Laborergebnisse	29
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	29
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	31
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	31
4.2.2	Deskriptive Ergebnisse	31
4.2.3	FTIR-Laborergebnisse	32
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	32
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	34
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	34
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	34
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse	35
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	35
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	37
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	37
4.4.2	Deskriptive Ergebnisse	37
4.4.3	FTIR-Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	38
4.4.4	FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)	39
4.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	39
4.5	Glucose [g/L]	42
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	42
4.5.2	Deskriptive Ergebnisse	42
4.5.3	Angaben zu den Analyseverfahren	42
4.5.4	FTIR-Laborergebnisse	43
4.6	Fructose [g/L]	45
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	45
4.6.2	Deskriptive Ergebnisse	45
4.6.3	Angaben zu den Analyseverfahren	45
4.6.4	FTIR-Laborergebnisse	46

4.7	Glycerin [g/L]	48
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	48
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	48
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse	49
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	49
4.8	pH-Wert	51
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	51
4.8.2	Deskriptive Ergebnisse	51
4.8.3	Angaben zu den Analyseverfahren	51
4.8.4	FTIR-Laborergebnisse	52
4.9	Gesamtsäure [g/L]	54
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	54
4.9.2	Deskriptive Ergebnisse	54
4.9.3	FTIR-Laborergebnisse	55
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	55
4.10	Weinsäure [g/L]	57
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	57
4.10.2	Deskriptive Ergebnisse	57
4.10.3	Angaben zu den Analyseverfahren	57
4.10.4	FTIR-Laborergebnisse	58
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	60
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	60
4.11.2	Deskriptive Ergebnisse	60
4.11.3	Angaben zu den Analyseverfahren	60
4.11.4	FTIR-Laborergebnisse	61
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	63
4.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1	63
4.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	63
4.12.3	Deskriptive Ergebnisse	63
4.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	64
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	66
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	66
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	66
4.13.3	Deskriptive Ergebnisse	66
4.13.4	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	67
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	67
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	70
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	70
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	70
4.14.3	Deskriptive Ergebnisse	70
4.14.4	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	71
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	71
<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P04b</b>	<b>74</b>
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	74
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	74
5.1.2	Deskriptive Ergebnisse	74
5.1.3	FTIR-Laborergebnisse	75
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	75
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	77
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	77
5.2.2	Deskriptive Ergebnisse	77
5.2.3	FTIR-Laborergebnisse	78
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	78



5.3	Gesamtextrakt [g/L]	80
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	80
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	80
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse	81
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	81
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	83
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	83
5.4.2	Deskriptive Ergebnisse	83
5.4.3	FTIR-Laborergebnisse ( wie mitgeteilt)	84
5.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	84
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)	85
5.5	Glucose [g/L]	88
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	88
5.5.2	Deskriptive Ergebnisse	88
5.5.3	Angaben zu den Analyseverfahren	88
5.5.4	FTIR-Laborergebnisse	89
5.6	Fructose [g/L]	91
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	91
5.6.2	Deskriptive Ergebnisse	91
5.6.3	Angaben zu den Analyseverfahren	91
5.6.4	FTIR-Laborergebnisse	92
5.7	Glycerin [g/L]	94
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	94
5.7.2	FTIR-Laborergebnisse	94
5.7.3	Deskriptive Ergebnisse	95
5.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	95
5.8	pH-Wert	97
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	97
5.8.2	Deskriptive Ergebnisse	97
5.8.3	Angaben zu den Analyseverfahren	97
5.8.4	FTIR-Laborergebnisse	98
5.9	Gesamtsäure [g/L]	100
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	100
5.9.2	Deskriptive Ergebnisse	100
5.9.3	Angaben zu den Analyseverfahren	100
5.9.4	FTIR-Laborergebnisse	101
5.10	Weinsäure [g/L]	103
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	103
5.10.2	Deskriptive Ergebnisse	103
5.10.3	Angaben zu den Analyseverfahren	103
5.10.4	FTIR-Laborergebnisse	104
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	106
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	106
5.11.2	Deskriptive Ergebnisse	106
5.11.3	FTIR-Laborergebnisse	107
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	107
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	109
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1	109
5.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	109
5.12.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	109
5.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	110

5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	112
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	112
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	112
5.13.3	Deskriptive Ergebnisse	112
5.13.4	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	113
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	113
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	116
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	116
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	116
5.14.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Daten	116
5.14.4	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	117
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	117
<b>6</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P05</b>	<b>120</b>
6.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	120
6.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	120
6.1.2	FTIR-Laborergebnisse	121
6.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	122
6.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	122
6.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	124
6.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	124
6.2.2	FTIR-Laborergebnisse	125
6.2.3	Deskriptive Ergebnisse	126
6.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	127
6.3	Gesamtextrakt [g/L]	129
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	129
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	130
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse	131
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	131
6.4	Vergärbare Zucker [g/L]	133
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	133
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse ( wie mitgeteilt)	134
6.4.3	FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)	135
6.4.4	Deskriptive Ergebnisse	136
6.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	137
6.5	Glucose [g/L]	139
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	139
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	139
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse	141
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	141
6.6	Fructose [g/L]	143
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	143
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	143
6.6.3	Deskriptive Ergebnisse	145
6.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	145
6.7	Glycerin [g/L]	147
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	147
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	147
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse	148
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	148

6.8	pH-Wert	150
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	150
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse	150
6.8.3	Deskriptive Ergebnisse	152
6.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	152
6.9	Gesamtsäure [g/L]	154
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	154
6.9.2	FTIR-Laborergebnisse	155
6.9.3	Deskriptive Ergebnisse	156
6.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	156
6.10	Weinsäure [g/L]	158
6.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	158
6.10.2	FTIR-Laborergebnisse	158
6.10.3	Deskriptive Ergebnisse	160
6.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	160
6.11	Flüchtige Säure [g/L]	162
6.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	162
6.11.2	FTIR-Laborergebnisse	162
6.11.3	Deskriptive Ergebnisse	164
6.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	164
6.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	166
6.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1	166
6.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	166
6.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	166
6.12.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	167
6.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	169
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	169
6.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	169
6.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	170
6.13.4	Deskriptive Ergebnisse	171
6.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	171
6.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	173
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	173
6.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	173
6.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	174
6.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	175
6.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	175
6.15	Reduktone [mg/L]	177
6.15.1	Laborergebnisse	177
6.15.2	Deskriptive Ergebnisse	177
6.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	177
6.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	179
6.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	179
6.16.2	Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone	179
6.16.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	180
6.16.4	Deskriptive Ergebnisse	181
6.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	181
6.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	183
6.17.1	Laborergebnisse	183
6.17.2	Deskriptive Ergebnisse	184
6.17.3	Angaben zu den Analyseverfahren	185

## 1 Einleitung

Die jährliche Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz wurde wiederum in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik" mit einer speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung verbunden. In dieser erweiterten Laborvergleichsuntersuchung waren von den beteiligten Laboratorien im Rahmen ihrer Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden Parameter zu bestimmen, die über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinausgehen, aber üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmt werden. Neben einem Rotwein, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung vier Weißweine und ein Roséwein sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Der vorliegende Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT19P04a, FT19P04b und FT19P05, nachdem in Teil 1 die für alle Prüfmaterialien gemeinsamen Aspekte und die Ergebnisse für das Prüfmaterial FT19P01 sowie in Teil 2 die Ergebnisse für die Prüfmaterialien FT19P02 und FT19P03 behandelt wurden. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 oder Teil 2 des Berichtes behandelt wurden. Daher wird bei Bedarf auf diese Teile verwiesen.

## 2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT19P04a, FT19P04b und FT19P05 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfmaterialien dargestellt.

### 2.1 Untersuchungsmaterial

#### 2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Als Prüfgut FT19P04a wurde ein trockener badischer 2014er Weißwein der Rebsorte Grauburgunder aus gewerblicher Herstellung im Technikums-Maßstab verwendet. Als Prüfgut FT19P04b wurde ein badischer 2014er Weißwein der Rebsorte Rivaner eingesetzt, der im Technikums-Maßstab so hergestellt wurde, dass durch die Art der Vergärung ein relativ hoher Fructosegehalt vorhanden war.

Bei dem Prüfgut FT19P05 handelte es sich um einen 2017er Spätburgunder Weißherbst vom Bodensee, der aus genossenschaftlicher Produktion stammte.

Weitere Angaben zu den Prüfgütern siehe Teil 1 Abschnitt 2.1.2 des Berichtes.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde für alle drei Prüfgüter durchgeführt.

## 2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT19P04a, FT19P04b und FT19P05

Von den Prüfgütern **FT19P04a** und **FT19P04b** standen jeweils 120 Flaschen zu je 0,25 L zur Verfügung (je fünf Kartons mit 24 Flaschen). Davon wurden zur Homogenitätsprüfung jeweils 10 Flaschen (zwei Flaschen je Karton) zufällig ausgewählt. Es wurden für jedes Prüfgut zwei Serien von Doppelproben gebildet. Die erste Serie diente der Bestimmung der Freien, Gebundenen und Gesamten Schwefligen Säure, die zweite Serie wurde für die FTIR-Messungen verwendet. Die Messergebnisse für diese beiden Prüfgüter sind in den Tabellen 1 bis 6 dokumentiert.

**Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P04a, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Schweflige Säure		
		frei mg/L	gebunden mg/L	gesamt mg/L
1	2	6,77	39,58	46,35
2	6	5,21	33,33	38,54
3	9	6,77	42,71	49,48
4	1	7,29	43,75	51,04
5	3	6,25	39,58	45,83
6	5	7,81	43,75	51,56
7	10	8,33	45,83	54,16
8	4	6,25	40,63	46,88
9	8	8,85	45,83	54,68
10	7	7,81	42,71	50,52
11	4	6,25	39,58	45,83
12	9	6,77	42,71	49,48
13	10	7,81	44,79	52,60
14	5	7,81	43,75	51,56
15	6	5,73	32,29	38,02
16	3	6,77	40,63	47,40
17	2	6,25	39,58	45,83
18	8	8,85	46,88	55,73
19	1	7,29	43,75	51,04
20	7	7,29	41,67	48,96

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT19P04a** wurden wie in Teil 1 beschrieben zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Bei einzelnen auffälligen Messergebnissen ordnete sich der Wiederholungswert unauffällig in die Gesamtschar der Messergebnisse ein. Selbst einzelne stark abweichende Messungen hatten keine Auswirkung auf die weiteren Prüfungen. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben wenige mäßig starke und nur schwach signifikante Korrelationen. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Probennummer ergaben keine signifikanten Korrelationen. Ob diese Korrelationen für das Ergebnis der Homogenitätsprüfung oder die Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung wesentlich sind, zeigt sich insbesondere bei einer Verknüpfung dieser Beobachtungen mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse.

**Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P04a, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Milch-säure	Flüchtige Säure
			g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	2	0,99369	112,86	30,46	5,86	4,47	2,73	5,67	3,34	7,49	1,83	3,33	0,69	0,396
2	6	0,99374	112,82	30,50	5,92	4,38	2,81	5,78	3,33	7,51	1,80	3,37	0,78	0,386
3	9	0,99366	112,80	30,40	5,87	4,45	2,76	5,73	3,34	7,50	1,83	3,36	0,70	0,389
4	1	0,99370	112,97	30,53	6,00	4,46	2,65	5,68	3,34	7,52	1,83	3,28	0,72	0,385
5	3	0,99371	113,07	30,45	5,75	4,35	2,84	5,83	3,33	7,50	1,82	3,33	0,73	0,383
6	5	0,99368	112,87	30,42	5,88	4,35	2,91	5,85	3,34	7,50	1,81	3,38	0,71	0,390
7	10	0,99372	113,13	30,53	6,07	4,48	2,78	5,66	3,34	7,52	1,80	3,34	0,74	0,382
8	4	0,99373	113,01	30,44	5,70	4,21	2,76	5,77	3,34	7,49	1,79	3,36	0,79	0,398
9	8	0,99370	112,92	30,49	5,70	4,22	2,80	5,79	3,34	7,50	1,82	3,36	0,72	0,387
10	7	0,99378	113,07	30,58	5,98	4,47	2,80	5,81	3,33	7,52	1,81	3,32	0,77	0,385
11	4	0,99367	112,46	30,42	5,71	4,31	2,73	5,79	3,34	7,49	1,86	3,32	0,67	0,394
12	9	0,99370	113,23	30,53	5,96	4,35	2,78	5,74	3,34	7,51	1,77	3,40	0,78	0,391
13	10	0,99374	113,09	30,55	5,77	4,33	2,78	5,83	3,34	7,51	1,81	3,30	0,71	0,386
14	5	0,99371	113,09	30,49	5,88	4,24	2,70	5,78	3,33	7,52	1,80	3,31	0,73	0,394
15	6	0,99374	113,15	30,50	5,72	4,32	2,75	5,79	3,33	7,53	1,81	3,33	0,76	0,376
16	3	0,99376	113,13	30,54	5,92	4,30	2,85	5,79	3,33	7,51	1,83	3,31	0,75	0,384
17	2	0,99373	113,11	30,50	5,90	4,31	2,72	5,70	3,34	7,52	1,77	3,38	0,80	0,394
18	8	0,99376	113,09	30,55	5,96	4,33	2,82	5,82	3,33	7,51	1,79	3,34	0,75	0,381
19	1	0,99375	113,16	30,51	6,04	4,46	2,78	5,74	3,34	7,53	1,82	3,31	0,70	0,376
20	7	0,99373	113,14	30,61	5,87	4,22	2,79	5,70	3,34	7,52	1,77	3,36	0,79	0,387

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

**Tabelle 3: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P04a**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_r$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_r/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte FTIR	0,99372	20	1,1111	0,4327	0,000031	0,000007	0,000132	0,235	0,055	0,000063
Vorh. Alkohol FTIR	113,0	20	0,6133	0,7626	0,1978		0,535	0,370		0,2965
Gesamtextrakt FTIR	30,50	20	2,3895	0,0955	0,0431	0,0359	0,594	0,073	0,061	0,2481
Vergärbare Zucker FTIR	5,873	20	1,1148	0,4307	0,1118	0,0268	0,201	0,555	0,133	0,1396
Glucose FTIR	4,351	20	1,0116	0,4885	0,0897	0,0068	0,160	0,559	0,043	0,1117
Fructose FTIR	2,777	20	0,9650	0,5167	0,0577		0,118	0,490		0,0756
Glycerin FTIR	5,763	20	1,4548	0,2831	0,0517	0,0247	0,250	0,207	0,098	0,1154
pH-Wert	3,337	20	2,2593	0,1101	0,0039	0,0031	0,0476	0,081	0,065	0,0200
Gesamtsäure FTIR	7,510	20	1,9192	0,1621	0,0105	0,0071	0,107	0,098	0,066	0,0453
Weinsäure FTIR	1,809	20	0,3981	0,9093	0,0275		0,0936	0,294		0,0474
Äpfelsäure FTIR	3,340	20	1,2664	0,3572	0,0292	0,0107	0,1027	0,285	0,104	0,0515
Milchsäure FTIR	0,7395	20	0,5053	0,8405	0,0428		0,0438	0,979		0,0467
Flüchtige Säure FTIR	0,3872	20	4,6059	0,0128	0,0037	0,0050	0,0286	0,130	0,175	0,0123
Freie SO <sub>2</sub>	7,11	20	29,356	0,0000	0,260	0,979	0,847	0,307	1,156	0,4354
Gebundene SO <sub>2</sub>	41,67	20	90,194	0,0000	0,572	3,822	5,357	0,107	0,714	2,2773
Gesamte SO <sub>2</sub>	48,77	20	90,293	0,0000	0,710	4,743	5,357	0,133	0,885	2,3161

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

Für die Aussagekraft der Varianzanalyse ist der Quotient  $s_r/s_z$  maßgeblich. Er überschreitet den höchstzulässigen Wert 0,5 für die Parameter Vergärbare Zucker, Glucose und Milchsäure. Diese FTIR-Messergebnisse tragen daher zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität nicht bei. Für alle anderen geprüften Parameter sind die Ergebnisse der Varianzanalyse aussagekräftig und belegen bei nicht signifikantem Ergebnis der Varianzanalyse eine ausreichende Homogenität. Für den Parameter Flüchtige Säure ergibt sich ein nur schwach signifikantes Ergebnis der Varianzanalyse, während das Ergebnis für alle drei Fraktionen der Schwefligen Säure hoch signifikant ist. Die weiteren Prüfungen anhand des Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Proben  $s_{Pr}$  und der Zielstandardabweichung ( $s_z$ ), der einen Betrag von 0,3 nicht überschreiten soll, sowie der Vergleich von  $s_{Pr}$  mit dem nach Fearn und Thompson berechneten höchstzulässigen Betrag für diese Standardabweichung belegen, dass für den Parameter Flüchtige Säure noch eine ausreichende Homogenität vorliegt. Dahingegen wird bei allen drei Fraktionen der Schwefligen Säure sowohl der zulässige Höchstwert des Quotienten  $s_{Pr}/s_z$  als auch der Maximalwert für  $s_{Pr}$  überschritten. Für diese Parameter ist somit keine ausreichende Homogenität gegeben. Insgesamt ergibt sich daher für das **Prüfgut FT19P04a** nur bei **Ausschluss der Parameter Freie, Gebundene und Gesamte Schweflige Säure** eine **ausreichende Homogenität** für die Laborvergleichsuntersuchung. Die Teilnehmer an der Laborvergleichsuntersuchung wurden auf diesen Sachverhalt und den Ausfall dieser Parameter für eine Bewertung der Laborleistung durch einen besonderen Hinweis bei der Zusendung der Proben dieses Prüfgutes unterrichtet.

Auch die Messergebnisse des Prüfgutes **FT19P04b** wurden wie in Teil 1 und vorstehend für das Prüfgut FT19P04a beschrieben schrittweise und mit sehr ähnlichen Ergebnissen geprüft. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben mäßige Korrelationen zur Messreihenfolge, die für den Parameter Gesamtextrakt signifikant und für den Parameter Glycerin nur schwach signifikant gesichert waren. Korrelationen zur Probennummer wurden nicht festgestellt. Ihre Bewertung ergibt sich wie für das Prüfgut FT19P04a beschrieben. Die nachfol-

genden varianzanalytischen Prüfungen, deren Ergebnisse in Tabelle 6 zusammenfasst sind, zeigten, dass sich die beobachteten Abweichungen nicht nachteilig auf die Homogenitätsprüfung auswirkten.

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P04b, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Schweflige Säure		gesamt mg/L
		frei mg/L	gebunden mg/L	
1	8	52,60	79,17	131,8
2	1	43,75	72,92	116,7
3	2	51,04	77,08	128,1
4	9	48,96	76,04	125,0
5	6	39,06	72,92	112,0
6	10	47,40	76,04	123,4
7	4	42,19	72,92	115,1
8	3	47,92	77,08	125,0
9	5	46,88	77,08	124,0
10	7	59,38	82,29	141,7
11	5	48,44	73,96	122,4
12	10	47,92	75,00	122,9
13	4	43,23	69,79	113,0
14	6	39,06	70,83	109,9
15	9	48,96	76,04	125,0
16	8	52,08	79,17	131,3
17	2	51,56	77,08	128,6
18	3	48,44	75,00	123,4
19	1	44,27	72,92	117,9
20	7	59,38	82,29	141,7



**Tabelle 5: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P04b, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Milch-säure	Flüchtige Säure
			g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	8	1,00363	88,62	46,60	23,52	2,83	20,45	4,99	3,21	6,98	2,38	2,54	1,04	0,500
2	1	1,00365	89,01	46,64	23,49	2,80	20,32	4,87	3,21	6,99	2,35	2,54	1,09	0,483
3	2	1,00373	88,94	46,68	23,62	2,82	20,44	4,97	3,21	7,00	2,34	2,57	1,06	0,472
4	9	1,00373	88,98	46,68	23,56	2,68	20,53	4,83	3,21	7,00	2,33	2,57	1,12	0,462
5	6	1,00373	89,00	46,63	23,46	2,77	20,55	4,93	3,21	6,98	2,33	2,53	1,10	0,468
6	10	1,00373	88,95	46,69	23,38	2,76	20,37	4,97	3,21	7,00	2,35	2,54	1,07	0,464
7	4	1,00368	88,95	46,67	23,23	2,54	20,42	4,99	3,21	7,01	2,33	2,58	1,14	0,476
8	3	1,00371	88,88	46,72	23,61	2,99	20,28	4,93	3,22	7,00	2,35	2,48	1,08	0,485
9	5	1,00368	88,92	46,61	23,25	2,65	20,35	4,99	3,21	6,99	2,33	2,61	1,09	0,475
10	7	1,00370	88,89	46,73	23,43	2,74	20,32	4,99	3,22	7,01	2,36	2,51	1,11	0,498
11	5	1,00365	88,76	46,58	23,31	2,81	20,34	4,87	3,22	6,99	2,37	2,53	1,02	0,478
12	10	1,00371	88,86	46,73	23,50	2,71	20,53	4,97	3,21	7,00	2,34	2,59	1,12	0,482
13	4	1,00372	89,03	46,78	23,51	2,69	20,44	4,88	3,21	7,01	2,33	2,59	1,09	0,472
14	6	1,00368	88,99	46,68	23,30	2,61	20,46	5,03	3,21	6,98	2,34	2,57	1,08	0,476
15	9	1,00374	89,16	46,81	23,62	3,01	20,42	4,97	3,21	7,01	2,35	2,49	1,05	0,463
16	8	1,00371	88,89	46,74	23,59	2,85	20,44	4,95	3,22	7,00	2,35	2,55	1,08	0,474
17	2	1,00371	88,94	46,76	23,61	2,81	20,39	5,00	3,22	7,00	2,31	2,61	1,15	0,489
18	3	1,00375	88,93	46,76	23,51	2,75	20,54	5,02	3,21	6,99	2,34	2,59	1,08	0,472
19	1	1,00368	88,75	46,70	23,48	2,92	20,30	4,94	3,21	7,00	2,35	2,51	1,10	0,481
20	7	1,00372	88,72	46,69	23,26	2,60	20,39	5,13	3,22	6,99	2,38	2,56	1,08	0,488

**Tabelle 6: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P04b**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_r$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_r/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte FTIR	1,003702	20	1,8596	0,1738	0,000028	0,000018	0,000132	0,209	0,137	0,000061
Vorh. Alkohol FTIR	88,91	20	1,4724	0,2770	0,1106	0,0537	0,535	0,207	0,100	0,2465
Gesamtextrakt FTIR	46,69	20	1,2868	0,3483	0,0578	0,0219	0,594	0,097	0,037	0,2511
Vergärbare Zucker FTIR	23,46	20	3,1724	0,0432	0,0921	0,0960	0,676	0,136	0,142	0,2932
Glucose FTIR	2,767	20	1,1834	0,3958	0,1177	0,0357	0,118	1,001	0,303	0,1278
Fructose FTIR	20,41	20	1,2257	0,3757	0,0780	0,0262	0,594	0,131	0,044	0,2566
Glycerin FTIR	4,961	20	0,9547	0,5231	0,0675		0,221	0,306		0,1133
pH-Wert	3,213	20	1,2222	0,3773	0,0045	0,0015	0,0476	0,094	0,031	0,0201
Gesamtsäure FTIR	6,997	20	2,6364	0,0735	0,0074	0,0067	0,107	0,069	0,063	0,0446
Weinsäure FTIR	2,346	20	1,8000	0,1865	0,0150	0,0095	0,117	0,129	0,081	0,0503
Äpfelsäure FTIR	2,553	20	0,6316	0,7491	0,0414		0,0827	0,500		0,0537
Milchsäure FTIR	1,088	20	0,5341	0,8203	0,0360		0,0607	0,592		0,0440
Flüchtige Säure FTIR	0,478	20	1,7431	0,1995	0,0091	0,0055	0,0286	0,318	0,194	0,0149
Freie SO <sub>2</sub>	48,13	20	259,41	0,0000	0,493	5,607	4,298	0,115	1,305	1,8361
Gebundene SO <sub>2</sub>	75,78	20	14,989	0,0001	1,211	3,202	5,357	0,226	0,598	2,5171
Gesamte SO <sub>2</sub>	123,9	20	214,73	0,0000	0,857	8,858	5,357	0,160	1,654	2,3658

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

Auch die Ergebnisse der Varianzanalyse zeigen für das Prüfgut FT19P04b eine große Ähnlichkeit zu den Ergebnissen für das Prüfgut FT19P04a. An die Stelle des schwach signifikanten Ergebnisses der Varianzanalyse für den Parameter Flüchtige Säure tritt hier der Parameter Vergärbare Zucker mit denselben Ergebnissen hinsichtlich der weiteren Prüfgrößen  $s_{Pr}/s_z$  und keiner Überschreitung des Höchstwertes für  $s_{Pr}$ . Für die Fraktionen der Schwefligen Säure ergeben sich ebenfalls gleichartige Schlussfolgerungen im Hinblick auf die Homogenität und die fehlende Eignung des Prüfgutes für die Parameter **Freie, Gebundene und Schweflige Säure** in der Laborvergleichsuntersuchung. Das Prüfgut ist somit **bis auf die genannten Parameter für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet** und wurde mit derselben Zusatzinformation versandt.

Von dem Prüfgut **FT19P05** wurden 252 Flaschen je 0,25 L in 21 Kartons mit je 12 Flaschen bezogen. Die Kartons wurden nummeriert und aus 12 durch Zufallsgenerator bestimmten Kartons je eine Flasche als Probe zur Homogenitätsprüfung gezogen. Wie bei den Prüfgütern FT19P04a und FT19P04b wurden zwei Serien von Doppelproben gebildet und in gleicher Weise für die analytischen Untersuchungen eingesetzt. Die Messergebnisse sind in Tabelle 7 und Tabelle 8 zusammengestellt.

**Tabelle 7: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P05, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Schweflige Säure		
		frei mg/L	gebunden mg/L	gesamt mg/L
1	15	28,65	155,2	183,9
2	2	28,13	154,2	182,3
3	9	30,73	156,3	187,0
4	1	27,60	153,1	180,7
5	17	29,69	160,4	190,1
6	19	29,69	157,3	187,0
7	8	29,69	159,4	189,1
8	11	30,21	157,3	187,5
9	4	29,69	157,3	187,0
10	5	29,17	156,3	185,4
11	13	29,69	158,3	188,0
12	6	31,25	158,3	189,6
13	6	30,73	155,2	185,9
14	13	29,17	155,2	184,4
15	5	29,17	154,2	183,3
16	11	30,73	156,3	187,0
17	8	30,21	158,3	188,5
18	2	29,17	156,3	185,4
19	19	29,69	158,3	188,0
20	9	31,25	158,3	189,6
21	17	30,21	158,3	188,5
22	4	30,21	157,3	187,5
23	15	30,21	157,3	187,5
24	1	28,65	155,2	183,9

Wie vorstehend für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b beschrieben wurden die Messergebnisse für das **Prüfgut FT19P05** zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Weder einzelne Messungen noch einzelne Proben zeigten jedoch wesentliche Ausreißermerkmale. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben bei den Parametern Gesamtextrakt, Gesamtsäure und Flüchtige Säure jeweils eine schwache Korrelation, die nur bei dem Parameter Gesamtsäure signifikant gesichert war. Bei diesem Parameter zeigt eine genauere Betrachtung der Graphik, dass tatsächlich eher innerhalb der Wiederholungsserien eine straffere Korrelation vorlag. Keine der Korrelationen der Messergebnisse zur Messfolge war jedoch so ausgeprägt, dass sie zu einem zu hohen Wert für den Quotienten  $s_r/s_z$  geführt hat. Schwache Korrelationen zur Probe-Nummer ergaben sich für die Parameter Glycerin, Gebundene und von dieser geprägt für Gesamte Schweflige Säure. Alle diese Korrelationen waren nur schwach signifikant ausgeprägt und bei der willkürlichen Folge der Nummerierung der Packungen ohne Aussagekraft für eine eventuell unterschiedliche Beschaffenheit des Prüfgutes in Abhängigkeit von der Füllreihenfolge.

**Tabelle 8: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P05, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Milch-säure	Flüchtige Säure
			g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	15	1,00572	85,13	50,97	22,11	5,00	16,60	6,05	3,76	6,81	1,62	4,85	0,29	0,56
2	2	1,00575	85,50	51,04	21,97	4,93	16,57	6,05	3,76	6,79	1,57	4,90	0,36	0,55
3	9	1,00576	85,40	50,90	21,94	4,79	16,64	6,07	3,76	6,78	1,55	4,93	0,37	0,55
4	1	1,00576	85,52	51,03	22,27	4,92	16,76	6,10	3,76	6,79	1,59	4,83	0,32	0,54
5	17	1,00569	85,31	50,89	22,11	4,87	16,63	5,90	3,76	6,79	1,59	4,84	0,35	0,55
6	19	1,00580	85,54	51,06	22,44	5,12	16,74	5,99	3,76	6,80	1,60	4,87	0,32	0,53
7	8	1,00574	85,63	51,05	22,18	4,93	16,62	5,93	3,77	6,81	1,57	4,92	0,35	0,54
8	11	1,00576	85,67	51,03	22,07	4,87	16,59	6,06	3,76	6,81	1,59	4,86	0,34	0,54
9	4	1,00573	85,77	51,08	22,03	4,96	16,54	6,05	3,76	6,83	1,56	4,91	0,39	0,54
10	5	1,00577	85,67	51,13	22,54	5,03	16,68	6,00	3,76	6,84	1,56	4,91	0,39	0,55
11	13	1,00577	85,57	51,07	22,10	4,94	16,69	6,07	3,76	6,82	1,59	4,91	0,36	0,53
12	6	1,00579	85,59	51,04	22,23	4,87	16,69	6,08	3,76	6,82	1,57	4,94	0,35	0,55
13	6	1,00571	84,98	50,96	22,16	4,81	16,73	6,08	3,76	6,78	1,62	4,83	0,29	0,56
14	13	1,00570	85,16	50,99	21,79	4,84	16,60	6,08	3,76	6,80	1,62	4,88	0,30	0,54
15	5	1,00575	85,51	51,15	22,29	5,07	16,65	6,07	3,77	6,81	1,60	4,87	0,33	0,54
16	11	1,00574	85,50	51,02	22,39	5,11	16,61	5,96	3,76	6,81	1,60	4,82	0,35	0,54
17	8	1,00579	85,65	51,12	22,28	4,86	16,75	5,96	3,76	6,81	1,56	4,92	0,35	0,54
18	2	1,00573	85,56	51,06	21,90	4,87	16,55	6,10	3,76	6,82	1,62	4,81	0,34	0,54
19	19	1,00575	85,46	51,04	22,31	4,78	16,73	6,01	3,75	6,81	1,57	4,89	0,36	0,54
20	9	1,00571	85,70	51,05	22,08	5,11	16,49	6,02	3,76	6,84	1,61	4,82	0,30	0,53
21	17	1,00578	85,66	51,11	22,28	4,92	16,71	6,04	3,76	6,82	1,58	4,90	0,32	0,53
22	4	1,00576	85,65	51,06	22,15	4,69	16,71	6,18	3,75	6,82	1,58	4,88	0,35	0,55
23	15	1,00574	85,71	51,04	22,22	4,93	16,64	6,05	3,76	6,84	1,59	4,88	0,33	0,53
24	1	1,00576	85,81	51,10	22,25	4,86	16,72	6,09	3,76	6,83	1,59	4,85	0,37	0,53

Die Ergebnisse der anschließenden varianzanalytischen Prüfungen sind in der Tabelle 9 zusammengefasst.

**Tabelle 9: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P05**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_i$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_i/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte FTIR	1,005748	24	0,3290	0,9622	0,000035		0,000132	0,265		0,000062
Vorh. Alkohol FTIR	85,53	24	0,5990	0,7977	0,2284		0,535	0,427		0,3015
Gesamtextrakt FTIR	51,04	24	0,9898	0,5033	0,0646		0,594	0,109		0,2457
Vergärbare Zucker FTIR	22,17	24	2,9996	<b>0,0359</b>	0,1247	0,1247	0,642	0,194	0,194	0,2821
Glucose FTIR	4,920	24	0,5067	0,8649	0,1264		0,176	<b>0,719</b>		0,1367
Fructose FTIR	16,65	24	1,9581	0,1318	0,0610	0,0422	0,492	0,124	0,086	0,2055
Glycerin FTIR	6,041	24	2,2049	0,0950	0,0491	0,0381	0,261	0,188	0,146	0,1141
pH-Wert	3,760	24	1,0909	0,4392	0,0041	0,0009	0,0476	0,086	0,018	0,0195
Gesamtsäure FTIR	6,812	24	0,3240	0,9641	0,0214		0,107	0,200		0,0473
Weinsäure FTIR	1,588	24	0,5535	0,8317	0,0238		0,084	0,284		0,0402
Äpfelsäure FTIR	4,876	24	0,6291	0,7745	0,0421		0,142	0,297		0,0690
Milchsäure FTIR	0,341	24	0,5350	0,8451	0,0319		0,023	<b>1,406</b>		0,0309
Flüchtige Säure FTIR	0,541	24	0,9209	0,5509	0,0090		0,0286	0,313		0,0142
Freie SO <sub>2</sub>	29,73	24	5,4327	<b>0,0035</b>	0,521	0,775	2,855	0,182	0,272	1,2430
Gebundene SO <sub>2</sub>	156,8	24	2,2053	0,0950	1,425	1,106	5,357	0,266	0,207	2,5226
Gesamte SO <sub>2</sub>	186,5	24	2,9210	<b>0,0393</b>	1,765	1,729	5,357	0,329	<b>0,323</b>	2,7006

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

Die Ergebnisse der Varianzanalyse zeigen, dass der für ihre Aussagekraft maßgebliche Höchstwert 0,5 des Quotienten  $s_i/s_z$  nur bei den Parametern Glucose und Milchsäure überschritten wurde, wobei zusätzlich zu berücksichtigen ist, dass der Mittelwert für den Parameter Milchsäure unterhalb des Anwendungsbereiches der Analysenmethode liegt. Die Messergebnisse dieses Parameters tragen somit ebenso wie die Messergebnisse für den Parameter Glucose nicht zur Entscheidung über eine ausreichende Homogenität des Prüfgutes bei. Schwach signifikante Unterschiede zwischen den Proben zeigt die Varianzanalyse für die Parameter Vergärbare Zucker und Gesamte Schweflige Säure. Letzterer Befund dürfte durch die signifikanten Unterschiede bei dem Parameter Freie Schweflige Säure bedingt sein. Der im Fall signifikanter Unterschiede zwischen den Proben weiterhin zu berücksichtigende Quotient  $s_{Pr}/s_z$  liegt nur bei dem Parameter Gesamte Schweflige Säure knapp über dem Höchstwert 0,3. Der für eine Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung entscheidende, nach Fearn und Thompson berechnete Maximalwert für die Standardabweichung zwischen den Proben  $s_{Pr}$  wird in keinem Fall überschritten. Damit ist das **Prüfgut FT19P05** – anders als die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b – für alle geprüften Parameter **ausreichend homogen** und im vollen Umfang für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

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

### 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT19P04a, FT19P04b und FT19P05

#### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT19P04a wird durch die in Tabelle 10, für das Prüfgut FT19P04b in Tabelle 11 und für das Prüfgut FT19P05 in Tabelle 12 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter beschrieben. Hinsichtlich der über die Legende hinausgehenden Erläuterungen zu den Tabellen und der prinzipiellen Interpretation der Daten wird auf Teil 1 des Berichtes verwiesen.

Nach den Daten in Tabelle 10 fanden sich unter den Ergebnissen mit herkömmlichen Methoden für das Prüfgut **FT19P04a** bei den 22 Datengruppen nur in fünf Datengruppen, respektive bei drei Parametern, Laborergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abwichen. Dies ist unauffällig. Auf typische Ursachen wird bei der Besprechung des Gesamtergebnisses für das Prüfgut FT19P05 eingegangen. Wegen eines Z-Scores im absoluten Betrag über 5 wurde bei zehn Datengruppen jeweils ein Laborergebnis ausgeschlossen. Drei Laborergebnisse wurden aus diesem Grund bei den Parametern Relative Dichte und Gesamtextrakt ausgeschlossen. Der höchste Anteil ausgeschlossener Laborergebnisse wurde mit vier von 19, entsprechend 21,1 % bei dem Parameter Acetat bei gemeinsamer Bewertung der Laborergebnisse für alle Analyseverfahren ausgeschlossen und gibt damit einen Hinweis auf analytische Probleme bei diesem Parameter, auf die im Abschnitt 4.1.2 des Teiles 1 des Berichtes eingegangen wird. Die höchstzulässige Ausschlussquote von 22,2 % wurde jedoch nicht erreicht. Bei Rundung auf jeweils eine Nachkommastelle lag der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der maßgeblichen Zielstandardabweichung ( $s_L/s_{Ziel}$ ) bei 11 der 22 Datengruppen unter bzw. erreichte den Wert 1,5 und befand sich damit im voll befriedigenden Bereich. Für weitere zehn aus der Tabelle 10 ersichtliche Datengruppen lag der Wert dieses Quotienten über 1,5 bis 2,0 und war damit mäßig erhöht. Der Höchstwert 2,0 wurde wie bei der Ausschlussquote bei gemeinsamer Auswertung der Ergebnisse aller Untersuchungsverfahren zum Parameter Acetat überschritten. Für die Bewertung der Laborleistung wurde dies jedoch nicht wirksam, da bei diesem Parameter eine getrennte Bewertung für die Ergebnisse automatisierter enzymatischer Verfahren und der zusammengefassten Ergebnisse der anderen Untersuchungsverfahren durchgeführt wurde. Erhöhte Werte von 0,4 oder 0,5 des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  und damit eine mäßig eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes ergaben sich bei 8 der 22 Datengruppen und damit infolge der geringen Anzahl an Laborergebnissen je Datengruppe auch für Datengruppen mit unauffälligen Werten des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$ . Der Höchstwert 0,5 des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  wurde mit der Folge zu großer Unsicherheit des Bezugswertes bei fünf Datengruppen überschritten. Für die Bewertung der Z-Scores der Laborergebnisse ist diese Unsicherheit bei zwei Datengruppen des Parameters Acetat relevant, während bei den anderen Parametern die maßgeblichen Z-Scores der Laborergebnisse auf der Grundlage von Datengruppen mit allenfalls mäßig eingeschränkter Zuverlässigkeit ermittelt wurden, wobei im Fall der Gesamten Äpfelsäure der Bezugswert zusätzlich durch den übereinstimmenden Median der Ergebnisse der L-Äpfelsäurebestimmung gestützt wird. Für **alle Parameter** wurden somit **gültige Z-Scores** erhalten.

**Tabelle 10: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT19P04a**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. s <sub>L</sub>	Labor-Stdfehler u <sub>M</sub>	Zielstandardabweichungen			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	28	25	0,99288	0,99287	0,000096	0,000019			0,000132	0,000190		0,72	0,50	0,14	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	10	10	112,91	113,12	0,824	0,261	3,141	0,535	0,886	0,26	1,54	0,93	0,49	0,29	
Gesamtextrakt (g/L)	24	21	29,35	29,30	0,640	0,140	0,997	0,594		0,64	1,08		0,24		
Vergärbare Zucker (g/L)	18	17	4,742	4,730	0,178	0,0433	0,212	0,171	0,584	0,84	1,05	0,31	0,25	0,07	
Glucose (g/L)	18	17	2,085	2,100	0,122	0,0297	0,106	0,100	0,408	1,15	1,23	0,30	0,30	0,07	
Fructose (g/L)	18	17	2,670	2,670	0,182	0,0441	0,130	0,115	0,330	1,40	1,58	0,55	0,38	0,13	
Glycerin (g/L)	10	10	6,699	6,665	0,256	0,0811	0,283		0,348	0,91		0,74	0,29	0,23	
pH-Wert	24	23	3,373	3,370	0,0785	0,0164		0,0476	0,0493		1,65	1,59	0,34	0,33	
Gesamtsäure (g/L)	26	26	7,095	7,055	0,166	0,0325	0,297	0,107	0,145	0,56	1,55	1,14	0,30	0,22	
Weinsäure (g/L)															
- nur HPLC	6 (1)	6	1,673	1,705	0,113	0,0459	0,0890		0,227	1,26		0,50	0,52	0,20	
- nur HPLC + Photometrie	14 (1)	14	1,761	1,770	0,152	0,0405	0,0919		0,227	1,65		0,67	0,44	0,18	
Flüchtige Säure (g/L)	11	11	0,3939	0,382	0,0243	0,0073	0,0250	0,0286	0,0891	0,97	0,85	0,27	0,26	0,08	
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- alle Verfahren ohne FTIR	19	15	0,3486	0,340	0,0501	0,0129	0,0226			2,22			0,57		
- enzymatisch, automatisiert	7	7	0,4195	0,435	0,0563	0,0213	0,0279			2,02			0,76		
- HPLC, enz., man. + NMR	10 (1)	9	0,3252	0,329	0,0406	0,0135	0,0220			1,84			0,61		
- enzymatisch, man. + NMR	7	7	0,3314	0,329	0,0271	0,0102	0,0220			1,23			0,46		
Gesamte Äpfelsäure (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	7	6	3,536	3,51	0,184	0,0751	0,164	0,107	0,218	1,12	1,72	0,84	0,70	0,34	
- enzymatisch + HPLC + NMR	12	11	3,504	3,50	0,157	0,0475	0,164	0,107	0,218	0,96	1,48	0,72	0,44	0,22	
L-Äpfelsäure (g/L)	15	14	3,495	3,53	0,0977	0,0261	0,165	0,108		0,59	0,91		0,24		
Gesamte Milchsäure (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	8 (2)	7	0,3407	0,350	0,0456	0,0173	0,0232		0,209	1,97		0,22	0,74	0,08	
- enzymatisch + HPLC + NMR	14 (2)	13	0,3458	0,345	0,0378	0,0105	0,0229		0,209	1,65		0,18	0,46	0,05	
L-Milchsäure (g/L)	13	13	0,1916	0,190	0,0483	0,0134	0,0138	0,0261		3,50	1,85		0,51		

**Erläuterungen zur Tabelle 10 bis zur Tabelle 12:****Labor-Stdabw. (s<sub>L</sub>)** = Standardabweichung der Ergebniswerte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz (s<sub>H</sub>)** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. herk. (s<sub>exp</sub>)** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (in der Regel OIV-Methoden)**Zielstdabw. exp. FTIR (s<sub>ü</sub>)** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient (s<sub>L</sub>/s<sub>H</sub>)** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient (s<sub>L</sub>/s<sub>exp</sub>)** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten**Quotient (s<sub>L</sub>/s<sub>ü</sub>)** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient u<sub>M</sub>/s<sub>Ziel</sub>** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden**Quotient u<sub>M</sub>/s<sub>ü</sub>** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

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

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

**Tabelle 11: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT19P04b**

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	29	28	1,00306	1,00305	0,000130	0,000025			0,000132	0,000190		0,99	0,69	0,19	0,13
Vorhandener Alkohol (g/L)	16	16	88,57	88,38	0,780	0,195	2,547	0,535	0,886		0,31	1,46	0,88	0,36	0,22
Gesamtextrakt (g/L)	23	23	46,57	46,60	0,438	0,0914	1,479	0,594			0,30	0,74		0,15	
Vergärbare Zucker (g/L)	18	18	21,12	21,18	0,679	0,160	0,757	0,615			0,90	1,11		0,26	
Glucose (g/L)	18 (1)	18	1,384	1,395	0,0824	0,0194	0,0751	0,0806	0,408		1,10	1,02	0,20	0,24	0,05
Fructose (g/L)	19	19	19,73	19,79	0,565	0,130	0,714	0,577			0,79	0,98		0,22	
Glycerin (g/L)	8	8	6,268	6,280	0,179	0,0633	0,269		0,348		0,66		0,51	0,23	0,18
pH-Wert	23	21	3,285	3,290	0,0659	0,0144		0,0476	0,0493			1,38	1,34	0,30	0,29
Gesamtsäure (g/L)	26	24	6,882	6,800	0,157	0,0321	0,288	0,107	0,145		0,55	1,47	1,09	0,30	0,22
Weinsäure (g/L)															
- nur HPLC + IC	7	6	2,862	2,890	0,148	0,0602	0,139		0,227		1,06		0,65	0,43	0,27
- herkömmliche Verfahren	18	17	2,985	2,960	0,180	0,0436	0,142		0,227		1,26		0,79	0,31	0,19
Flüchtige Säure (g/L)	12	11	0,3957	0,3800	0,0517	0,0156	0,0249	0,0286	0,0891		2,08	1,81	0,58	0,55	0,17
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- alle Verfahren ohne FTIR	20	20	0,3800	0,3905	0,0582	0,0130	0,0254				2,29			0,51	
- enzymatisch, automatisiert	11	11	0,4155	0,4050	0,0373	0,0112	0,0262				1,42			0,43	
- HPLC, enz., man. + NMR	9	8	0,3214	0,3213	0,0208	0,0073	0,0216				0,96			0,34	
- enzymatisch, man. + NMR	7	7	0,3216	0,3226	0,0224	0,0085	0,0216				1,04			0,39	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	7	7	2,524	2,550	0,144	0,0546	0,125	0,0827	0,218		1,15	1,75	0,66	0,66	0,25
- enzymatisch + HPLC + NMR	13	13	2,505	2,490	0,123	0,0342	0,123	0,0811	0,218		1,00	1,52	0,57	0,42	0,16
L-Äpfelsäure (g/L)	16 (1)	16	2,590	2,612	0,0936	0,0234	0,128	0,0842			0,73	1,11		0,28	
Gesamte Milchsäure (g/L)															
- s_Horwitz	7 (1)	7	0,2009	0,2000	0,0380	0,0144	0,0144		0,209		2,64		0,18	1,00	0,07
- s_experimentell	7 (1)	7	0,2009	0,2000	0,0380	0,0144	0,0144	0,0265	0,209		2,64	1,43	0,18	0,54	0,07
L-Milchsäure (g/L)	10	10	0,0428	0,0260	0,0293	0,0093	0,0025	0,0188			11,50	1,56		0,49	



Tabelle 12: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Roséweinprüfgut FT19P05

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	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	59	57	1,00548	1,00545	0,000139	0,000018			0,000132	0,000190		1,05	0,73	0,14	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	26	26	83,11	83,21	0,784	0,154	2,420	0,535	0,886		0,32	1,47	0,89	0,29	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	49 (1)	47	50,82	50,80	0,537	0,0783	1,591	0,594			0,34	0,90		0,13	
Vergärbare Zucker (g/L)	36	36	21,11	21,18	0,477	0,0795	0,757	0,615			0,63	0,78		0,13	
Glucose (g/L)	39	39	5,279	5,280	0,140	0,0224	0,233	0,185	0,408		0,60	0,75	0,34	0,12	0,05
Fructose (g/L)	39	39	15,91	16,00	0,431	0,0690	0,596	0,475			0,72	0,91		0,15	
Glycerin (g/L)	17	17	6,630	6,580	0,199	0,0482	0,280			0,348	0,71		0,57	0,17	0,14
pH-Wert	50	50	3,757	3,760	0,0746	0,0106			0,0476	0,0493		1,57	1,51	0,22	0,21
Gesamtsäure (g/L)	56	54	6,625	6,605	0,151	0,0205	0,281	0,107	0,145		0,54	1,41	1,04	0,19	0,14
Weinsäure (g/L)															
- nur HPLC + IC	13 (1)	13	1,516	1,460	0,123	0,0342	0,0780			0,227	1,58		0,54	0,44	0,15
- herkömmliche Verfahren	31 (1)	29	1,486	1,490	0,154	0,0286	0,0794			0,227	1,94		0,87	0,36	0,16
Flüchtige Säure (g/L)	25 (1)	24	0,4064	0,4050	0,0720	0,0147	0,0262	0,0286	0,0891	2,74	2,52	0,81	0,81	0,51	0,16
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- enzymatisch, automatisiert	20	20	0,3815	0,3700	0,0475	0,0106	0,0243				1,95			0,44	
- HPLC, enz., man. + NMR	14	13	0,2970	0,3000	0,0358	0,0099	0,0203				1,76			0,49	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	15	13	5,159	5,110	0,211	0,0585	0,226	0,148	0,218	0,93	1,43	0,97	0,97	0,40	0,27
L-Äpfelsäure (g/L)	31 (1)	31	5,277	5,280	0,262	0,0470	0,233	0,152		1,13	1,72			0,31	
Gesamte Milchsäure (g/L)	12 (3)	10	0,1785	0,1790	0,0267	0,0085	0,0131		0,209	2,04		0,13	0,13	0,64	0,04
L-Milchsäure (g/L)	24	24	0,0640	0,0505	0,0284	0,0058	0,0045	0,0199		6,35	1,43			0,29	
Reduktone (mg/L)	16 (4)	16	12,30	12,00	2,66	0,664	1,32			2,01				0,50	
Freie Schweflige Säure															
- Destillation+Photometrie	17 (1)	17	18,60	18,20	3,27	0,793	1,88				1,74			0,42	
- incl. Reduktone	40	40	28,21	29,00	4,24	0,670	2,80				1,52			0,24	
- excl. Reduktone	10	10	17,68	18,00	4,52	1,43	1,86	2,80		2,43	1,62			0,51	
- wie vor, Basis erweitert *)	17 (1)	17	16,96	17,00	3,94	0,955	1,78	2,80		2,22	1,41			0,34	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	28	25	171,94	174,00	8,95	1,79	12,81	5,36	12,81	0,70	1,67	0,70	0,70	0,33	0,14

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

Bei insgesamt 22 Datengruppen, die bei der Auswertung der Laborergebnisse zu dem Prüfgut **FT19P04b** gebildet wurden, lagen nur vier, um mehr als 50 % vom Median der jeweiligen Datengruppe abweichende Werte vor, von denen zwei bei dem Parameter Gesamte Milchsäure, die dasselbe Laborergebnis betreffen. Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wurde bei 17 Datengruppen eingehalten. Mäßig erhöhte Werte zwischen 1,6 und 2,0 ergaben sich für drei Datengruppen der Parameter Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und L-Milchsäure. Der Höchstwert 2,0 wurde nur in zwei Fällen bei den Parametern Acetat und Gesamte Milchsäure überschritten. Wie bei dem Prüfgut FT19P04a betraf dies bei dem Parameter Acetat das Ergebnis der gemeinsamen Auswertung der Ergebnisse aller Analysenverfahren und bei dem Parameter Gesamte Milchsäure die Auswertung auf der Basis der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung. Wie bereits in Teil 1 Abschnitt 4.3 des Berichtes bei der prüfgutübergreifenden Besprechung der Gesamtergebnisse für Gesamte Milchsäure und für Acetat bei der vorstehenden Besprechung des Gesamtergebnisses für das Prüfgut FT19P04a ausgeführt, hatte dies keine Auswirkungen auf die Bewertung der Laborergebnisse. Unauffällige Werte bis zu 0,3 des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  ergaben sich wiederum vor allem aufgrund der je Datengruppen geringen Ergebnisanzahl nur für zwölf Datengruppen. Mäßig erhöhte Werte von 0,4 bzw. 0,5 resultierten bei acht Datengruppen und der Höchstwert 0,5 wurde bei den Parametern Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure überschritten. Für die laborinterne Bewertung der Z-Scores der Laborergebnisse ist dieser Befund für den Parameter Gesamte Äpfelsäure aus den bei der Besprechung des Gesamtergebnisses für Prüfgut FT19P04a genannten Gründen nicht relevant, während die betroffene Datengruppe für den Parameter Gesamte Milchsäure der Bestimmung der Z-Scores der Laborergebnisse nicht zugrunde gelegt wurde. Auch bei diesem Prüfgut wurden mithin für **alle Parameter gültige Z-Scores** erhalten. Bei der laborinternen Bewertung der Z-Scores sowie vor deren Bewertung zu Lasten des Labors sind bei diesem und auch dem Prüfgut FT19P04a, die aufgrund der geringen Ergebnisanzahlen eingeschränkten Zuverlässigkeiten der Z-Scores zu beachten.

Unter einer Gesamtzahl von über 680 Laborergebnissen mit herkömmlichen Methoden zum **Prüfgut FT19P05**, wobei zu den Parametern Vorhandener Alkohol und Vergärbare Zucker nicht alle Laborergebnisse berücksichtigt wurden, und aus denen für die statistischen Auswertungen insgesamt 24 Datengruppen gebildet wurden, befanden sich 14 um mehr als 50 % vom Median abweichende Laborergebnisse, die bei allen statistischen Berechnungen unberücksichtigt blieben, aber durch Z-Scores bewertet wurden. Trifft dies nur für ein Laborergebnis je Datengruppe zu, zeigt die Erfahrung, dass häufig Übertragungsfehler oder eine Nichtberücksichtigung von Verdünnungsfaktoren vorliegen. Analytische Probleme sind hingegen typischerweise Ursache einer Häufung derartiger Laborergebnisse, so bei dem vorliegenden Prüfgut mit drei Ausschlüssen bei dem Parameter **Gesamte Milchsäure**, deren Gehalt an der unteren Grenze des Anwendungsbereiches der überwiegend eingesetzten Methode (HPLC) liegt und vier Ausschlüssen bei dem Parameter **Reduktone**. Bei beiden Datengruppen erreichte der Anteil ausgeschlossener Laborergebnisse mit 20 % gerade noch nicht den zulässigen Höchstanteil von 22,2%.

Nur bei der Hälfte der Datengruppen finden sich unauffällige Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  bis zu 1,5. Zwischen 1,5 und 2,0 liegt der Wert bei elf Parameterdatengruppen der Tabelle 12, wobei in sieben Fällen zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Bewertung der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden eingeschränkt ist, weil der Wert des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  über 0,3 liegt. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist wegen der geringen Ergebnisanzahl auch bei dem Parameter Gesamte Äpfelsäure eingeschränkt und bei dem Parameter Gesamte Milchsäure mit einem Wert des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  von 0,6 nicht gegeben. Der Höchstwert 2,0 für den Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wird bei den Ergebnissen für **Flüchtige Säure** überschritten. Zugleich liegt der Wert des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  bei 0,5. Daher werden für diesen Parameter **keine gültigen Z-Scores** erhalten und in der Tabelle 12 die nicht farbig markierten Werte sowie die Z-Scores im Abschnitt 6.11.1 grau dargestellt. Zusammenfassend ergeben sich aber auch für das **Prüfgut FT19P05** für die weit überwiegende Mehrzahl der Parameterdatengruppen **geeignete Bezugswerte und aussagekräftige Z-Scores**.

### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 des Berichtes begründet, wurden auch für die Proben FT19P04a, FT19P04b und FT19P05 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unterzogen, aber keine auf dieser Grundlage berechneten Z-Scores ausgewiesen. Hierbei werden die mit robusten statistischen Verfahren ermittelten, beschreibenden statistischen Kennzahlen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT19P04a in der Tabelle 13, für das Prüfgut FT19P04b in der Tabelle 14 und für das Prüfgut FT19P05 in der Tabelle 15 enthalten. Insgesamt bestätigen sich die im Abschnitt 5.3 des Teiles 1 und im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 des Berichtes angesprochenen Probleme und Schlussfolgerungen hinsichtlich der mangelnden Übereinstimmung der FTIR-Messergebnisse.

Alle drei Prüfgüter, deren Ergebnisse hier besprochen werden, weisen einen Gehalt an **Gesamter Milchsäure** an der Untergrenze des Anwendungsbereiches des FTIR-Verfahrens auf. Daher erfolgt die Darstellung der Daten für diese Prüfgut/Parameter-Kombination in den Tabellen 13 bis 15 in grauer Schriftfarbe und es werden in den Datentabellen der Abschnitte 4.14.4, 5.14.4 und 6.14.3 sowie in den Laborergebnismitteilungen für diese Parameter/Prüfgut-Kombinationen **keine Z-Scores** für die FTIR-Laborergebnisse ausgewiesen. Bei den anderen Parametern wird bei den Prüfgütern die Untergrenze des Anwendungsbereiches der Methode nicht erreicht.

**Tabelle 13: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT19P04a**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz $s_H$	Zielstdabw exp. FTIR $s_{FTIR}$	Quotient $s_L/s_H$	Quotient $s_L/s_{FTIR}$	Quotient $u_M/s_{FTIR}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	43	0,99348	0,993500	0,000437		0,000146		2,99	0,46
Vorhandener Alkohol (g/L)	45	111,547	111,400	1,527	3,100	0,739	0,49	2,07	0,31
Gesamtextrakt (g/L)	21	30,379	30,600	0,926	1,034	0,415	0,90	2,23	0,49
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	40	5,473	5,375	0,979	0,236	0,354	4,15	2,76	0,44
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	42	6,205	6,320	1,219	0,271	0,354	4,50	3,44	0,53
Glucose (g/L)	42	3,437	3,545	1,014	0,166	0,288	6,12	3,52	0,54
Fructose (g/L)	42	2,742	2,660	0,640	0,130	0,222	4,93	2,88	0,44
Glycerin (g/L)	34	6,389	6,315	0,467	0,271	0,265	1,72	1,76	0,30
pH-Wert	43	3,345	3,340	0,109		0,0188		5,79	0,88
Gesamtsäure (g/L)	44	7,495	7,470	0,209	0,312	0,0816	0,67	2,56	0,39
Weinsäure (g/L)	38	1,680	1,680	0,315	0,0879	0,132	3,58	2,38	0,39
Flüchtige Säure (g/L)	41	0,4713	0,4700	0,1037	0,0298	0,0427	3,48	2,43	0,38
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	37	3,983	4,030	0,472	0,185	0,0975	2,56	4,85	0,80
Gesamte Milchsäure (g/L)	28	0,4279	0,3600	0,3809	0,0237	0,0805	16,04	4,73	0,89

**Erläuterungen zu Tabelle 13 und Tabelle 14:**

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

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

**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{FTIR}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten (Vergleichsstandardabweichung aus der Methodvalidierung des FTIR-Verfahrens)

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

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

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

**Markierungen** wie in den Erläuterungen zu Tabelle 10 und Tabelle 11 beschrieben

**Tabelle 14: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT19P04b**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz $s_H$	Zielstdabw exp. FTIR $s_{FTIR}$	Quotient $s_L/s_H$	Quotient $s_L/s_{FTIR}$	Quotient $u_M/s_{FTIR}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	39	1,00335	1,003400	0,000315		0,000146		2,16	0,35
Vorhandener Alkohol (g/L)	40	87,691	87,745	1,292	2,531	0,739	0,51	1,75	0,28
Gesamtextrakt (g/L)	18	46,572	46,715	0,699	1,482	0,415	0,47	1,68	0,40
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	34	22,110	22,065	1,307	0,783	0,354	1,67	3,69	0,63
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	34	22,110	22,065	1,307	0,783	0,354	1,67	3,69	0,63
Glucose (g/L)	38	2,523	2,550	0,800	0,125	0,288	6,38	2,78	0,45
Fructose (g/L)	38	19,786	19,945	0,952	0,719	0,222	1,32	4,29	0,70
Glycerin (g/L)	29	5,785	5,800	0,700	0,252	0,265	2,78	2,64	0,49
pH-Wert	38	3,241	3,250	0,109		0,0188		5,81	0,94
Gesamtsäure (g/L)	40	6,985	6,965	0,193	0,294	0,0816	0,66	2,37	0,37
Weinsäure (g/L)	37	2,523	2,600	0,246	0,127	0,132	1,93	1,86	0,31
Flüchtige Säure (g/L)	36	0,5172	0,5100	0,1401	0,0319	0,0427	4,39	3,28	0,55
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	38	2,630	2,600	0,295	0,127	0,0975	2,32	3,03	0,49
Gesamte Milchsäure (g/L)	34	0,4921	0,5000	0,2777	0,0314	0,0805	8,84	3,45	0,59

**Tabelle 15: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roséweinprüfgut FT19P05**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz $s_H$	Zielstdabw exp. FTIR $s_{FTIR}$	Quotient $s_L/s_H$	Quotient $s_L/s_{FTIR}$	Quotient $u_M/s_{FTIR}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	80	1,00530	1,005345	0,000326		0,000146		2,23	0,25
Vorhandener Alkohol (g/L)	83	83,485	83,470	1,139	2,426	0,739	0,47	1,54	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	39	50,145	50,280	0,843	1,577	0,415	0,53	2,03	0,33
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	74	20,820	20,905	0,960	0,748	0,354	1,28	2,71	0,32
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	77	20,812	20,840	0,872	0,746	0,354	1,17	2,46	0,28
Glucose (g/L)	78	5,088	5,050	0,677	0,224	0,288	3,02	2,35	0,27
Fructose (g/L)	78	15,763	15,800	0,686	0,590	0,222	1,16	3,09	0,35
Glycerin (g/L).	62	6,267	6,270	0,738	0,269	0,265	2,74	2,79	0,35
pH-Wert	79	3,744	3,740	0,089		0,0188		4,73	0,53
Gesamtsäure (g/L)	82	6,676	6,700	0,199	0,285	0,0816	0,70	2,44	0,27
Weinsäure (g/L)	73	1,564	1,580	0,302	0,083	0,132	3,62	2,29	0,27
Flüchtige Säure (g/L)	75	0,4728	0,4700	0,1263	0,0298	0,0427	4,24	2,96	0,34
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	72	4,782	4,800	0,435	0,214	0,0975	2,03	4,46	0,53
Gesamte Milchsäure (g/L)	51	0,1969	0,2000	0,3402	0,0144	0,0805	23,60	4,23	0,59
Freie Schweflige Säure (mg/L)	28	23,21	23,50	4,53	2,34	4,46	1,94	1,02	0,19
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	28	160,97	156,75	15,27	11,72	5,36	1,30	2,85	0,54

Abschließend werden in der Tabelle 16 bis Tabelle 18 für die drei Prüfgüter die Abweichungen der Mediane der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und des FTIR-Verfahrens sowie die ihnen entsprechenden Z-Score-Werte auf der Basis der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen zusammengestellt. Wie stets für den Parameter **Gesamtextrakt** wird bei diesem Vergleich an deren Stelle die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden verwendet, weil deren Betrag numerisch größer ist als der Betrag der Übereinstimmungsstandardabweichung und sie auch für die Bewertung der Laborergebnisse angewendet wird. Dahingegen wird für die Bewertung der Differenz bei den Messergebnissen für **Vergärbare Zucker** und **Fructose** bei den Prüfgütern FT19P04b und FT19P05 die Übereinstimmungsstandardabweichung verwendet, während bei der Bewertung der FTIR-Laborergebnisse die im Betrag höhere Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden eingesetzt wurde.

**Tabelle 16: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse: Prüfgut FT19P04a**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel- StdAbw	Zü- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99350	0,99287	0,000630	0,000190	<b>3,32</b>
Vorhandener Alkohol (g/L)	111,40	113,11	-1,715	0,886	<b>-1,94</b>
Gesamtextrakt (g/L)	30,60	29,30	1,300	0,594	<b>2,19</b>
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	5,375	4,730	0,645	0,584	<b>1,10</b>
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	6,320	4,730	1,590	0,584	<b>2,72</b>
Glucose (g/L)	3,545	2,100	1,445	0,408	<b>3,54</b>
Fructose (g/L)	2,660	2,670	-0,010	0,330	-0,03
Glycerin (g/L)	6,315	6,665	-0,350	0,348	-1,01
pH-Wert	3,340	3,370	-0,030	0,049	-0,61
Gesamtsäure (g/L)	7,470	7,055	0,415	0,145	<b>2,86</b>
Weinsäure (g/L)	1,680	1,770	-0,090	0,227	-0,40
Flüchtige Säure (g/L)	0,470	0,382	0,088	0,089	0,99
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	4,030	3,495	0,535	0,218	<b>2,45</b>
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,360	0,345	0,015	0,209	0,07

**Tabelle 17: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse: Prüfgut FT19P04b**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel- StdAbw	Zü- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00340	1,00305	0,000350	0,000190	<b>1,84</b>
Vorhandener Alkohol (g/L)	89,25	88,38	0,875	0,886	0,99
Gesamtextrakt (g/L)	46,72	46,60	0,115	0,594	0,19
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	22,06	21,17	0,890	0,584	<b>1,52</b>
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	22,23	21,17	1,055	0,584	<b>1,81</b>
Glucose (g/L)	2,550	1,395	1,155	0,408	<b>2,83</b>
Fructose (g/L)	19,95	19,79	0,155	0,330	0,47
Glycerin (g/L)	5,800	6,280	-0,480	0,348	<b>-1,38</b>
pH-Wert	3,250	3,290	-0,040	0,049	-0,81
Gesamtsäure (g/L)	6,965	6,800	0,165	0,145	<b>1,14</b>
Weinsäure (g/L)	2,600	2,960	-0,360	0,227	<b>-1,59</b>
Flüchtige Säure (g/L)	0,5100	0,3800	0,130	0,089	<b>1,46</b>
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	2,600	2,490	0,110	0,218	0,50
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,5000	0,2000	0,300	0,209	<b>1,44</b>

Die erhaltenen Z-Scores zeigen an, in welchem Ausmaß die "mittleren" Ergebnisse beider Gruppen verschieden sind bzw. inwieweit sich bei den Ergebnissen des FTIR-Verfahrens Mat-

rixeffekte auf die im Vergleich mit den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsmethoden erhaltenen Z-Scores auswirken. Entsprechen die systematischen Matrixeffekte einem absoluten Z-Scorebetrag unter 1 so sind sie für die Praxis und die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse nicht relevant. Bei den Prüfgütern **FT19P04a** und **FT19P04b** liegt dieser  $Z_{\bar{U}}$ -Score für acht bzw. neun Parameter über 1,0 davon für bei dem Prüfgut FT19P04a bei sieben und bei dem Prüfgut FT19P04b bei fünf Parameter sogar über 1,5 und zeigen damit erhebliche Differenzen an. Es erscheint plausibel, dass gealtertes Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen nicht ausreichend vertreten war. Dies hat zur Folge, dass die Matrixeinflüsse durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen werden.

Dahingegen zeigen beim Prüfgut **FT19P05** die  $Z_{\bar{U}}$ -Scores der Mediane im Wesentlichen keine beachtenswerten Matrixeffekte an, wenn auch bei den Parametern Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Schweflige Säure mäßig erhöhte Werte vorliegen und bei dem Parameter Freie Schweflige Säure der  $Z_{\bar{U}}$ -Score über 1,5 liegt. Die FTIR-Laborergebnisse für dieses Prüfgut sind also abgesehen von den genannten Parametern gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen im Hinblick auf eine einwandfreie Gerätefunktion und korrekte Probenbehandlung geeignet.

**Tabelle 18: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse: Prüfgut FT19P05**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel-StdAbw	$Z_{\bar{U}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,005345	1,00545	-0,000105	0,000190	-0,55
Vorhandener Alkohol (g/L)	83,47	83,21	0,260	0,886	0,29
Gesamtextrakt (g/L)	50,28	50,80	-0,520	0,594	-0,88
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	20,91	21,18	-0,275	0,584	-0,47
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	20,84	21,18	-0,340	0,584	-0,58
Glucose (g/L)	5,050	5,280	-0,230	0,408	-0,56
Fructose (g/L)	15,80	16,00	-0,200	0,330	-0,61
Glycerin (g/L)	6,270	6,580	-0,310	0,348	-0,89
pH-Wert	3,740	3,760	-0,020	0,049	-0,41
Gesamtsäure (g/L)	6,700	6,605	0,095	0,145	0,66
Weinsäure (g/L)	1,580	1,490	0,090	0,227	0,40
Flüchtige Säure (g/L)	0,4700	0,405	0,065	0,089	0,73
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	4,800	5,110	-0,310	0,218	-1,42
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,2000	0,1790	0,021	0,209	0,10
Freie Schweflige Säure (mg/L)	23,50	18,20	5,30	1,882	2,82
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	156,75	174,00	-17,25	12,807	-1,35

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

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P04a

### 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	0,99283	-0,000040	-0,30	
03	LwK 8.4	0,99289	0,000020	0,15	
06	LwK 8.4	0,99285	-0,000020	-0,15	
09	LwK 8.4	0,99294	0,000070	0,53	
12	LwK 8.4	0,99280	-0,000070	-0,53	
14	LwK 8.4	0,99300	0,000130	0,98	
21	LwK 8.4	0,99300	0,000130	0,98	
22	LwK 8.4	0,99288	0,000010	0,08	
25	LwK 8.4	0,99286	-0,000010	-0,08	
27	LwK 8.4	0,99287	0,000000	0,00	
31	LwK 8.4	0,99292	0,000050	0,38	
37	LwK 8.3	0,99279	-0,000080	-0,61	
39	LwK 8.4	0,99288	0,000010	0,08	
40	LwK 8.4	0,99272	-0,000150	-1,14	
45	LwK 8.4	0,99292	0,000050	0,38	
46	LwK 8.4	0,99285	-0,000020	-0,15	
48	LwK 8.4	0,99290	0,000030	0,23	
50	LwK 8.4	0,99285	-0,000020	-0,15	
52	LwK 8.4	0,99285	-0,000022	-0,17	
56	LwK 8.4	0,99279	-0,000080	-0,61	
60	LwK 8.4	0,99290	0,000030	0,23	
64	LwK 8.4	0,99274	-0,000130	-0,98	
65	LwK 8.4	0,98170	-0,011170	-84,62	(**)
68	LwK 8.4	0,99400	0,001130	8,56	(**)
75	LwK 8.4	0,99280	-0,000070	-0,53	
83	LwK 8.2	0,99320	0,000330	2,50	
87	LwK 8.4	0,99287	0,000000	0,00	
106	LwK 8.4	0,98040	-0,012470	-94,47	(**)

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

#### 4.1.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	25
Minimalwert	0,98040	0,99272
Mittelwert	0,992071	0,992876
Median	0,992865	0,992870
Maximalwert	0,99400	0,99320
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,003126	0,000096
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,000591	0,000019
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	23,68	0,72
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	16,45	0,50
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	4,48	0,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	3,11	0,10



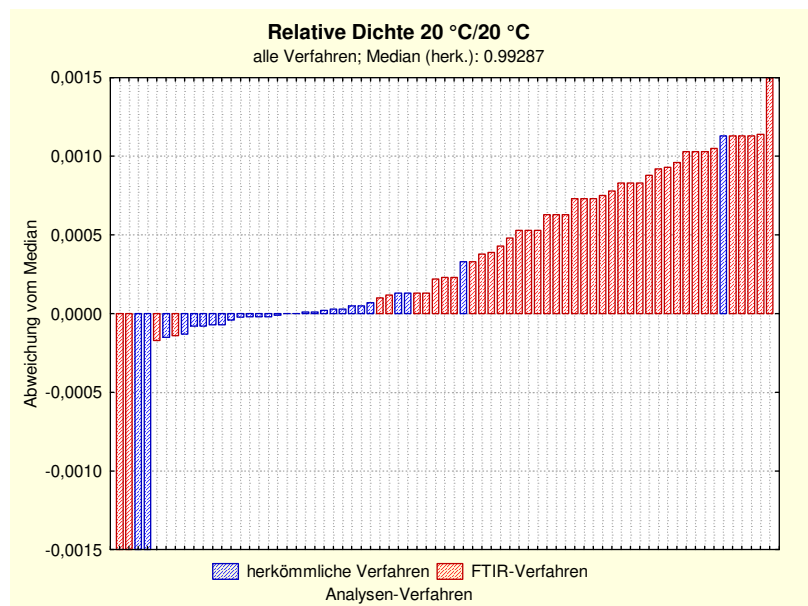
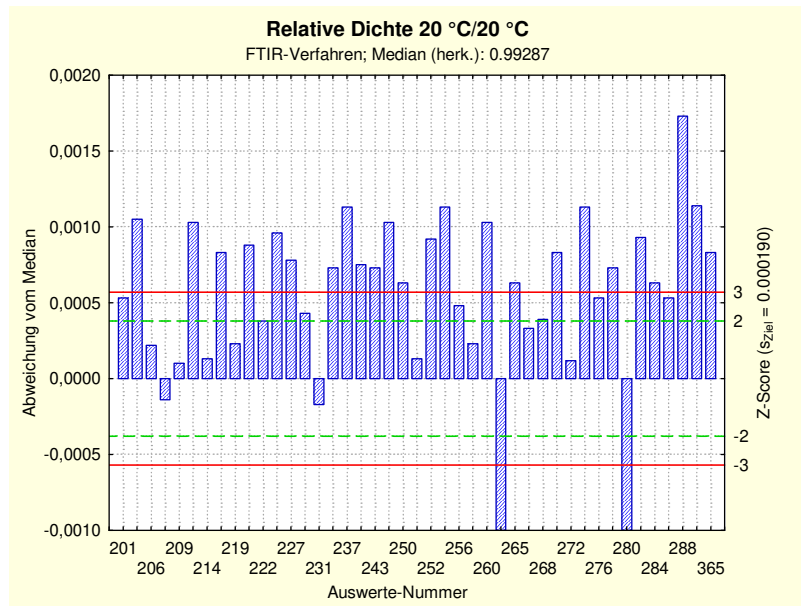
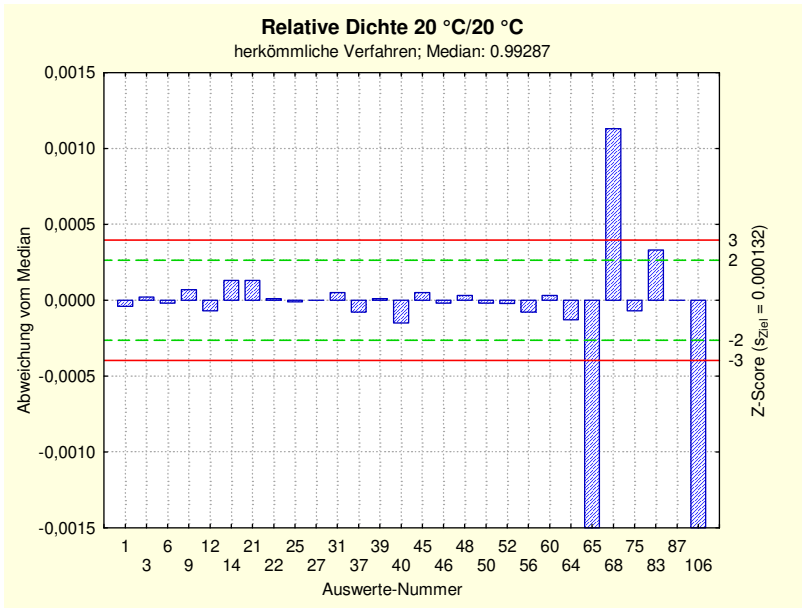
### 4.1.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99340	0,000530	2,79	
203	FTIR	0,99392	0,001050	5,53	(***)
206	FTIR	0,99309	0,000220	1,16	
208	FTIR	0,99273	-0,000140	-0,74	
209	FTIR	0,99297	0,000100	0,53	
212	FTIR	0,99390	0,001030	5,42	(***)
214	FTIR	0,99300	0,000130	0,68	
216	FTIR	0,99370	0,000830	4,37	
219	FTIR	0,99310	0,000230	1,21	
221	FTIR	0,99375	0,000880	4,63	
222	FTIR	0,99325	0,000380	2,00	
225	FTIR	0,99383	0,000960	5,05	(***)
227	FTIR	0,99365	0,000780	4,11	
228	FTIR	0,99330	0,000430	2,26	
231	FTIR	0,99270	-0,000170	-0,89	
235	FTIR	0,99360	0,000730	3,84	
237	FTIR	0,99400	0,001130	5,95	(***)
240	FTIR	0,99362	0,000750	3,95	
243	FTIR	0,99360	0,000730	3,84	
245	FTIR	0,99390	0,001030	5,42	(***)
250	FTIR	0,99350	0,000630	3,32	
251	FTIR	0,99300	0,000130	0,68	
252	FTIR	0,99379	0,000920	4,84	
254	FTIR	0,99400	0,001130	5,95	(***)
256	FTIR	0,99335	0,000480	2,53	
258	FTIR	0,99310	0,000230	1,21	
260	FTIR	0,99390	0,001030	5,42	(***)
264	FTIR	0,92750	-0,065370	-344,05	(***)
265	FTIR	0,99350	0,000630	3,32	
267	FTIR	0,99320	0,000330	1,74	
268	FTIR	0,99326	0,000390	2,05	
271	FTIR	0,99370	0,000830	4,37	
272	FTIR	0,99299	0,000118	0,62	
275	FTIR	0,99400	0,001130	5,95	(***)
276	FTIR	0,99340	0,000530	2,79	
279	FTIR	0,99360	0,000730	3,84	
280	FTIR	0,94000	-0,052870	-278,26	(***)
283	FTIR	0,99380	0,000930	4,89	
284	FTIR	0,99350	0,000630	3,32	
287	FTIR	0,99340	0,000530	2,79	
288	FTIR	0,99460	0,001730	9,11	(***)
337	FTIR	0,99401	0,001140	6,00	(***)
365	FTIR	0,99370	0,000830	4,37	

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

### 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	1	0,99283	
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99320	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	0,99279	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	25	0,99286	0,000092
	herkömmliche Verfahren	28	0,99286	0,000095
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	43	0,99348	0,000437



## 4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 4.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	113,20	0,085	0,03	0,16	
03	LwK 2.9	113,92	0,805	0,26	1,50	
06	LwK 2.9	112,87	-0,245	-0,08	-0,46	
09	LwK 2.1	113,75	0,635	0,20	1,19	
12	LwK 2.9	113,70	0,585	0,19	1,09	
14	LwK 2.9	113,67	0,555	0,18	1,04	
21	LwK 2.7	113,00	-0,115	-0,04	-0,21	
22	LwK 2.9	113,50	0,385	0,12	0,72	
25	LwK 2.9	113,26	0,145	0,05	0,27	
27	LwK 2.5	109,40	-3,715	-1,18	-6,94	(**)
31	LwK 2.9	113,00	-0,115	-0,04	-0,21	
37	LwK 2.2	113,80	0,685	0,22	1,28	
39	LwK 2.4	113,10	-0,015	-0,00	-0,03	
40	LwK 2.4	113,30	0,185	0,06	0,35	
45	LwK 2.9	112,70	-0,415	-0,13	-0,78	
46	LwK 2.5	110,70	-2,415	-0,77	-4,51	
48	LwK 2.4	111,90	-1,215	-0,39	-2,27	
50	LwK 2.9	113,50	0,385	0,12	0,72	
52	LwK 2.9	113,80	0,685	0,22	1,28	
56	LwK 2.9	113,00	-0,115	-0,04	-0,21	
60	LwK 2.1	111,70	-1,415	-0,45	-2,64	
64	LwK 2.1	111,94	-1,175	-0,37	-2,20	
65	LwK 2.5	112,35	-0,765	-0,24	-1,43	
68	LwK 2.1	114,20	1,085	0,35	2,03	
75	LwK 2.9	115,10	1,985	0,63	3,71	
83	LwK 2.2	116,70	3,585	1,14	6,70	(**)
87	LwK 2.9	113,33	0,220	0,07	0,41	
92	LwK 2.4	113,13	0,015	0,00	0,03	
97	LwK 2.1	112,90	-0,215	-0,07	-0,40	
106	LwK 2.5	112,46	-0,655	-0,21	-1,22	
111	NMR	111,28	-1,830	-0,58	-3,42	
112	NMR	109,31	-3,810	-1,21	-7,12	(***)
113	NMR	113,70	0,584	0,19	1,09	
114	NMR	108,65	-4,461	-1,42	-8,34	(***)
116	NMR	108,02	-5,098	-1,62	-9,53	(***)

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

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

### 4.2.2 Deskriptive Ergebnisse

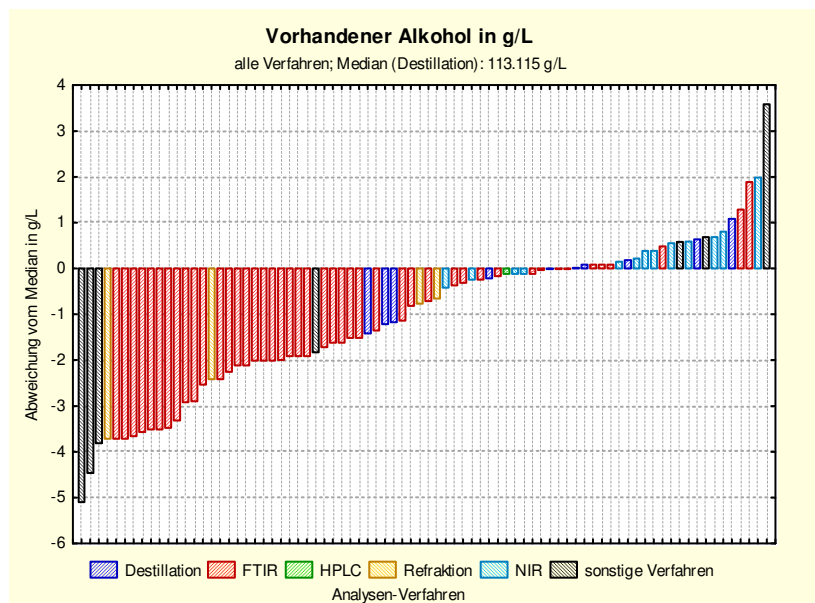
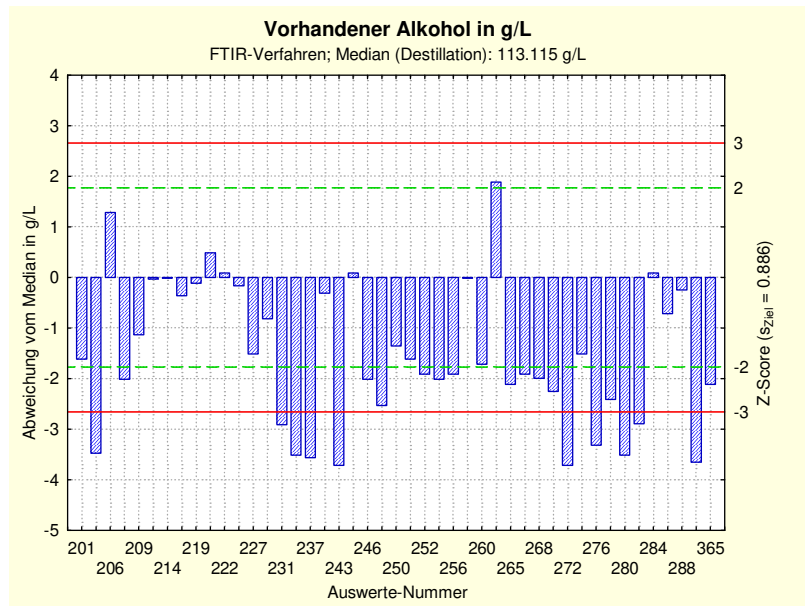
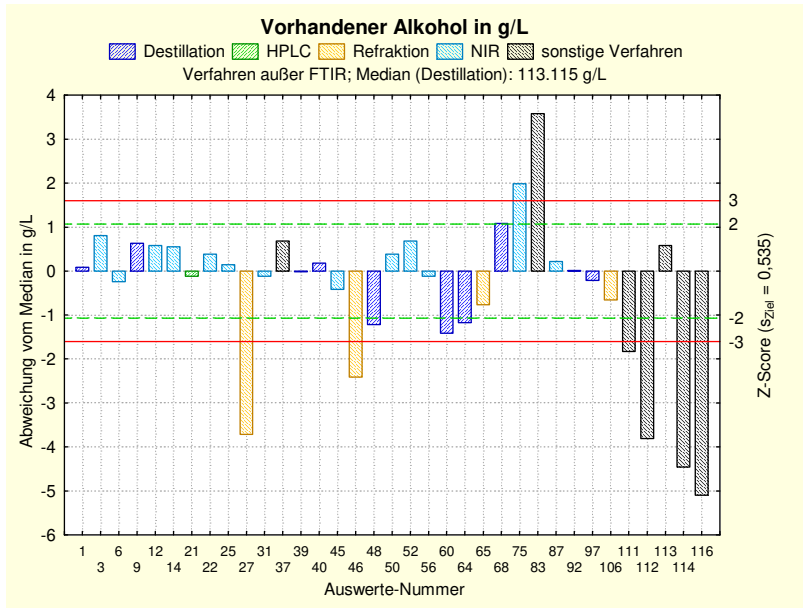
Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	10
Minimalwert	111,70
Mittelwert	112,912
Median	113,115
Maximalwert	114,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,824
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,261
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	3,141
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,26
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,54
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,93
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,49
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,29

**4.2.3 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	111,50	-1,615	-0,51	-1,82	
203	LwK 2.8	109,64	-3,475	-1,11	-3,92	
206	LwK 2.8	114,40	1,285	0,41	1,45	
208	LwK 2.8	111,10	-2,015	-0,64	-2,27	
209	LwK 2.8	111,98	-1,135	-0,36	-1,28	
212	LwK 2.8	113,08	-0,035	-0,01	-0,04	
214	LwK 2.8	113,10	-0,015	-0,00	-0,02	
216	LwK 2.8	112,75	-0,365	-0,12	-0,41	
219	LwK 2.8	113,00	-0,115	-0,04	-0,13	
221	LwK 2.8	113,60	0,485	0,15	0,55	
222	LwK 2.8	113,20	0,085	0,03	0,10	
225	LwK 2.8	112,95	-0,165	-0,05	-0,19	
227	LwK 2.8	111,60	-1,515	-0,48	-1,71	
228	LwK 2.8	112,30	-0,815	-0,26	-0,92	
231	LwK 2.8	110,20	-2,915	-0,93	-3,29	
235	LwK 2.8	109,60	-3,515	-1,12	-3,97	
237	LwK 2.8	109,55	-3,565	-1,14	-4,02	
240	LwK 2.8	112,80	-0,315	-0,10	-0,36	
243	LwK 2.8	109,40	-3,715	-1,18	-4,19	
245	LwK 2.8	113,20	0,085	0,03	0,10	
246	LwK 2.8	111,10	-2,015	-0,64	-2,27	
248	LwK 2.8	110,58	-2,535	-0,81	-2,86	
250	LwK 2.8	111,76	-1,355	-0,43	-1,53	
251	LwK 2.8	111,50	-1,615	-0,51	-1,82	
252	LwK 2.8	111,20	-1,915	-0,61	-2,16	
254	LwK 2.8	111,10	-2,015	-0,64	-2,27	
256	LwK 2.8	111,20	-1,915	-0,61	-2,16	
258	LwK 2.8	113,10	-0,015	-0,00	-0,02	
260	LwK 2.8	111,40	-1,715	-0,55	-1,94	
264	LwK 2.8	115,00	1,885	0,60	2,13	
265	LwK 2.8	111,00	-2,115	-0,67	-2,39	
267	LwK 2.8	111,20	-1,915	-0,61	-2,16	
268	LwK 2.8	111,12	-1,995	-0,64	-2,25	
271	LwK 2.8	110,86	-2,255	-0,72	-2,55	
272	LwK 2.8	109,40	-3,715	-1,18	-4,19	
275	LwK 2.8	111,60	-1,515	-0,48	-1,71	
276	LwK 2.8	109,80	-3,315	-1,06	-3,74	
279	LwK 2.8	110,70	-2,415	-0,77	-2,73	
280	LwK 2.8	109,60	-3,515	-1,12	-3,97	
283	LwK 2.8	110,22	-2,895	-0,92	-3,27	
284	LwK 2.8	113,20	0,085	0,03	0,10	
287	LwK 2.8	112,40	-0,715	-0,23	-0,81	
288	LwK 2.8	112,87	-0,245	-0,08	-0,28	
337	LwK 2.8	109,46	-3,655	-1,16	-4,13	
365	LwK 2.8	111,00	-2,115	-0,67	-2,39	

**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	6	112,96	1,117
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	4 10	112,89 112,97	0,663 0,851
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	115,25	2,325
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	4	111,27	1,578
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, z.B. n. Heidger	1	113,00	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	45	111,55	1,527
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	13	113,42	0,495
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	110,14	2,519



### 4.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 4.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
03	LwK 3.3	29,75	0,45	0,45	0,76	
06	LwK 3.3	29,10	-0,20	-0,20	-0,34	
09	LwK 3.3	29,70	0,40	0,40	0,67	
12	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 3.3	30,40	1,10	1,10	1,85	
21	LwK 3.3	24,70	-4,60	-4,61	-7,74	(**)
22	LwK 3.3	29,40	0,10	0,10	0,17	
25	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 3.3	28,20	-1,10	-1,10	-1,85	
31	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
37	LwK 3.3	29,20	-0,10	-0,10	-0,17	
39	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 3.3	28,90	-0,40	-0,40	-0,67	
45	LwK 3.3	24,40	-4,90	-4,92	-8,25	(**)
48	LwK 3.3	29,00	-0,30	-0,30	-0,51	
50	LwK 3.3	29,30	0,00	0,00	0,00	
52	LwK 3.3	29,50	0,20	0,20	0,34	
56	LwK 3.3	29,00	-0,30	-0,30	-0,51	
60	LwK 3.2	28,60	-0,70	-0,70	-1,18	
64	LwK 3.2	28,70	-0,60	-0,60	-1,01	
68	LwK 3.2	32,70	3,40	3,41	5,72	(**)
75	LwK 3.3	29,70	0,40	0,40	0,67	
83	LwK 3.3	31,30	2,00	2,01	3,37	

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

#### 4.3.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	29,60	0,30	0,30	0,51	
203	FTIR (gemessen)	31,58	2,28	2,29	3,84	
208	FTIR (gemessen)	27,70	-1,60	-1,60	-2,69	
214	k. A.	29,40	0,10	0,10	0,17	
216	FTIR (gemessen)	30,79	1,49	1,49	2,51	
221	FTIR (gemessen)	33,30	4,00	4,01	6,73	(***)
227	FTIR (gemessen)	30,48	1,18	1,18	1,99	
237	FTIR (gemessen)	30,83	1,53	1,53	2,58	
240	FTIR (gemessen)	30,50	1,20	1,20	2,02	
251	FTIR (gemessen)	31,00	1,70	1,71	2,86	
252	dens/FTIR	31,00	1,70	1,71	2,86	
254	FTIR (gemessen)	30,60	1,30	1,30	2,19	
258	LwK 3.3 (herk.)	29,90	0,60	0,60	1,01	
260	FTIR-Basis	31,20	1,90	1,91	3,20	
264	FTIR (gemessen)	29,40	0,10	0,10	0,17	
265	FTIR (gemessen)	30,40	1,10	1,10	1,85	
268	FTIR (gemessen)	30,19	0,89	0,89	1,50	
271	FTIR (gemessen)	29,30	0,00	0,00	0,00	
272	FTIR (gemessen)	28,60	-0,70	-0,70	-1,18	
275	FTIR (gemessen)	31,20	1,90	1,91	3,20	
279	FTIR (gemessen)	30,80	1,50	1,50	2,53	
280	k. A.	31,00	1,70	1,71	2,86	
283	FTIR (gemessen)	27,70	-1,60	-1,60	-2,69	
284	FTIR (gemessen)	30,60	1,30	1,30	2,19	
287	FTIR (gemessen)	30,70	1,40	1,40	2,36	
288	k. A.	33,73	4,43	4,44	7,46	(***)
337	FTIR (gemessen)	30,88	1,58	1,58	2,66	

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

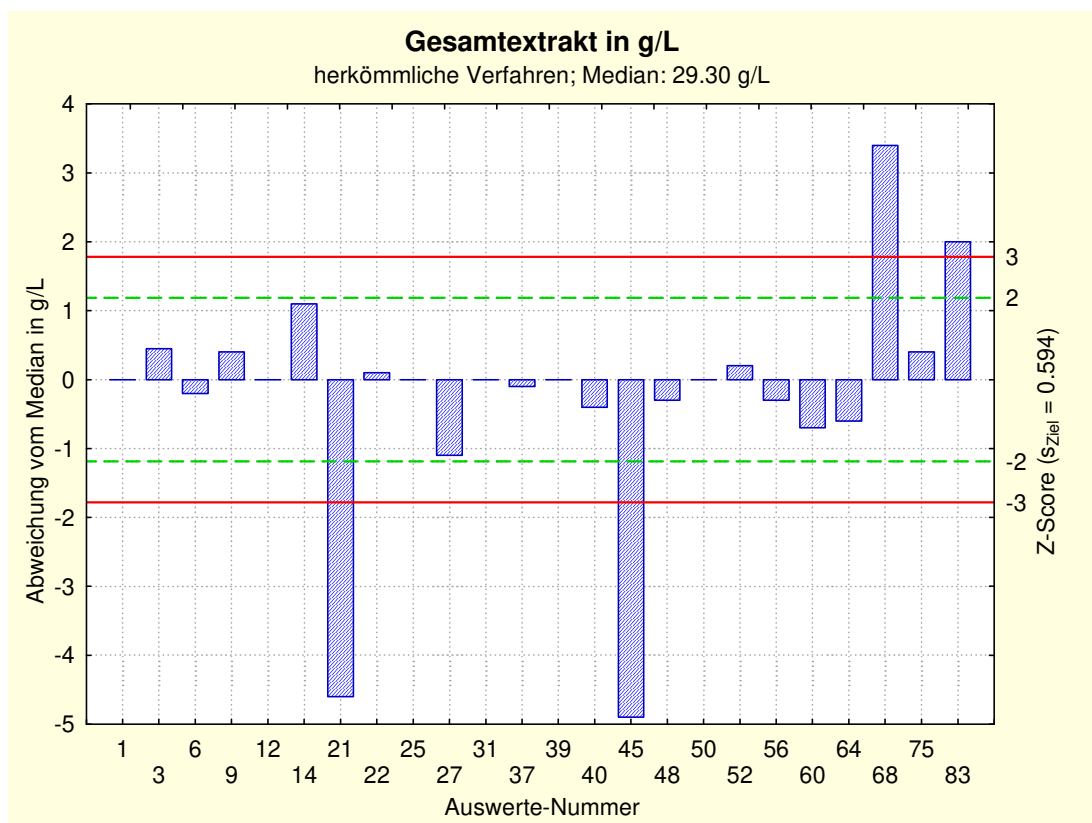
### 4.3.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	21
Minimalwert	24,4	28,2
Mittelwert	29,09	29,35
Median	29,30	29,30
Maximalwert	32,7	31,3
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,666	0,640
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,340	0,140
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,997	0,997
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,67	0,64
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,81	1,08
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(2,95)	(1,13)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,34	0,14
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,57	0,24
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(0,60)	(0,25)

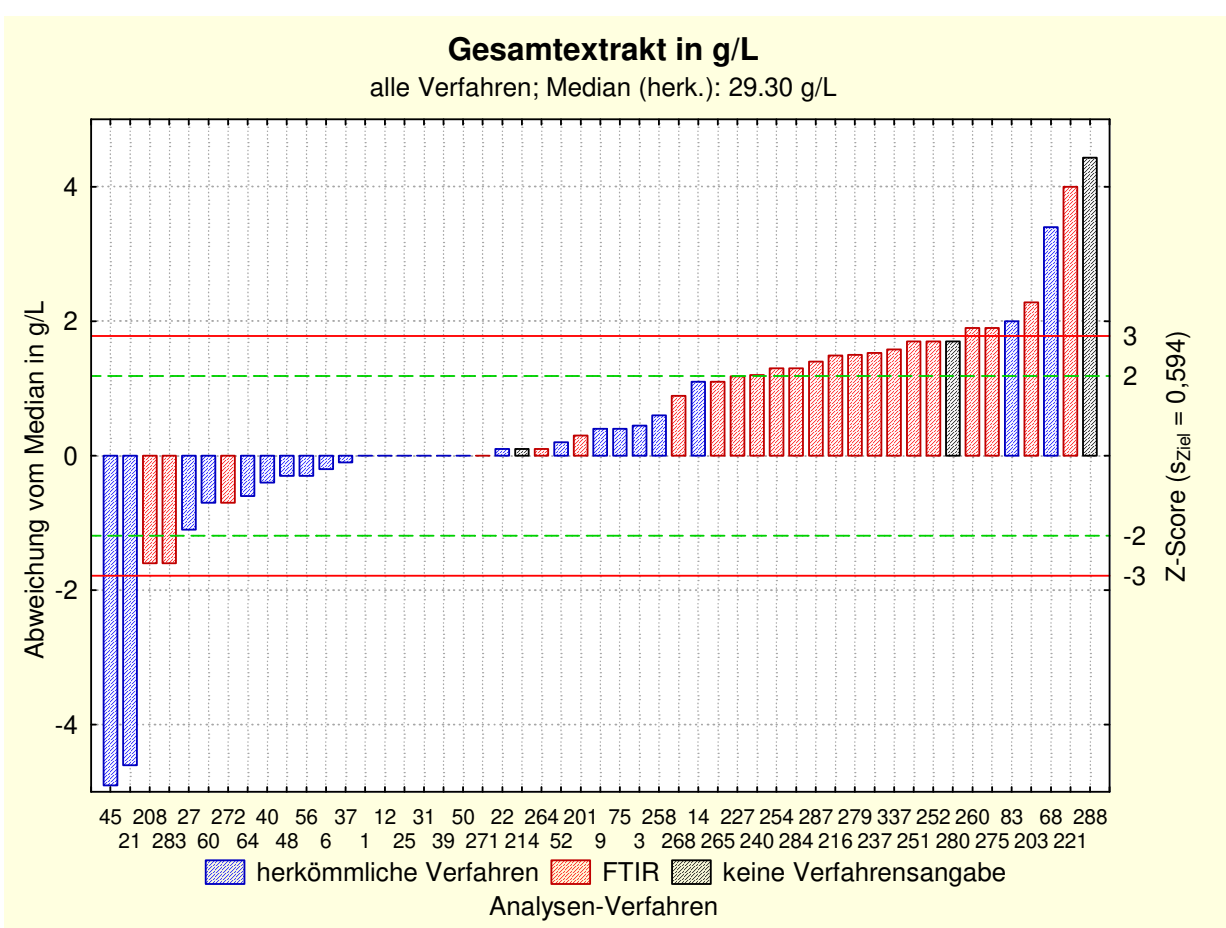
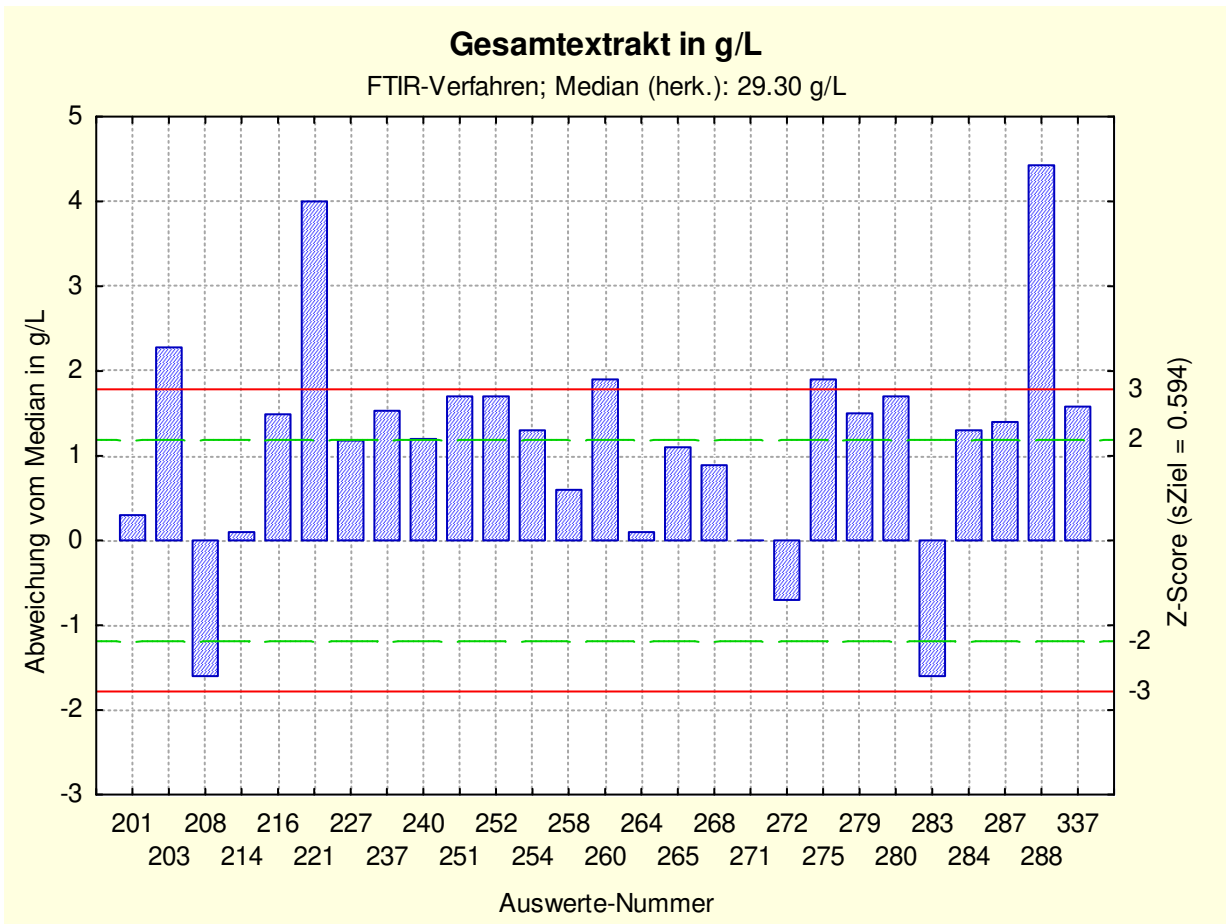
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.

### 4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	3	29,812	2,282
LwK 3.3 (herk.)	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	21	29,271	0,479
		24	29,242	0,630
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	21	30,379	0,926
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von densitometr. Dichte + FTIR-Alkohol	1	31,000	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	1	31,200	
k. A.	keine Verfahrensangabe	3	31,377	2,483









## 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	4,76	0,030	0,14	0,18	
06	LwK 4.5	4,73	0,000	0,00	0,00	
09	LwK 4.7	4,75	0,020	0,09	0,12	
12	LwK 4.5	4,70	-0,030	-0,14	-0,18	
14	LwK 4.5	4,70	-0,030	-0,14	-0,18	
21	LwK 4.7	4,64	-0,090	-0,42	-0,53	
22	LwK 4.7	4,80	0,070	0,33	0,41	
25	LwK 4.5	4,76	0,030	0,14	0,18	
27	LwK 4.4	5,75	1,020	4,82	5,98	(***)
31	LwK 4.5	5,20	0,470	2,22	2,75	
37	LwK 4.3	2,63	-2,100	-9,92	-12,31	(***)
39	LwK 4.7	4,82	0,090	0,42	0,53	
40	LwK 4.5	5,01	0,284	1,34	1,66	
45	LwK 4.5	4,60	-0,130	-0,61	-0,76	
48	LwK 4.5	4,51	-0,220	-1,04	-1,29	
50	LwK 4.5	2,93	-1,800	-8,50	-10,55	(**)
52	LwK 4.5	4,53	-0,200	-0,94	-1,17	
56	LwK 4.5	4,73	0,000	0,00	0,00	
60	LwK 4.4	5,35	0,620	2,93	3,63	
64	LwK 4.5	4,88	0,150	0,71	0,88	
65	LwK 4.4	4,90	0,170	0,80	1,00	
68	LwK 4.4	3,90	-0,830	-3,92	-4,86	
75	LwK 4.4	5,00	0,270	1,27	1,58	
80	LwK 4.4	5,20	0,470	2,22	2,75	
83	LwK 4.3	4,26	-0,470	-2,22	-2,75	
97	LwK 4.7	4,49	-0,240	-1,13	-1,41	
106	LwK 4.4	4,70	-0,030	-0,14	-0,18	
111	NMR	4,71	-0,023	-0,11	-0,14	
112	NMR	4,78	0,053	0,25	0,31	
113	NMR	3,25	-1,484	-7,01	-8,70	(***)
114	NMR	6,02	1,295	6,11	7,59	(***)
115	NMR	4,82	0,085	0,40	0,50	
116	NMR	4,93	0,195	0,92	1,15	

(\*\*) 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.

### 4.4.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch	
	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	17
Minimalwert	2,93	4,49
Mittelwert	4,641	4,742
Median	4,730	4,730
Maximalwert	5,20	5,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,461	0,178
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,109	0,043
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,212	0,212
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,171	0,171
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,584	0,584
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,18	0,84
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,70	1,05
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,79	0,30
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,51	0,20
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,64	0,25
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,19	0,07

**4.4.3 FTIR-Laboregebnisse (wie mitgeteilt)**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
206	LwK 4.8	4,50	-0,230	-1,09	-0,39	
208	LwK 4.8	4,29	-0,440	-2,08	-0,75	
209	LwK 4.8	5,05	0,320	1,51	0,55	
212	LwK 4.8	5,26	0,530	2,50	0,91	
214	LwK 4.8	5,00	0,270	1,27	0,46	
216	LwK 4.8	5,47	0,740	3,49	1,27	
219	LwK 4.8	6,70	1,970	9,30	3,37	
222	LwK 4.8	5,31	0,580	2,74	0,99	
225	LwK 4.8	7,35	2,620	12,37	4,49	
227	LwK 4.8	5,63	0,900	4,25	1,54	
228	LwK 4.8	5,16	0,430	2,03	0,74	
231	LwK 4.8	8,90	4,170	19,69	7,14	(***)
235	LwK 4.8	6,40	1,670	7,89	2,86	
237	LwK 4.8	4,83	0,100	0,47	0,17	
240	LwK 4.8	5,86	1,130	5,34	1,93	
243	LwK 4.8	4,90	0,170	0,80	0,29	
245	LwK 4.8	6,11	1,380	6,52	2,36	
246	LwK 4.8	5,10	0,370	1,75	0,63	
248	LwK 4.8	4,62	-0,110	-0,52	-0,19	
250	LwK 4.8	4,30	-0,430	-2,03	-0,74	
251	LwK 4.8	4,76	0,030	0,14	0,05	
252	LwK 4.8	5,56	0,830	3,92	1,42	
254	LwK 4.8	5,80	1,070	5,05	1,83	
256	LwK 4.8	6,20	1,470	6,94	2,52	
258	LwK 4.8	5,55	0,820	3,87	1,40	
260	LwK 4.8	5,60	0,870	4,11	1,49	
264	LwK 4.8	4,45	-0,280	-1,32	-0,48	
265	LwK 4.8	7,10	2,370	11,19	4,06	
267	LwK 4.8	3,70	-1,030	-4,86	-1,76	
268	LwK 4.8	5,44	0,710	3,35	1,22	
271	LwK 4.8	5,89	1,160	5,48	1,99	
272	LwK 4.8	4,70	-0,030	-0,14	-0,05	
275	LwK 4.8	5,71	0,980	4,63	1,68	
276	LwK 4.8	5,30	0,570	2,69	0,98	
279	LwK 4.8	4,10	-0,630	-2,97	-1,08	
280	LwK 4.8	7,18	2,450	11,57	4,20	
283	LwK 4.8	5,20	0,470	2,22	0,80	
284	LwK 4.8	6,80	2,070	9,77	3,54	
337	LwK 4.8	4,70	-0,030	-0,14	-0,05	
365	LwK 4.8	7,50	2,770	13,08	4,74	

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

**4.4.4 FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)****(Summe aus FTIR-Glucose und FTIR-Fructose, vom Auswerter berechnet)**

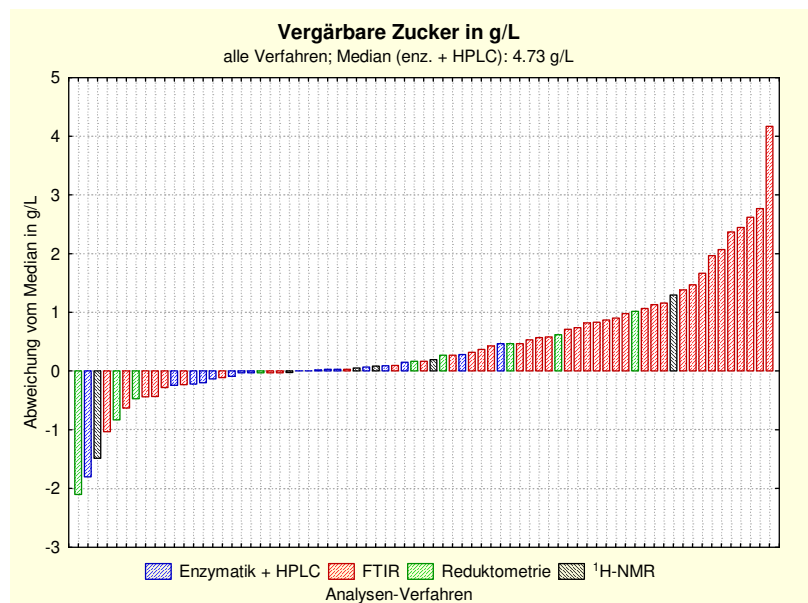
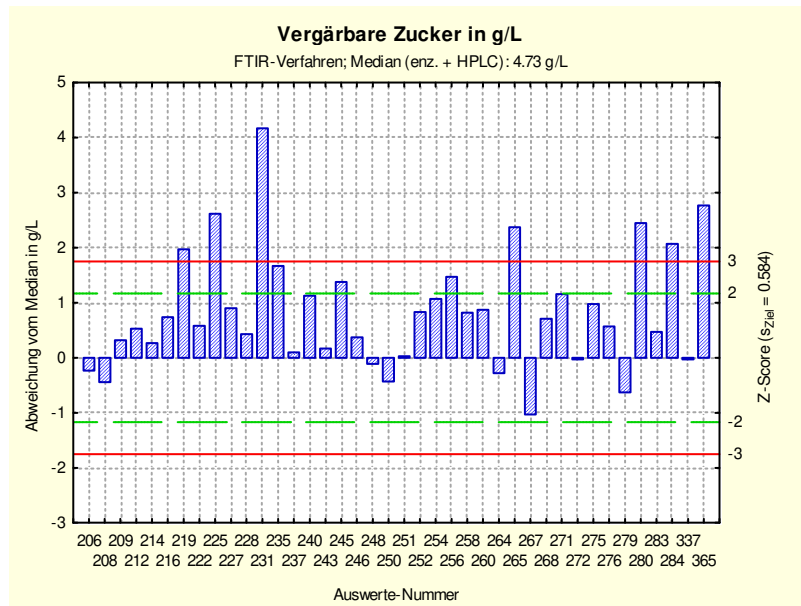
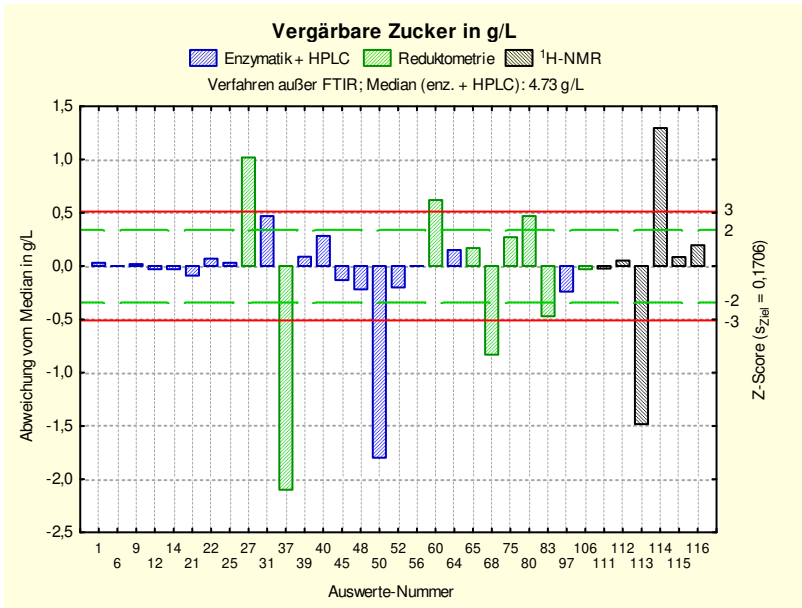
Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung

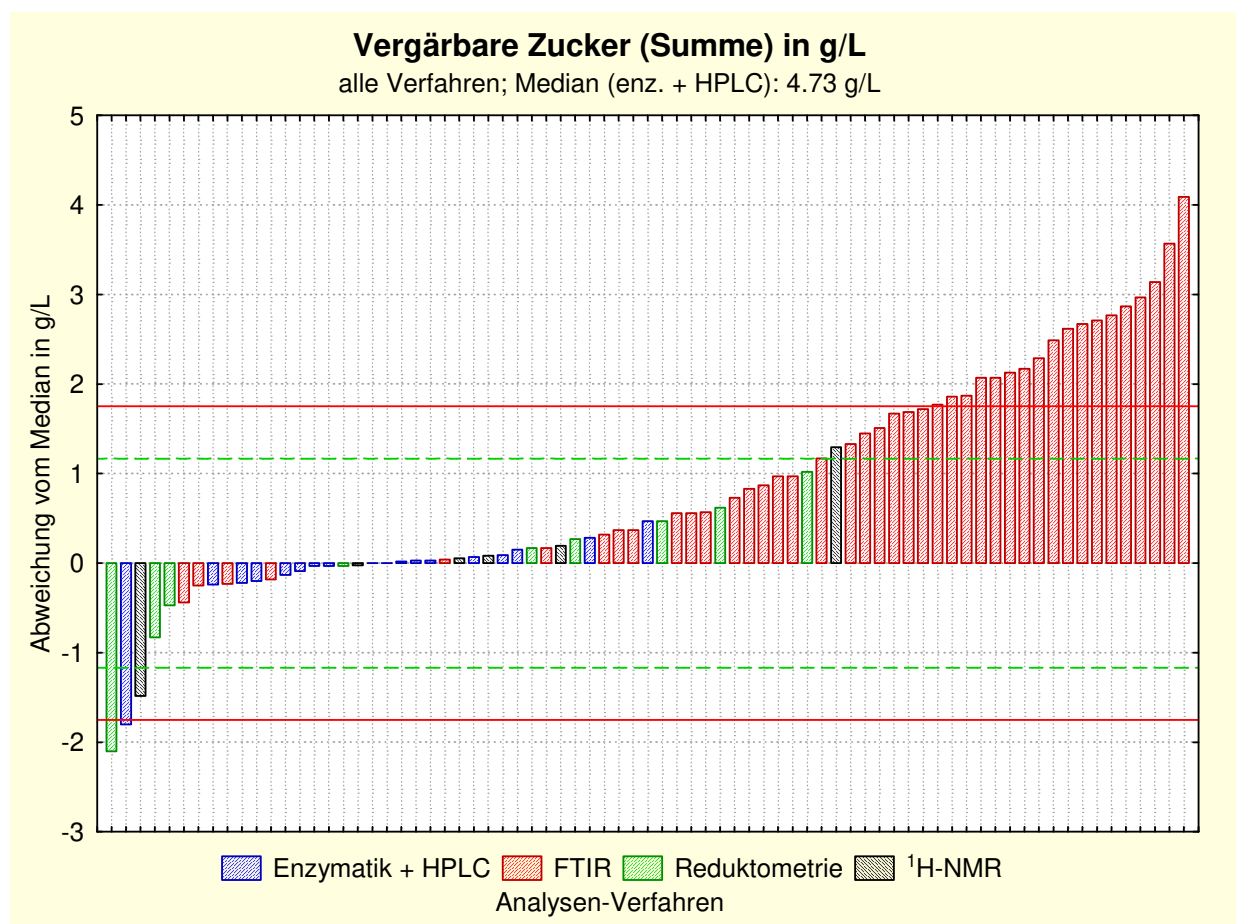
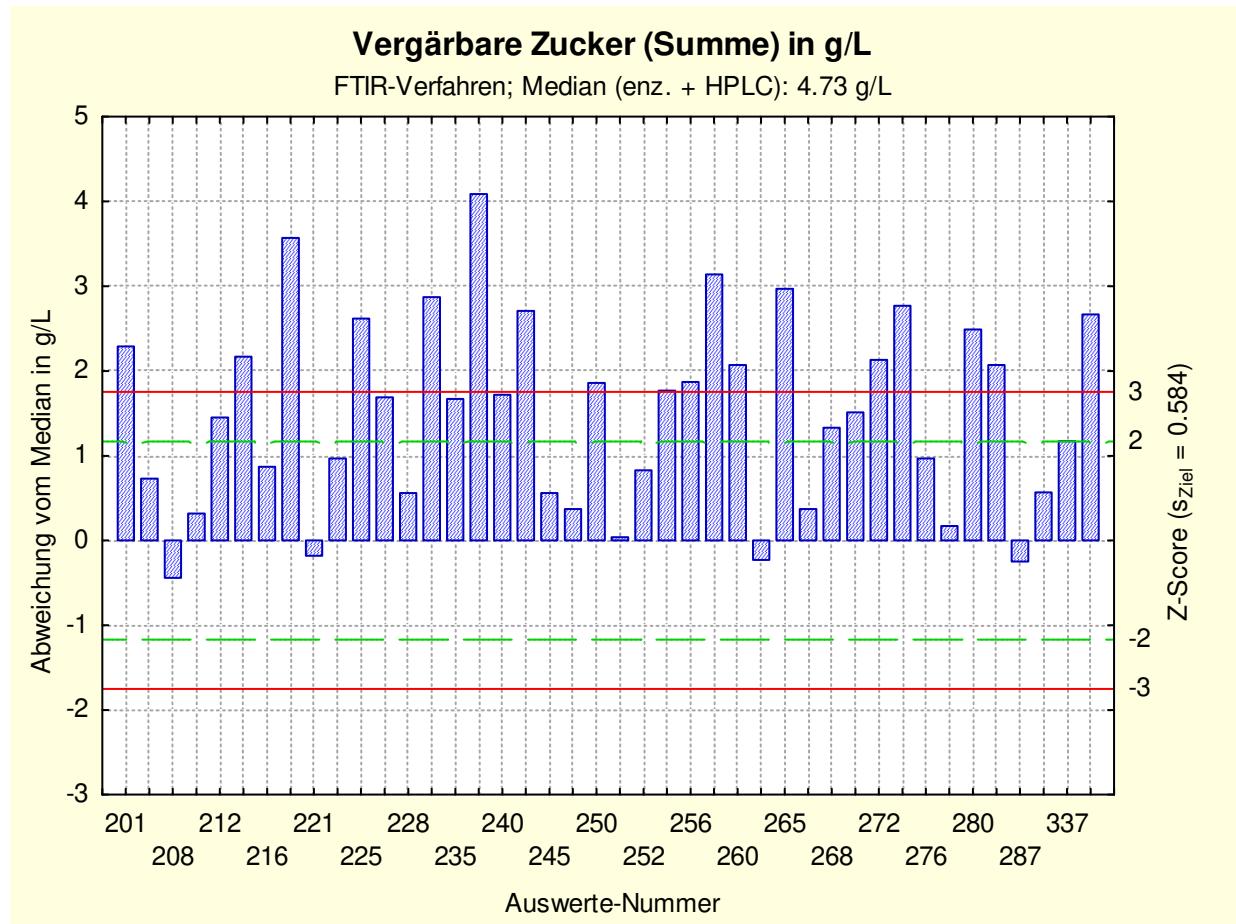
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	7,02	2,290	10,81	3,92	
203	LwK 4.8	5,46	0,730	3,45	1,25	
208	LwK 4.8	4,29	-0,440	-2,08	-0,75	
209	LwK 4.8	5,05	0,320	1,51	0,55	
212	LwK 4.8	6,18	1,450	6,85	2,48	
214	LwK 4.8	6,90	2,170	10,25	3,72	
216	LwK 4.8	5,60	0,870	4,11	1,49	
219	LwK 4.8	8,30	3,570	16,86	6,11	(***)
221	LwK 4.8	4,55	-0,180	-0,85	-0,31	
222	LwK 4.8	5,70	0,970	4,58	1,66	
225	LwK 4.8	7,35	2,620	12,37	4,49	
227	LwK 4.8	6,42	1,690	7,98	2,89	
228	LwK 4.8	5,29	0,560	2,64	0,96	
231	LwK 4.8	7,60	2,870	13,55	4,91	
235	LwK 4.8	6,40	1,670	7,89	2,86	
237	LwK 4.8	8,82	4,090	19,31	7,00	(***)
240	LwK 4.8	6,45	1,720	8,12	2,95	
243	LwK 4.8	7,44	2,710	12,80	4,64	
245	LwK 4.8	5,29	0,560	2,64	0,96	
246	LwK 4.8	5,10	0,370	1,75	0,63	
250	LwK 4.8	6,59	1,860	8,78	3,18	
251	LwK 4.8	4,77	0,040	0,19	0,07	
252	LwK 4.8	5,56	0,830	3,92	1,42	
254	LwK 4.8	6,50	1,770	8,36	3,03	
256	LwK 4.8	6,60	1,870	8,83	3,20	
258	LwK 4.8	7,87	3,140	14,83	5,38	(***)
260	LwK 4.8	6,80	2,070	9,77	3,54	
264	LwK 4.8	4,50	-0,230	-1,09	-0,39	
265	LwK 4.8	7,70	2,970	14,02	5,09	(***)
267	LwK 4.8	5,10	0,370	1,75	0,63	
268	LwK 4.8	6,06	1,330	6,28	2,28	
271	LwK 4.8	6,24	1,510	7,13	2,59	
272	LwK 4.8	6,86	2,130	10,06	3,65	
275	LwK 4.8	7,50	2,770	13,08	4,74	
276	LwK 4.8	5,70	0,970	4,58	1,66	
279	LwK 4.8	4,90	0,170	0,80	0,29	
280	LwK 4.8	7,22	2,490	11,76	4,26	
284	LwK 4.8	6,80	2,070	9,77	3,54	
287	LwK 4.8	4,48	-0,250	-1,18	-0,43	
288	LwK 4.8	5,30	0,570	2,69	0,98	
337	LwK 4.8	5,90	1,170	5,52	2,00	
365	LwK 4.8	7,40	2,670	12,61	4,57	

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

**4.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	3,445	1,307
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	7	5,001	0,540
	reduktometrische Verfahren	9	4,729	0,818
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	13	4,719	0,209
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	5	4,700	0,154
	enzymatische und HPLC-Verfahren	18	4,714	0,163
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (mitgeteiltes Ergebnis)	40	5,473	0,979
	Basis: Vergärbare Zucker (Summe aus FIR-Glucose und FTIR-Fructose, nachberechnet)	42	6,205	1,219
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	4,750	1,001





## 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	2,10	0,000	0,00	0,00	
03	enzymat., autom.	2,10	0,000	0,00	0,00	
09	HPLC	2,32	0,220	2,07	2,21	
12	enzymat., autom.	2,10	0,000	0,00	0,00	
14	enzymat., autom.	2,69	0,590	5,55	5,92	(**)
21	HPLC	1,86	-0,240	-2,26	-2,41	
22	HPLC	2,00	-0,100	-0,94	-1,00	
25	enzymat., autom.	2,12	0,020	0,19	0,20	
31	enzymat., autom.	2,09	-0,012	-0,11	-0,12	
39	HPLC	2,04	-0,060	-0,56	-0,60	
40	enzymat., autom.	2,18	0,076	0,72	0,76	
45	enzymat., autom.	2,10	0,000	0,00	0,00	
48	enzymat., autom.	2,02	-0,081	-0,76	-0,81	
50	enzymat., autom.	2,23	0,130	1,22	1,31	
52	enzymat., autom.	2,05	-0,050	-0,47	-0,50	
56	enzymat., autom.	2,12	0,020	0,19	0,20	
64	enzymat., autom.	2,21	0,110	1,04	1,10	
97	HPLC	1,82	-0,280	-2,64	-2,81	
111	NMR	2,43	0,326	3,06	3,27	
112	NMR	2,45	0,355	3,34	3,56	
113	NMR	0,92	-1,184	-11,15	-11,89	(*)
114	NMR	3,26	1,158	10,90	11,63	(*)
115	NMR	2,18	0,076	0,72	0,77	
116	NMR	2,55	0,445	4,19	4,47	

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

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

### 4.5.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	17
Minimalwert	1,82	1,82
Mittelwert	2,119	2,085
Median	2,100	2,100
Maximalwert	2,69	2,32
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,185	0,122
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,044	0,030
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,106	0,106
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,100	0,100
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,408	0,408
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,75	1,15
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,86	1,23
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,45	0,30
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,41	0,28
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,44	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,11	0,07

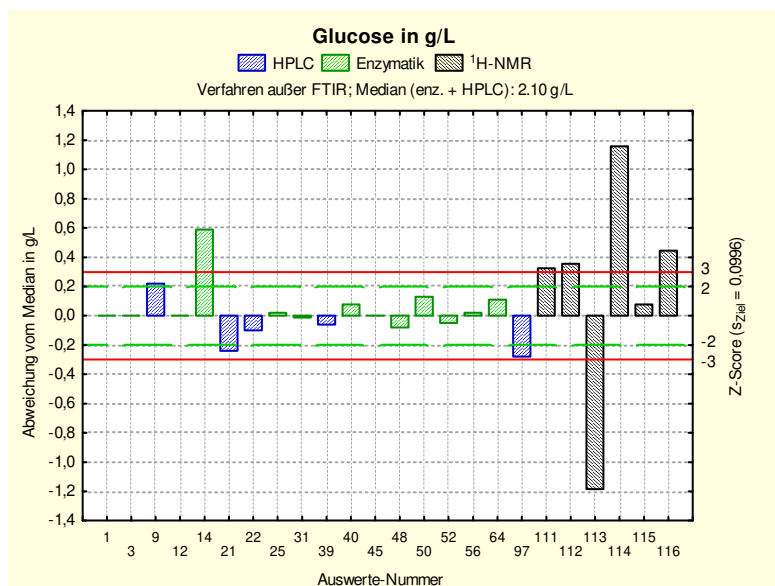
### 4.5.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;			
	OIV-MA-AS311-03	5	2,006	0,220
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	12	2,129	0,079
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	1	2,100	
	herkömmliche Verfahren	18	2,104	0,117
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	42	3,437	1,014
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	2,350	0,705

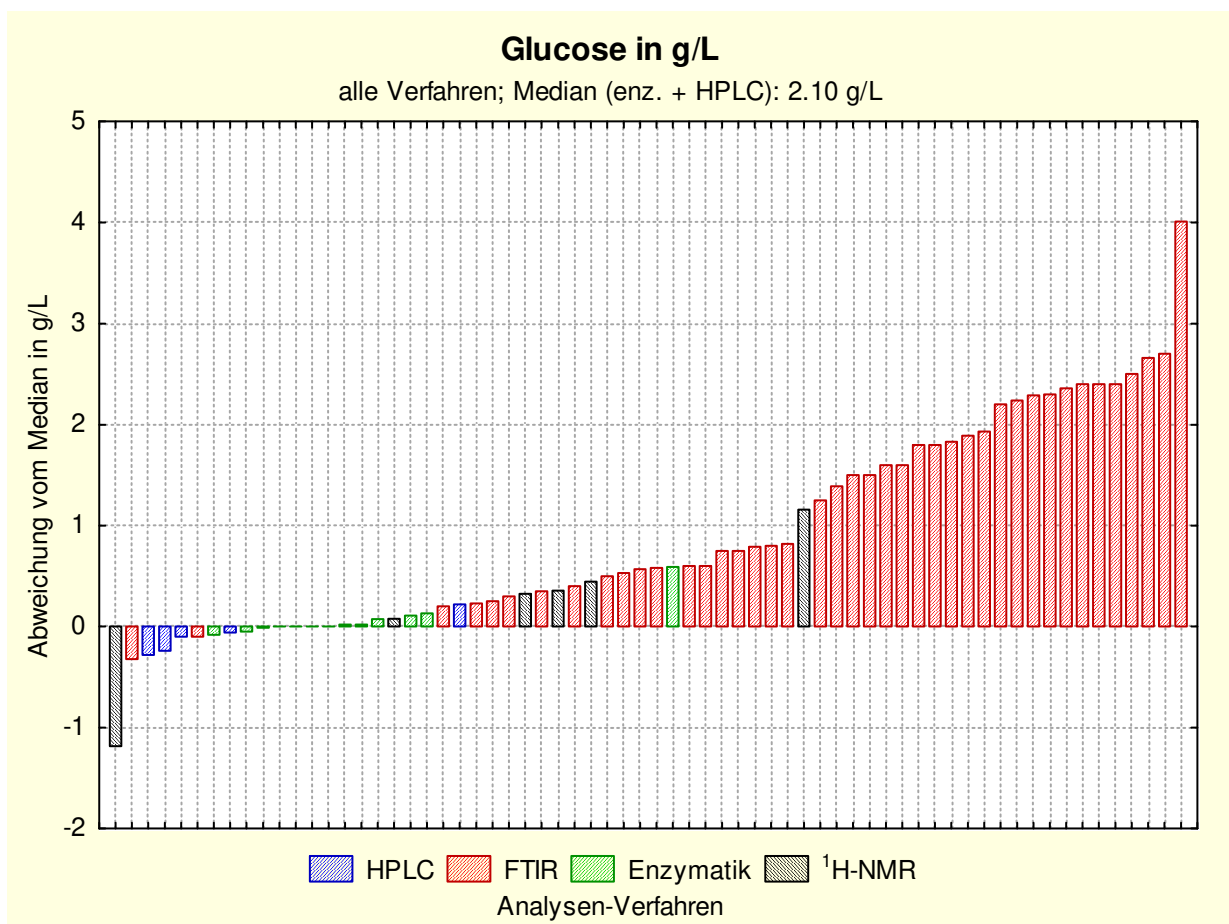
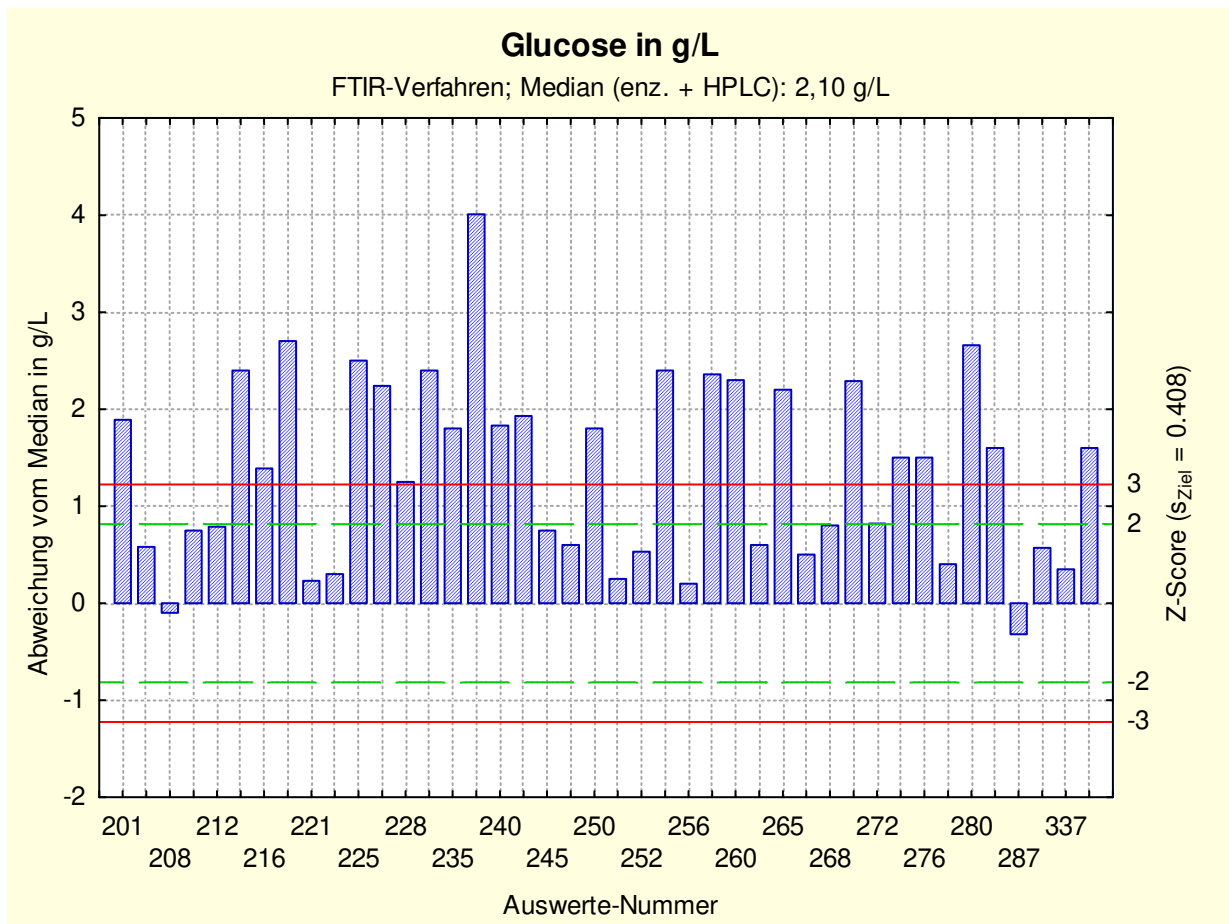
4.5.4 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,99	1,890	17,79	4,63	
203	FTIR	2,68	0,580	5,46	1,42	
208	FTIR	2,00	-0,100	-0,94	-0,25	
209	FTIR	2,85	0,750	7,06	1,84	
212	FTIR	2,89	0,790	7,44	1,94	
214	FTIR	4,50	2,400	22,59	5,88	(*)
216	FTIR	3,49	1,390	13,08	3,41	
219	FTIR	4,80	2,700	25,41	6,62	(*)
221	FTIR	2,33	0,230	2,16	0,56	
222	FTIR	2,40	0,300	2,82	0,74	
225	FTIR	4,60	2,500	23,53	6,13	(*)
227	FTIR	4,34	2,240	21,08	5,49	(*)
228	FTIR	3,35	1,250	11,77	3,06	
231	FTIR	4,50	2,400	22,59	5,88	(*)
235	FTIR	3,90	1,800	16,94	4,41	
237	FTIR	6,11	4,010	37,74	9,83	(*)
240	FTIR	3,93	1,830	17,22	4,49	
243	FTIR	4,03	1,930	18,17	4,73	
245	FTIR	2,85	0,750	7,06	1,84	
246	FTIR	2,70	0,600	5,65	1,47	
250	FTIR	3,90	1,800	16,94	4,41	
251	FTIR	2,35	0,250	2,35	0,61	
252	FTIR	2,63	0,530	4,99	1,30	
254	FTIR	4,50	2,400	22,59	5,88	(*)
256	FTIR	2,30	0,200	1,88	0,49	
258	FTIR	4,46	2,360	22,21	5,78	(*)
260	FTIR	4,40	2,300	21,65	5,64	(*)
264	FTIR	2,70	0,600	5,65	1,47	
265	FTIR	4,30	2,200	20,71	5,39	(*)
267	FTIR	2,60	0,500	4,71	1,23	
268	FTIR	2,90	0,800	7,53	1,96	
271	FTIR	4,39	2,290	21,55	5,61	(*)
272	FTIR	2,92	0,820	7,72	2,01	
275	FTIR	3,60	1,500	14,12	3,68	
276	FTIR	3,60	1,500	14,12	3,68	
279	FTIR	2,50	0,400	3,76	0,98	
280	FTIR	4,76	2,660	25,04	6,52	(*)
284	FTIR	3,70	1,600	15,06	3,92	
287	FTIR	1,78	-0,320	-3,01	-0,78	
288	FTIR	2,67	0,570	5,37	1,40	
337	FTIR	2,45	0,350	3,29	0,86	
365	FTIR	3,70	1,600	15,06	3,92	

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









## 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	2,66	-0,010	-0,08	-0,09	
03	enzymat., autom.	2,57	-0,100	-0,77	-0,87	
09	HPLC	2,43	-0,240	-1,84	-2,09	
12	enzymat., autom.	2,70	0,030	0,23	0,26	
14	enzymat., autom.	2,05	-0,620	-4,76	-5,39	(**)
21	HPLC	2,78	0,110	0,84	0,96	
22	HPLC	2,80	0,130	1,00	1,13	
25	enzymat., autom.	2,64	-0,030	-0,23	-0,26	
31	enzymat., autom.	3,14	0,472	3,62	4,10	
39	HPLC	2,78	0,110	0,84	0,96	
40	enzymat., autom.	2,84	0,168	1,29	1,46	
45	enzymat., autom.	2,60	-0,070	-0,54	-0,61	
48	enzymat., autom.	2,32	-0,350	-2,69	-3,04	
50	enzymat., autom.	2,70	0,030	0,23	0,26	
52	enzymat., autom.	2,48	-0,190	-1,46	-1,65	
56	enzymat., autom.	2,61	-0,060	-0,46	-0,52	
64	enzymat., autom.	2,67	0,000	0,00	0,00	
97	HPLC	2,67	0,000	0,00	0,00	
111	NMR	2,28	-0,389	-2,99	-3,38	
112	NMR	2,33	-0,342	-2,62	-2,97	
113	NMR	2,33	-0,339	-2,61	-2,95	
114	NMR	2,77	0,096	0,74	0,84	
115	NMR	2,64	-0,031	-0,24	-0,27	
116	NMR	2,38	-0,290	-2,22	-2,52	

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

### 4.6.2 Deskriptive Ergebnisse

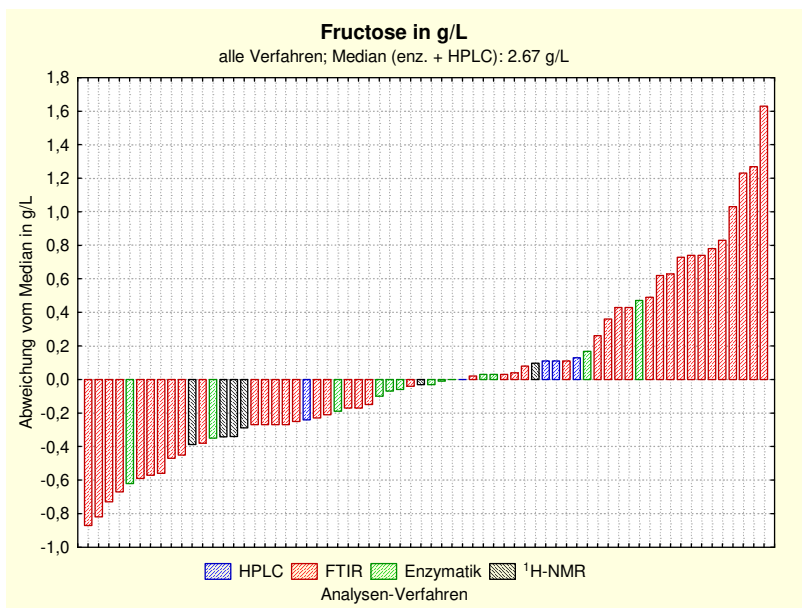
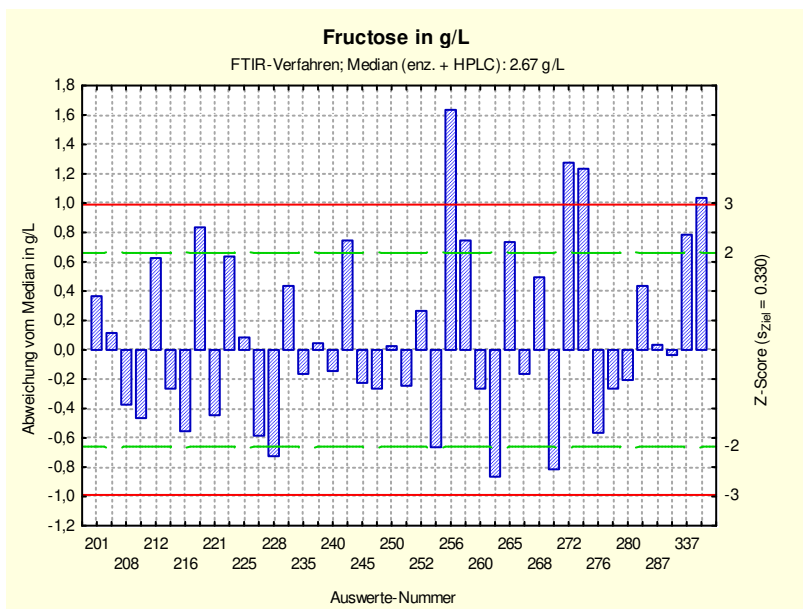
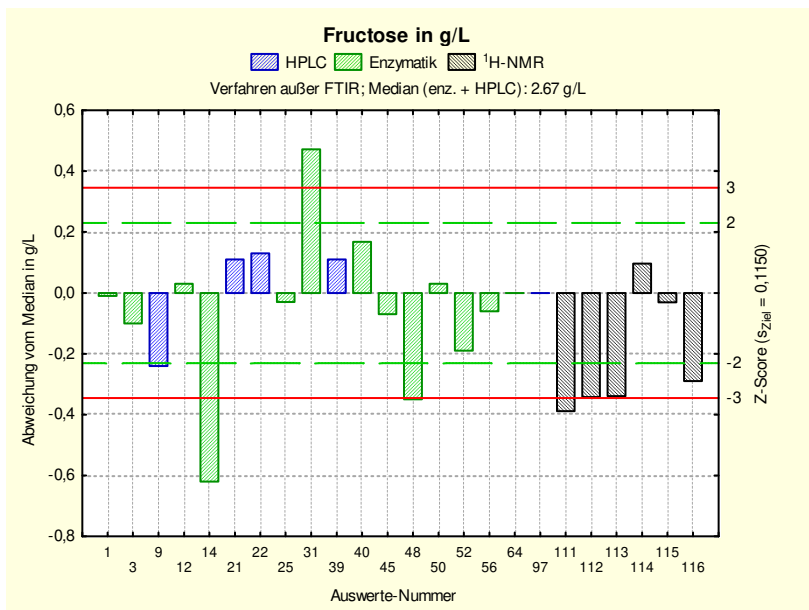
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	17
Minimalwert	2,05	2,32
Mittelwert	2,636	2,670
Median	2,665	2,670
Maximalwert	3,14	3,14
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,229	0,182
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,054	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,130	0,130
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,115	0,115
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,330	0,330
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,76	1,40
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,00	1,58
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,69	0,55
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,42	0,34
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,47	0,38
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,16	0,13

### 4.6.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;			
	OIV-MA-AS311-03	5	2,706	0,152
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	12	2,611	0,203
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	1	2,660	
	herkömmliche Verfahren	18	2,645	0,170
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	42	2,742	0,640
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,449	0,219

**4.6.4 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,03	0,365	2,81	1,11	
203	FTIR	2,78	0,115	0,88	0,35	
208	FTIR	2,29	-0,375	-2,88	-1,14	
209	FTIR	2,20	-0,465	-3,57	-1,41	
212	FTIR	3,29	0,625	4,80	1,89	
214	FTIR	2,40	-0,265	-2,04	-0,80	
216	FTIR	2,11	-0,555	-4,27	-1,68	
219	FTIR	3,50	0,835	6,42	2,53	
221	FTIR	2,22	-0,445	-3,42	-1,35	
222	FTIR	3,30	0,635	4,88	1,92	
225	FTIR	2,75	0,085	0,65	0,26	
227	FTIR	2,08	-0,585	-4,50	-1,77	
228	FTIR	1,94	-0,725	-5,57	-2,20	
231	FTIR	3,10	0,435	3,34	1,32	
235	FTIR	2,50	-0,165	-1,27	-0,50	
237	FTIR	2,71	0,045	0,35	0,14	
240	FTIR	2,52	-0,145	-1,11	-0,44	
243	FTIR	3,41	0,745	5,73	2,26	
245	FTIR	2,44	-0,225	-1,73	-0,68	
246	FTIR	2,40	-0,265	-2,04	-0,80	
250	FTIR	2,69	0,025	0,19	0,08	
251	FTIR	2,42	-0,245	-1,88	-0,74	
252	FTIR	2,93	0,265	2,04	0,80	
254	FTIR	2,00	-0,665	-5,11	-2,02	
256	FTIR	4,30	1,635	12,57	4,95	
258	FTIR	3,41	0,745	5,73	2,26	
260	FTIR	2,40	-0,265	-2,04	-0,80	
264	FTIR	1,80	-0,865	-6,65	-2,62	
265	FTIR	3,40	0,735	5,65	2,23	
267	FTIR	2,50	-0,165	-1,27	-0,50	
268	FTIR	3,16	0,495	3,81	1,50	
271	FTIR	1,85	-0,815	-6,27	-2,47	
272	FTIR	3,94	1,275	9,80	3,86	
275	FTIR	3,90	1,235	9,49	3,74	
276	FTIR	2,10	-0,565	-4,34	-1,71	
279	FTIR	2,40	-0,265	-2,04	-0,80	
280	FTIR	2,46	-0,205	-1,58	-0,62	
284	FTIR	3,10	0,435	3,34	1,32	
287	FTIR	2,70	0,035	0,27	0,11	
288	FTIR	2,63	-0,035	-0,27	-0,11	
337	FTIR	3,45	0,785	6,03	2,38	
365	FTIR	3,70	1,035	7,96	3,14	
283	FTIR	17,26	-0,823	-1,24	-1,55	
313	FTIR	17,78	-0,300	-0,45	-0,56	
322	FTIR	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
338	FTIR	19,02	0,940	1,42	1,77	
349	FTIR	17,50	-0,580	-0,88	-1,09	
363	FTIR	18,00	-0,080	-0,12	-0,15	



## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,79	0,125	0,44	
03	HPLC	6,44	-0,225	-0,79	
09	enzymat. autom.	7,33	0,665	2,35	
14	enzymat. autom.	6,67	0,005	0,02	
21	HPLC	6,49	-0,175	-0,62	
22	HPLC	6,60	-0,065	-0,23	
39	HPLC	6,82	0,155	0,55	
56	enzymat. autom.	6,48	-0,185	-0,65	
92	enzymat. Hand	6,71	0,045	0,16	
97	HPLC	6,66	-0,005	-0,02	
111	NMR	6,79	0,123	0,43	
112	NMR	6,46	-0,203	-0,72	
113	NMR	6,49	-0,173	-0,61	
114	NMR	7,34	0,672	2,37	
115	NMR	7,18	0,512	1,81	
116	NMR	6,63	-0,034	-0,12	

### 4.7.2 FTIR-Laboregebnisse

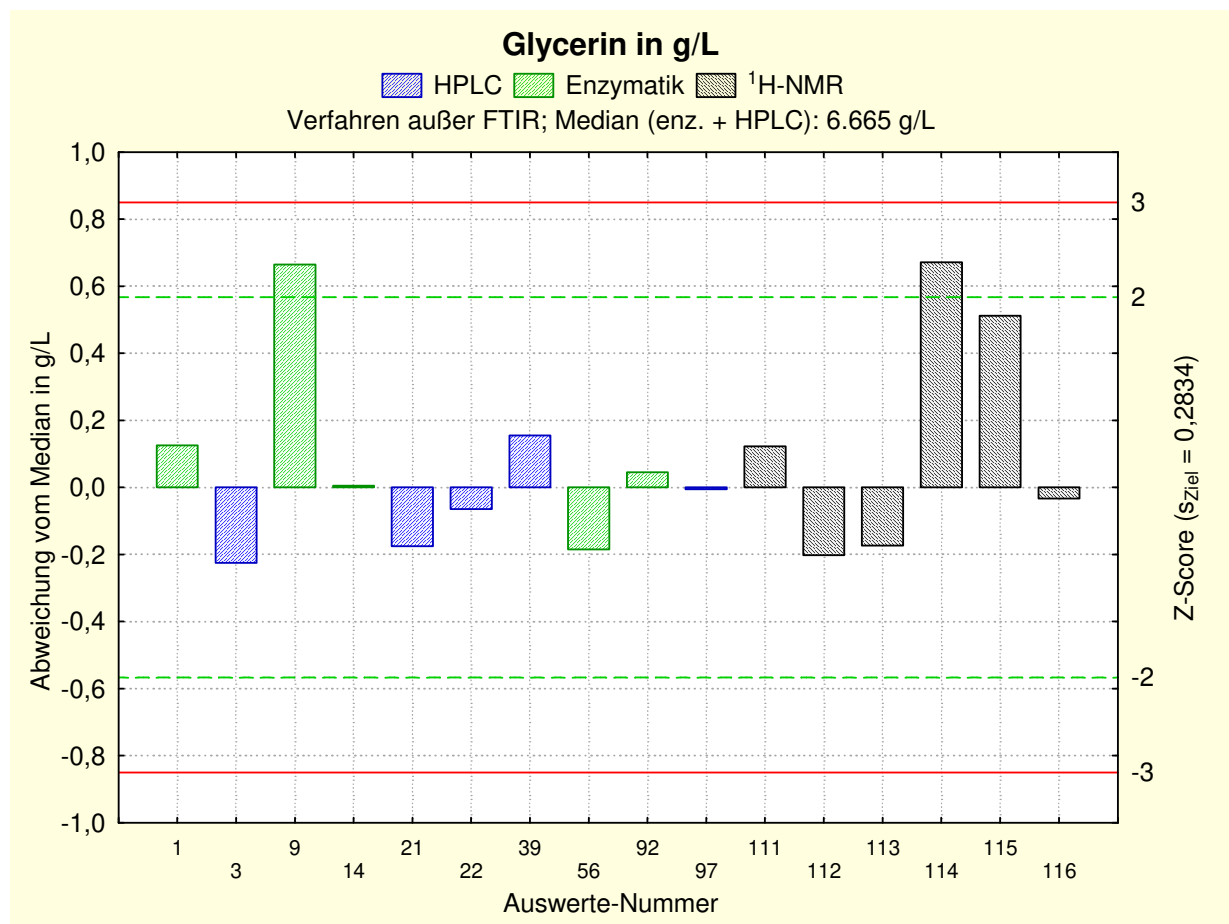
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,30	-0,365	-1,29	-1,05	
203	FTIR	6,57	-0,095	-0,34	-0,27	
206	FTIR	6,43	-0,235	-0,83	-0,68	
208	FTIR	7,09	0,425	1,50	1,22	
212	FTIR	6,33	-0,335	-1,18	-0,96	
214	FTIR	6,00	-0,665	-2,35	-1,91	
216	FTIR	6,12	-0,545	-1,92	-1,57	
221	FTIR	6,34	-0,325	-1,15	-0,93	
227	FTIR	6,47	-0,195	-0,69	-0,56	
228	FTIR	5,44	-1,225	-4,32	-3,52	
231	FTIR	5,29	-1,375	-4,85	-3,95	
237	FTIR	6,62	-0,045	-0,16	-0,13	
240	FTIR	6,20	-0,465	-1,64	-1,34	
243	FTIR	6,10	-0,565	-1,99	-1,62	
245	FTIR	6,21	-0,455	-1,61	-1,31	
250	FTIR	6,46	-0,205	-0,72	-0,59	
252	FTIR	6,37	-0,295	-1,04	-0,85	
254	FTIR	6,20	-0,465	-1,64	-1,34	
256	FTIR	7,45	0,785	2,77	2,26	
258	FTIR	5,94	-0,725	-2,56	-2,08	
260	FTIR	6,00	-0,665	-2,35	-1,91	
264	FTIR	6,30	-0,365	-1,29	-1,05	
268	FTIR	6,41	-0,255	-0,90	-0,73	
271	FTIR	6,30	-0,365	-1,29	-1,05	
272	FTIR	7,17	0,505	1,78	1,45	
275	FTIR	6,02	-0,645	-2,28	-1,85	
276	FTIR	6,00	-0,665	-2,35	-1,91	
279	FTIR	7,00	0,335	1,18	0,96	
280	FTIR	6,07	-0,595	-2,10	-1,71	
283	FTIR	7,40	0,735	2,59	2,11	
284	FTIR	6,20	-0,465	-1,64	-1,34	
287	FTIR	7,13	0,465	1,64	1,34	
288	FTIR	7,37	0,705	2,49	2,03	
337	FTIR	6,38	-0,285	-1,01	-0,82	

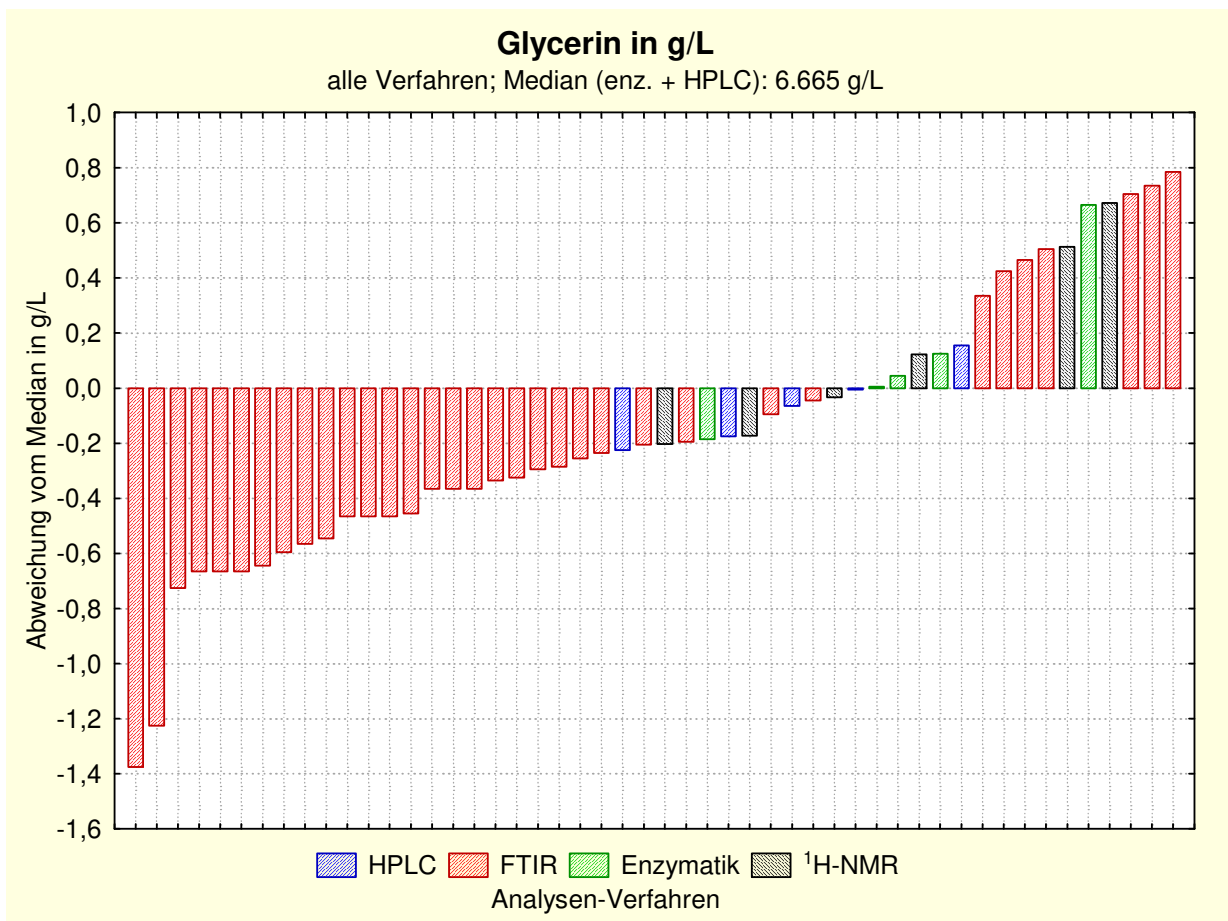
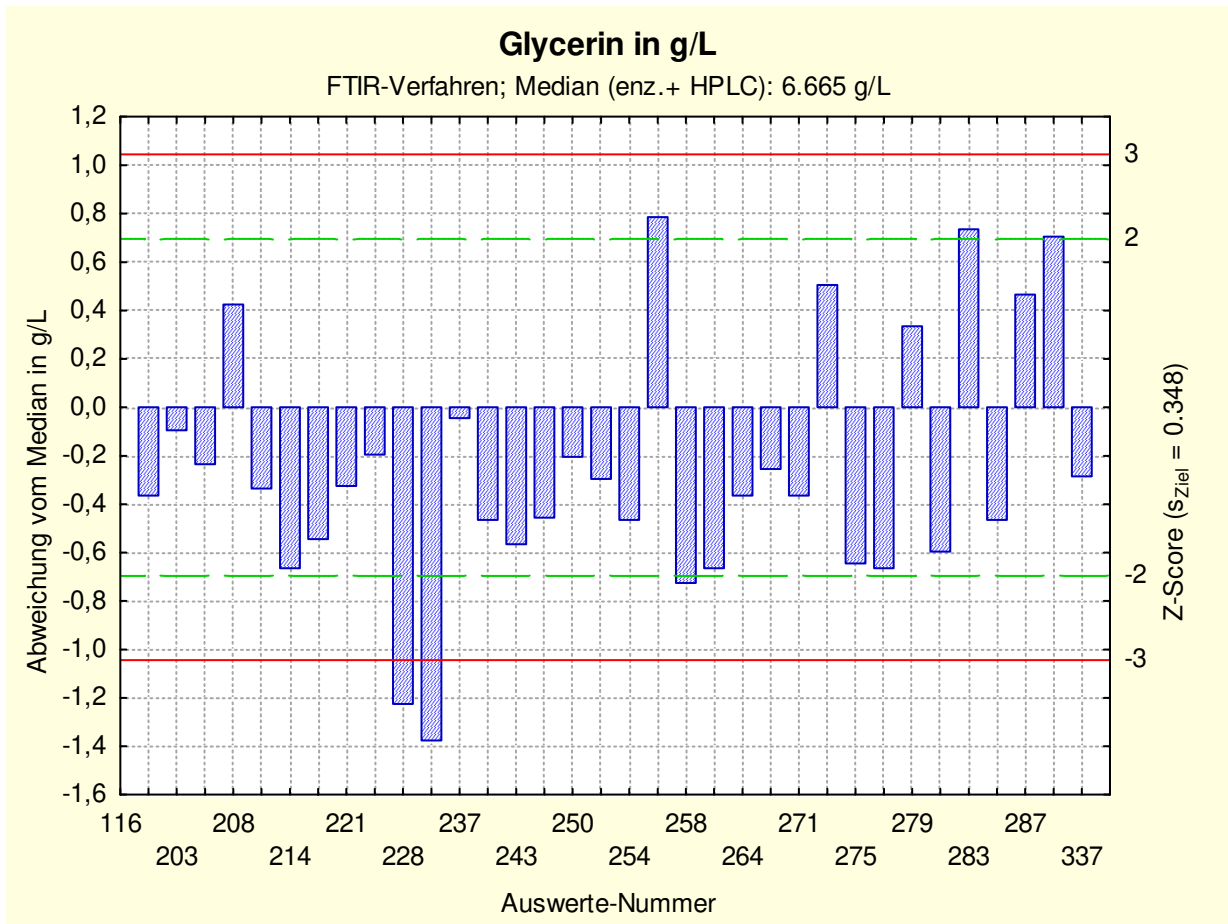
### 4.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	10
Minimalwert	6,44
Mittelwert	6,699
Median	6,665
Maximalwert	7,33
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,256
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,081
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,283
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,91
Quotient ( $s_L/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,74
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,29
Quotient ( $u_M/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,23

### 4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	5	6,602	0,170
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	3	6,810	0,475
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	6,750	0,064
	herkömmliche Verfahren	10	6,659	0,183
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	34	6,389	0,467
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,796	0,380





## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,41	0,040	0,84	
03	potentiometr.	3,31	-0,060	-1,26	
06	potentiometr.	3,38	0,010	0,21	
09	potentiometr.	3,43	0,060	1,26	
12	potentiometr.	3,35	-0,020	-0,42	
14	potentiometr.	3,44	0,070	1,47	
21	potentiometr.	3,35	-0,020	-0,42	
22	potentiometr.	3,37	0,000	0,00	
25	potentiometr.	3,37	0,000	0,00	
27	potentiometr.	3,40	0,030	0,63	
31	potentiometr.	3,42	0,050	1,05	
37	potentiometr.	3,07	-0,300	-6,30	(**)
39	potentiometr.	3,43	0,060	1,26	
40	potentiometr.	3,38	0,010	0,21	
45	potentiometr.	3,55	0,180	3,78	
50	potentiometr.	3,37	0,000	0,00	
56	potentiometr.	3,37	0,000	0,00	
60	potentiometr.	3,42	0,050	1,05	
64	potentiometr.	3,47	0,100	2,10	
65	potentiometr.	3,30	-0,068	-1,43	
68	potentiometr.	3,30	-0,070	-1,47	
75	potentiometr.	3,23	-0,140	-2,94	
83	potentiometr.	3,36	-0,010	-0,21	
106	potentiometr.	3,17	-0,200	-4,20	

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

### 4.8.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	23
Minimalwert	3,07	3,17
Mittelwert	3,361	3,373
Median	3,370	3,370
Maximalwert	3,55	3,55
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,0986	0,0785
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,0201	0,0164
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,0493	0,0493
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,07	1,65
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	2,00	1,59
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,42	0,34
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,41	0,33

### 4.8.3 Angaben zu den Analyseverfahren

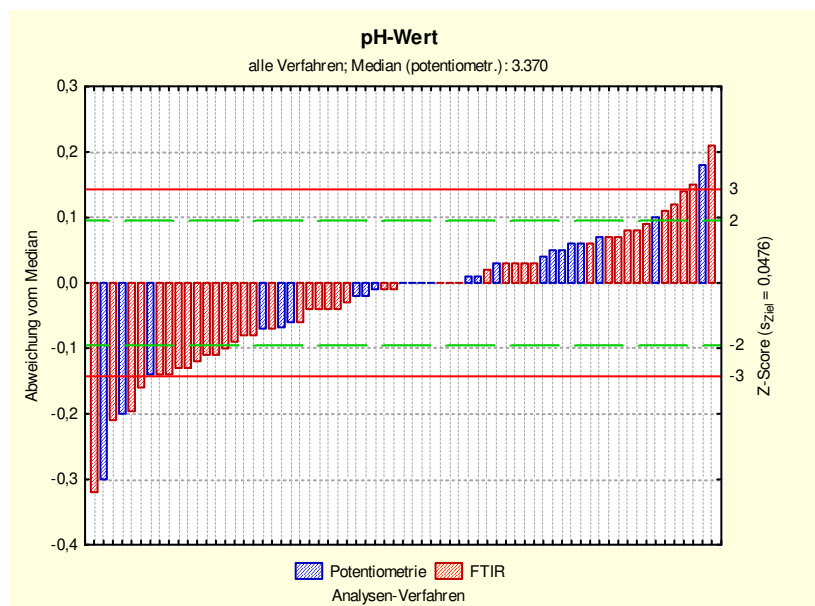
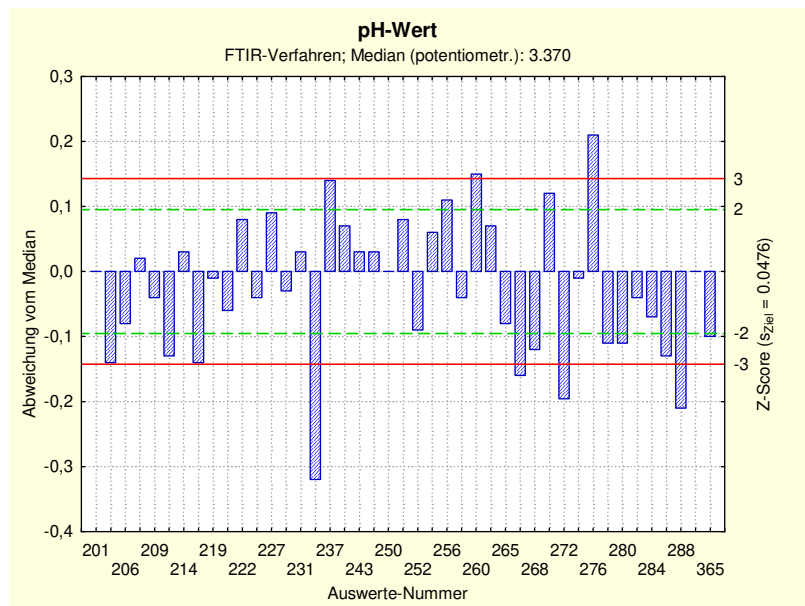
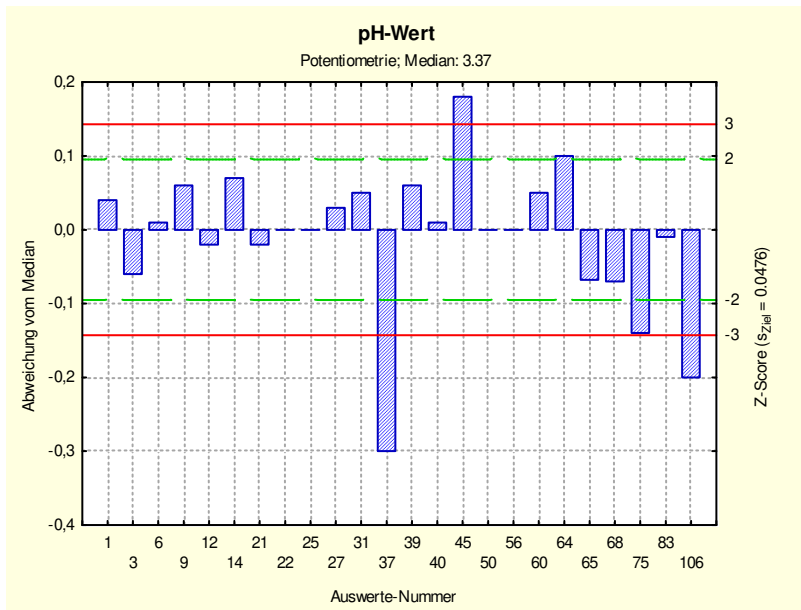
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	24	3,371	0,070
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	43	3,345	0,109

**4.8.4 FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,37	0,000	0,00	
203	FTIR	3,23	-0,140	-2,84	
206	FTIR	3,29	-0,080	-1,62	
208	FTIR	3,39	0,020	0,41	
209	FTIR	3,33	-0,040	-0,81	
212	FTIR	3,24	-0,130	-2,64	
214	FTIR	3,40	0,030	0,61	
216	FTIR	3,23	-0,140	-2,84	
219	FTIR	3,36	-0,010	-0,20	
221	FTIR	3,31	-0,060	-1,22	
222	FTIR	3,45	0,080	1,62	
225	FTIR	3,33	-0,040	-0,81	
227	FTIR	3,46	0,090	1,83	
228	FTIR	3,34	-0,030	-0,61	
231	FTIR	3,40	0,030	0,61	
235	FTIR	3,05	-0,320	-6,49	(***)
237	FTIR	3,51	0,140	2,84	
240	FTIR	3,44	0,070	1,42	
243	FTIR	3,40	0,030	0,61	
245	FTIR	3,40	0,030	0,61	
250	FTIR	3,37	0,000	0,00	
251	FTIR	3,45	0,080	1,62	
252	FTIR	3,28	-0,090	-1,83	
254	FTIR	3,43	0,060	1,22	
256	FTIR	3,48	0,110	2,23	
258	FTIR	3,33	-0,040	-0,81	
260	FTIR	3,52	0,150	3,04	
264	FTIR	3,44	0,070	1,42	
265	FTIR	3,29	-0,080	-1,62	
267	FTIR	3,21	-0,160	-3,25	
268	FTIR	3,25	-0,120	-2,43	
271	FTIR	3,49	0,120	2,43	
272	FTIR	3,17	-0,196	-3,98	
275	FTIR	3,36	-0,010	-0,20	
276	FTIR	3,58	0,210	4,26	
279	FTIR	3,26	-0,110	-2,23	
280	FTIR	3,26	-0,110	-2,23	
283	FTIR	3,33	-0,040	-0,81	
284	FTIR	3,30	-0,070	-1,42	
287	FTIR	3,24	-0,130	-2,64	
288	FTIR	3,16	-0,210	-4,26	
337	FTIR	3,37	0,000	0,00	
365	FTIR	3,27	-0,100	-2,03	

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





## 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	7,01	-0,045	-0,15	-0,42	
06	LwK 5.2.1	7,02	-0,035	-0,12	-0,33	
09	LwK 5.2.1	7,05	-0,005	-0,02	-0,05	
12	LwK 5.1	7,20	0,145	0,49	1,35	
14	LwK 5.1	7,18	0,125	0,42	1,17	
21	LwK 5.1	6,95	-0,105	-0,35	-0,98	
22	LwK 5.1	7,20	0,145	0,49	1,35	
25	LwK 5.1	7,12	0,065	0,22	0,61	
27	LwK 5.1	7,20	0,145	0,49	1,35	
31	LwK 5.1	7,40	0,345	1,16	3,22	
37	LwK 5.1	7,03	-0,025	-0,08	-0,23	
39	LwK 5.2.1	7,05	-0,005	-0,02	-0,05	
40	LwK 5.1	7,06	0,005	0,02	0,05	
45	LwK 5.1	6,90	-0,155	-0,52	-1,45	
48	LwK 5.1	7,00	-0,055	-0,18	-0,51	
50	LwK 5.1	6,95	-0,105	-0,35	-0,98	
52	LwK 5.2.1	7,40	0,345	1,16	3,22	
56	LwK 5.2.1	7,03	-0,025	-0,08	-0,23	
60	LwK 5.2.1	7,16	0,105	0,35	0,98	
64	LwK 5.2.1	7,26	0,205	0,69	1,91	
65	LwK 5.1	7,15	0,095	0,32	0,89	
68	LwK 5.1	7,20	0,145	0,49	1,35	
75	LwK 5.1	6,60	-0,455	-1,53	-4,25	
83	LwK 5.2.2	7,30	0,245	0,82	2,29	
90	LwK 5.2.1	7,05	-0,010	-0,03	-0,09	
106	LwK 5.1	7,00	-0,055	-0,18	-0,51	

### 4.9.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	26
Minimalwert	6,60
Mittelwert	7,095
Median	7,055
Maximalwert	7,40
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,166
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,033
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,297
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,56
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,55
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	1,14
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,11
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,22

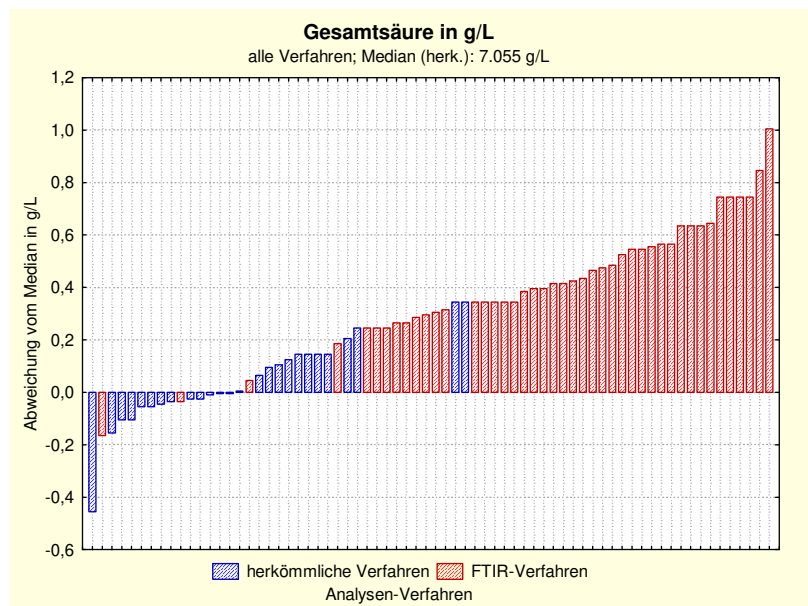
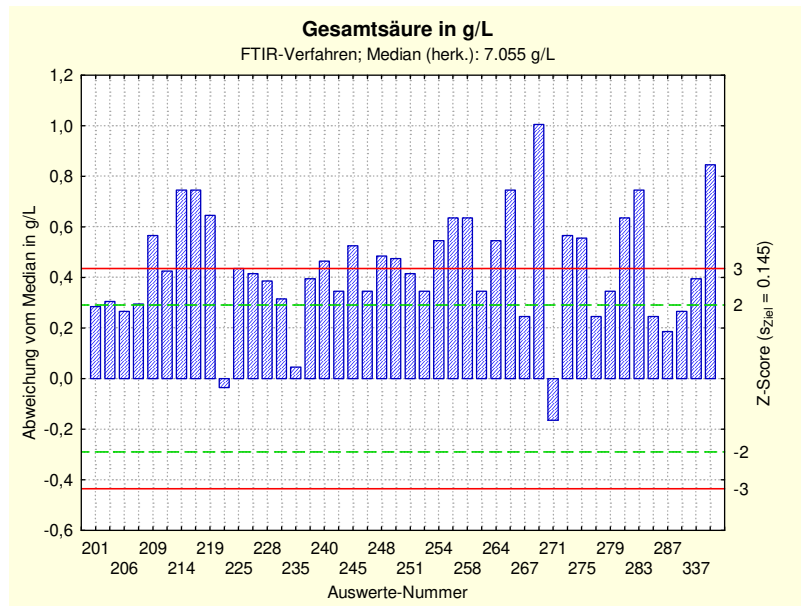
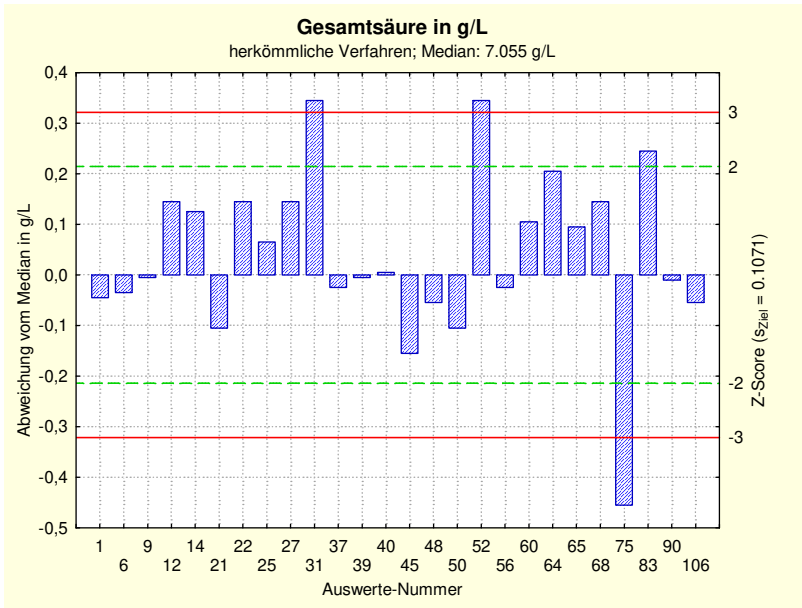
**4.9.3 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	7,34	0,285	0,96	1,97	
203	LwK 5.3	7,36	0,305	1,03	2,10	
206	LwK 5.3	7,32	0,265	0,89	1,83	
208	LwK 5.3	7,35	0,295	0,99	2,03	
209	LwK 5.3	7,62	0,565	1,90	3,90	
212	LwK 5.3	7,48	0,425	1,43	2,93	
214	LwK 5.3	7,80	0,745	2,50	5,14	(***)
216	LwK 5.3	7,80	0,745	2,50	5,14	(***)
219	LwK 5.3	7,70	0,645	2,17	4,45	
221	LwK 5.3	7,02	-0,035	-0,12	-0,24	
225	LwK 5.3	7,49	0,435	1,46	3,00	
227	LwK 5.3	7,47	0,415	1,40	2,86	
228	LwK 5.3	7,44	0,385	1,29	2,66	
231	LwK 5.3	7,37	0,315	1,06	2,17	
235	LwK 5.3	7,10	0,045	0,15	0,31	
237	LwK 5.3	7,45	0,395	1,33	2,72	
240	LwK 5.3	7,52	0,465	1,56	3,21	
243	LwK 5.3	7,40	0,345	1,16	2,38	
245	LwK 5.3	7,58	0,525	1,77	3,62	
246	LwK 5.3	7,40	0,345	1,16	2,38	
248	LwK 5.3	7,54	0,485	1,63	3,34	
250	LwK 5.3	7,53	0,475	1,60	3,28	
251	LwK 5.3	7,47	0,415	1,40	2,86	
252	LwK 5.3	7,40	0,345	1,16	2,38	
254	LwK 5.3	7,60	0,545	1,83	3,76	
256	LwK 5.3	7,69	0,635	2,14	4,38	
258	LwK 5.3	7,69	0,635	2,14	4,38	
260	LwK 5.3	7,40	0,345	1,16	2,38	
264	LwK 5.3	7,60	0,545	1,83	3,76	
265	LwK 5.3	7,80	0,745	2,50	5,14	(***)
267	LwK 5.3	7,30	0,245	0,82	1,69	
268	LwK 5.3	8,06	1,005	3,38	6,93	(***)
271	LwK 5.3	6,89	-0,165	-0,55	-1,14	
272	LwK 5.3	7,62	0,565	1,90	3,90	
275	LwK 5.3	7,61	0,555	1,87	3,83	
276	LwK 5.3	7,30	0,245	0,82	1,69	
279	LwK 5.3	7,40	0,345	1,16	2,38	
280	LwK 5.3	7,69	0,635	2,14	4,38	
283	LwK 5.3	7,80	0,745	2,50	5,14	(***)
284	LwK 5.3	7,30	0,245	0,82	1,69	
287	LwK 5.3	7,24	0,185	0,62	1,28	
288	LwK 5.3	7,32	0,265	0,89	1,83	
337	LwK 5.3	7,45	0,395	1,33	2,72	
365	LwK 5.3	7,90	0,845	2,84	5,83	(***)

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

**4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	16	7,081	0,148
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	9	7,100	0,118
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	1	7,300	
	herkömmliche Verfahren	26	7,098	0,141
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	44	7,495	0,209



## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,73	-0,040	-0,44	
08	HPLC	1,68	-0,090	-0,98	
09	photometr., autom.	1,64	-0,130	-1,41	
12	photometr., autom.	1,80	0,030	0,33	
21	HPLC	3,47	1,700	18,50	(*)
22	HPLC	1,77	0,000	0,00	
31	photometr., autom.	1,58	-0,190	-2,07	
40	photometr., autom.	1,90	0,130	1,41	
45	photometr., autom.	1,97	0,200	2,18	
48	photometr., autom.	1,83	0,055	0,60	
50	photometr., autom.	1,92	0,150	1,63	
56	photometr., autom.	1,98	0,210	2,29	
64	HPLC	1,48	-0,290	-3,16	
90	HPLC	1,77	0,000	0,00	
92	HPLC	1,61	-0,160	-1,74	
111	NMR	1,48	-0,294	-3,20	
112	NMR	1,97	0,197	2,14	
113	NMR	1,90	0,134	1,46	
114	NMR	< 0,5			
115	NMR	1,84	0,074	0,80	
116	NMR	2,15	0,381	4,14	
110	NMR	2,19	0,083	0,78	

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

### 4.10.2 Deskriptive Ergebnisse

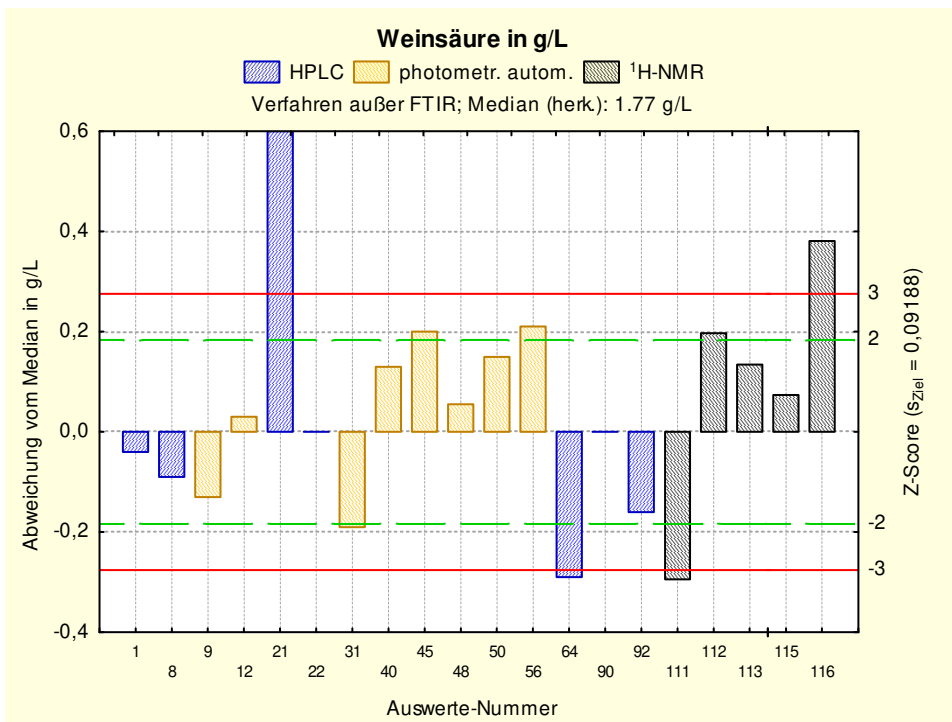
Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC alle Daten	herkömml. Verfahren alle Daten
Gültige Werte	6	14
Minimalwert	1,48	1,48
Mittelwert	1,673	1,761
Median	1,705	1,770
Maximalwert	1,77	1,98
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,113	0,152
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,046	0,041
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,089	0,092
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,227	0,227
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,26	1,65
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,50	0,67
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,52	0,44
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,20	0,18

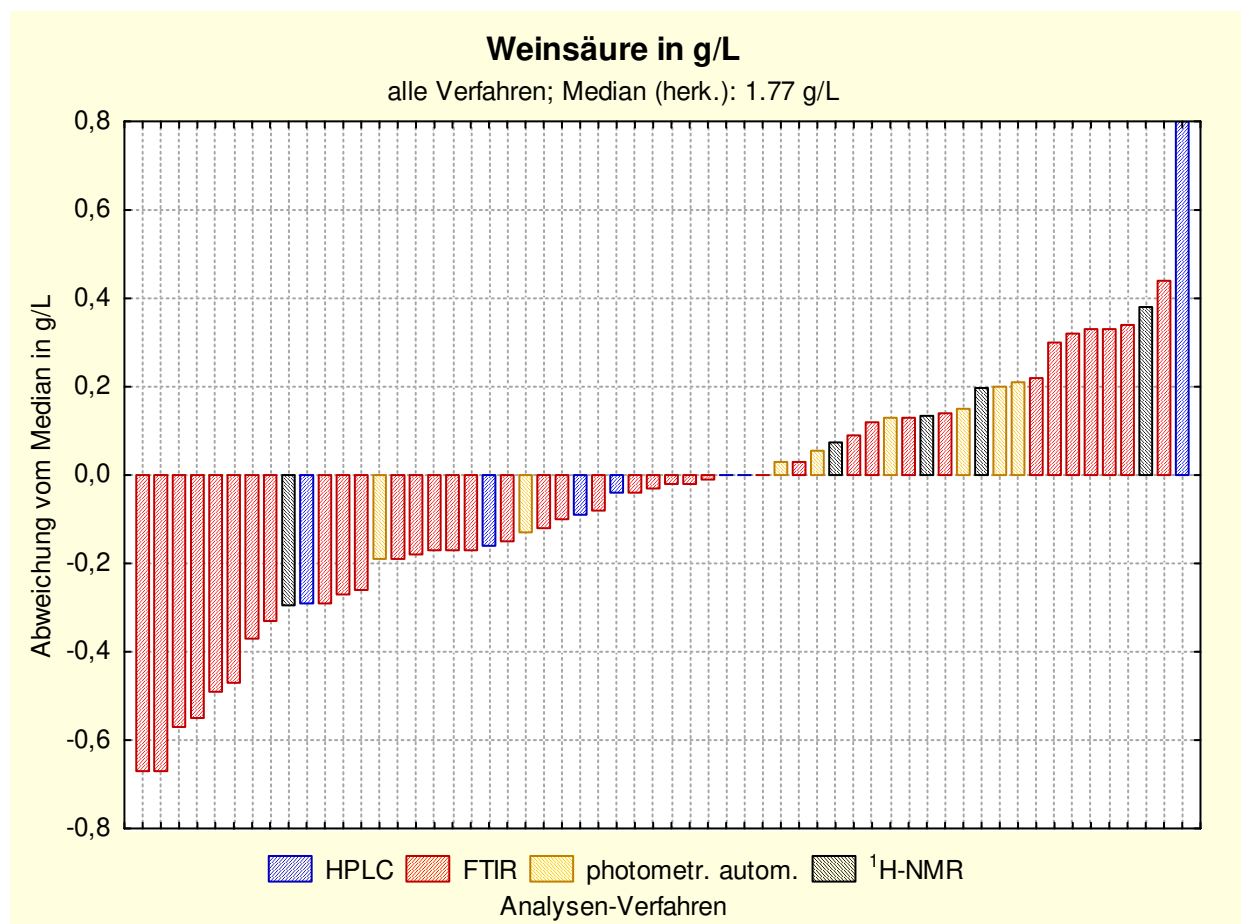
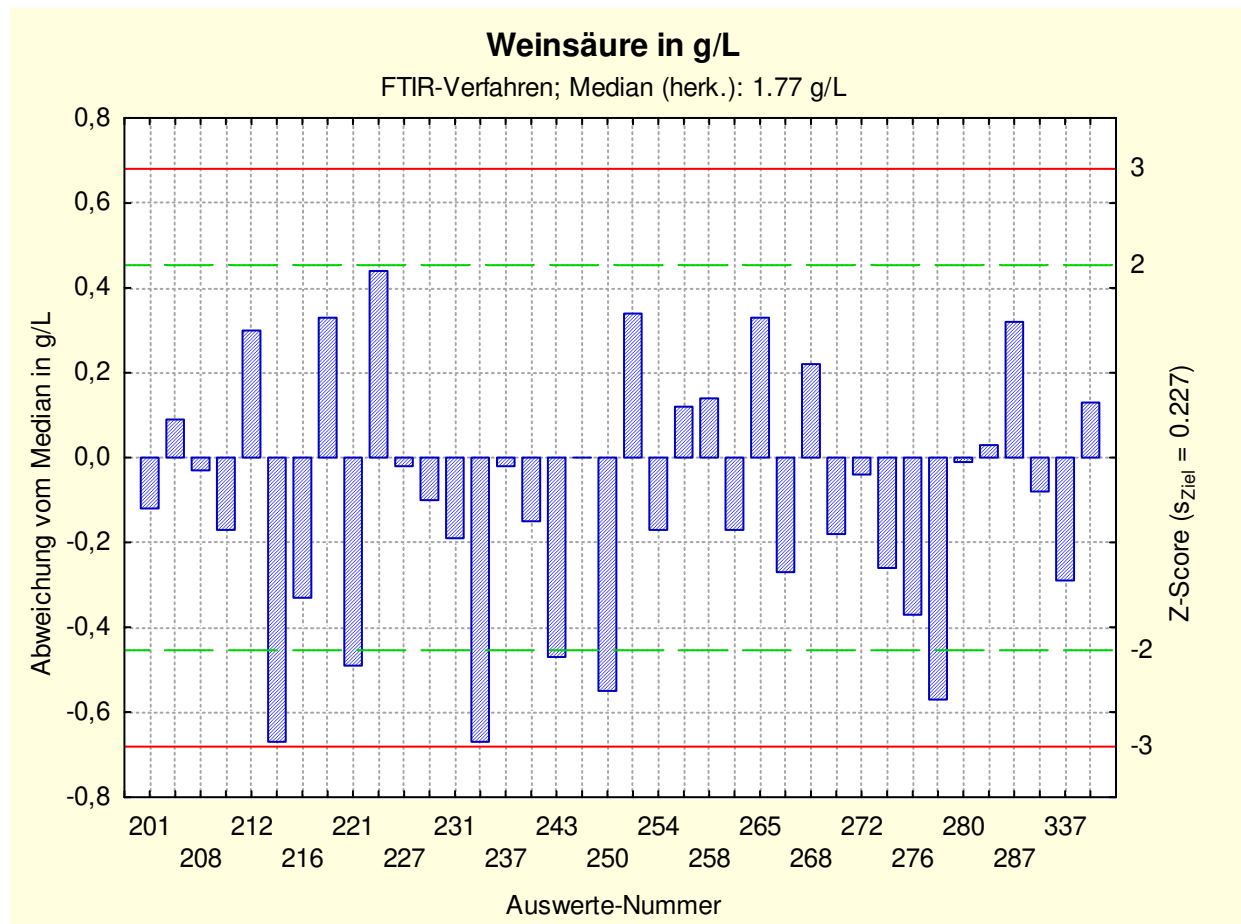
### 4.10.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	1,718	0,174
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	8	1,833	0,157
	alle herkömmlichen Verfahren	15	1,783	0,183
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	1,680	0,315
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,870	0,266

4.10.4 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,65	-0,120	-1,31	-0,53	
203	FTIR	1,86	0,090	0,98	0,40	
208	FTIR	1,74	-0,030	-0,33	-0,13	
209	FTIR	1,60	-0,170	-1,85	-0,75	
212	FTIR	2,07	0,300	3,27	1,32	
214	FTIR	1,10	-0,670	-7,29	-2,95	
216	FTIR	1,44	-0,330	-3,59	-1,45	
219	FTIR	2,10	0,330	3,59	1,45	
221	FTIR	1,28	-0,490	-5,33	-2,16	
222	FTIR	2,21	0,440	4,79	1,94	
227	FTIR	1,75	-0,020	-0,22	-0,09	
228	FTIR	1,67	-0,100	-1,09	-0,44	
231	FTIR	1,58	-0,190	-2,07	-0,84	
235	FTIR	1,10	-0,670	-7,29	-2,95	
237	FTIR	1,75	-0,020	-0,22	-0,09	
240	FTIR	1,62	-0,150	-1,63	-0,66	
243	FTIR	1,30	-0,470	-5,12	-2,07	
245	FTIR	1,77	0,000	0,00	0,00	
250	FTIR	1,22	-0,550	-5,99	-2,42	
252	FTIR	2,11	0,340	3,70	1,50	
254	FTIR	1,60	-0,170	-1,85	-0,75	
256	FTIR	1,89	0,120	1,31	0,53	
258	FTIR	1,91	0,140	1,52	0,62	
260	FTIR	1,60	-0,170	-1,85	-0,75	
265	FTIR	2,10	0,330	3,59	1,45	
267	FTIR	1,50	-0,270	-2,94	-1,19	
268	FTIR	1,99	0,220	2,39	0,97	
271	FTIR	1,59	-0,180	-1,96	-0,79	
272	FTIR	1,73	-0,040	-0,44	-0,18	
275	FTIR	1,51	-0,260	-2,83	-1,15	
276	FTIR	1,40	-0,370	-4,03	-1,63	
279	FTIR	1,20	-0,570	-6,20	-2,51	
280	FTIR	1,76	-0,010	-0,11	-0,04	
284	FTIR	1,80	0,030	0,33	0,13	
287	FTIR	2,09	0,320	3,48	1,41	
288	FTIR	1,69	-0,080	-0,87	-0,35	
337	FTIR	1,48	-0,290	-3,16	-1,28	
365	FTIR	1,90	0,130	1,41	0,57	







## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,410	0,0280	1,12	0,98	
09	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,382	0,0000	0,00	0,00	
21	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,450	0,0680	2,72	2,38	
27	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,419	0,0370	1,48	1,29	
31	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,381	-0,0010	-0,04	-0,04	
37	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,378	-0,0040	-0,16	-0,14	
39	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,360	-0,0220	-0,88	-0,77	
40	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,417	0,0350	1,40	1,22	
45	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,420	0,0380	1,52	1,33	
56	Rentschler mod. ausg.	0,378	-0,0040	-0,16	-0,14	
60	Wädenswil SO <sub>2</sub> korr.	0,430	0,0480	1,92	1,68	
65	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,500	0,1180	4,72	4,13	
68	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,420	0,0380	1,52	1,33	
83	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,350	-0,0320	-1,28	-1,12	
90	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,396	0,0137	0,55	0,48	
92	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,422	0,0400	1,60	1,40	
98	Halbmikro SO <sub>2</sub> ausg.	0,369	-0,0130	-0,52	-0,46	
106	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,480	0,0980	3,92	3,43	

### 4.11.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten
Gültige Werte	11
Minimalwert	0,360
Mittelwert	0,3939
Median	0,3820
Maximalwert	0,430
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0243
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0073
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,0250
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0286
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0891
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,97
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,85
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,27
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,26
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,08

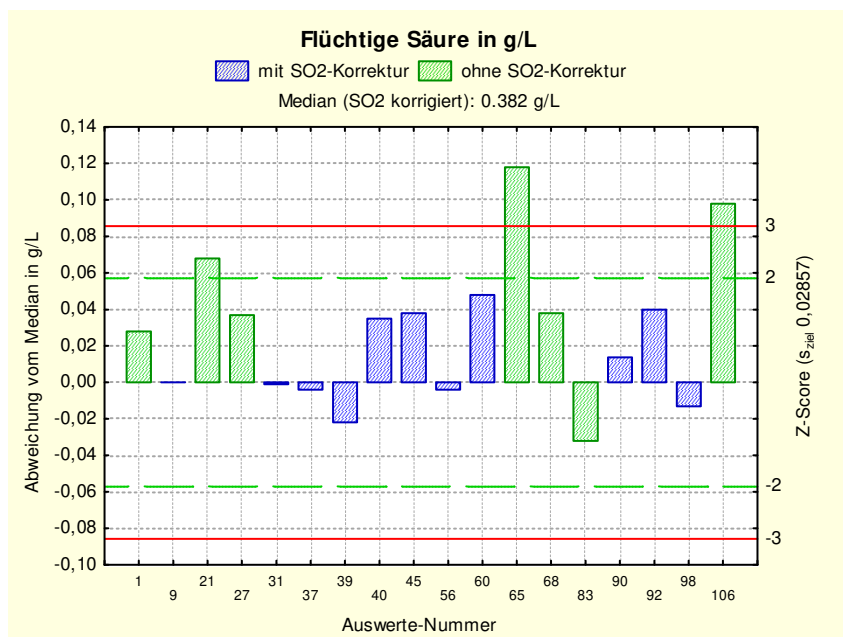
### 4.11.3 Angaben zu den Analyseverfahren

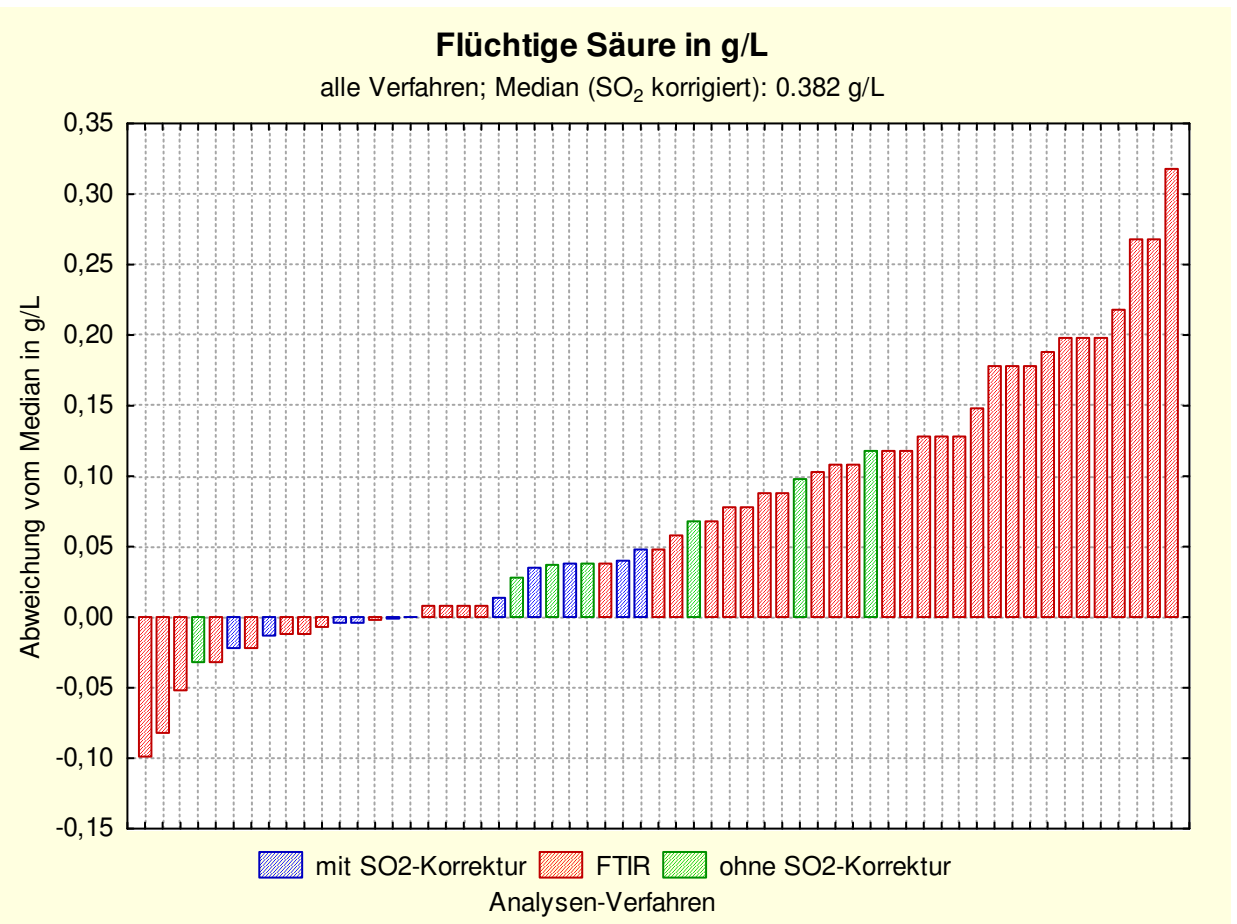
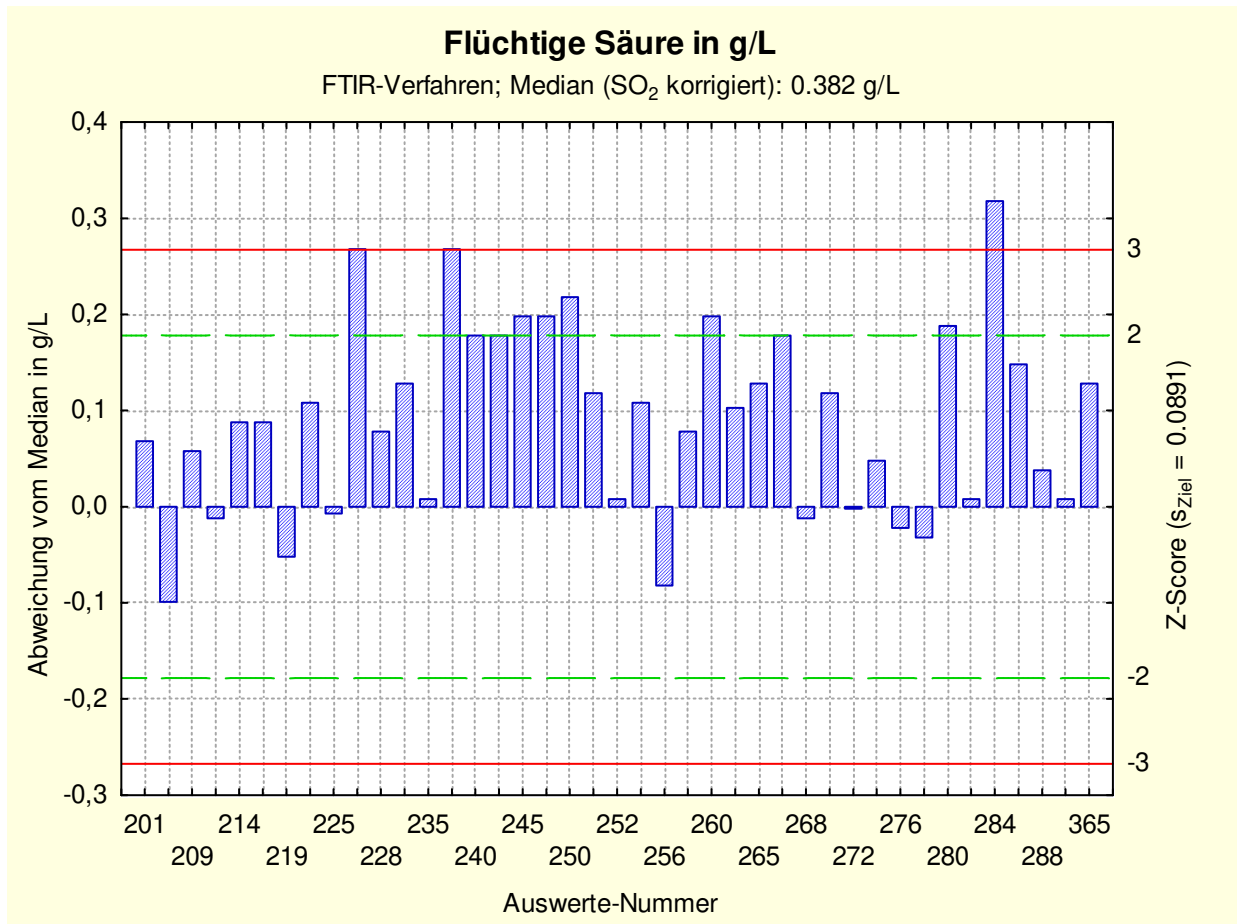
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	Halbmikrodestillation n. AVV SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,431	0,052
Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,380	0,002
Halbmikro SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,369	
Wädenswil SO <sub>2</sub> korr.	Wädenswil-Verfahren SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,430	
Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	Destillationsapparat Gerhardt SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	3	0,403	0,030
OIV SO <sub>2</sub> -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	3	0,400	0,023
Rentschler mod. ausg.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,378	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	11	0,392	0,249
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	41	0,471	0,104



4.11.4 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,450	0,0680	2,72	0,76	
208	FTIR	0,283	-0,0990	-3,96	-1,11	
209	FTIR	0,440	0,0580	2,32	0,65	
212	FTIR	0,370	-0,0120	-0,48	-0,13	
214	FTIR	0,470	0,0880	3,52	0,99	
216	FTIR	0,470	0,0880	3,52	0,99	
219	FTIR	0,330	-0,0520	-2,08	-0,58	
221	FTIR	0,490	0,1080	4,32	1,21	
225	FTIR	0,375	-0,0070	-0,28	-0,08	
227	FTIR	0,650	0,2680	10,73	3,01	
228	FTIR	0,460	0,0780	3,12	0,88	
231	FTIR	0,510	0,1280	5,12	1,44	
235	FTIR	0,390	0,0080	0,32	0,09	
237	FTIR	0,650	0,2680	10,73	3,01	
240	FTIR	0,560	0,1780	7,13	2,00	
243	FTIR	0,560	0,1780	7,13	2,00	
245	FTIR	0,580	0,1980	7,93	2,22	
246	FTIR	0,580	0,1980	7,93	2,22	
250	FTIR	0,600	0,2180	8,73	2,45	
251	FTIR	0,500	0,1180	4,72	1,32	
252	FTIR	0,390	0,0080	0,32	0,09	
254	FTIR	0,490	0,1080	4,32	1,21	
256	FTIR	0,300	-0,0820	-3,28	-0,92	
258	FTIR	0,460	0,0780	3,12	0,88	
260	FTIR	0,580	0,1980	7,93	2,22	
264	FTIR	0,485	0,1030	4,12	1,16	
265	FTIR	0,510	0,1280	5,12	1,44	
267	FTIR	0,560	0,1780	7,13	2,00	
268	FTIR	0,370	-0,0120	-0,48	-0,13	
271	FTIR	0,500	0,1180	4,72	1,32	
272	FTIR	0,380	-0,0020	-0,08	-0,02	
275	FTIR	0,430	0,0480	1,92	0,54	
276	FTIR	0,360	-0,0220	-0,88	-0,25	
279	FTIR	0,350	-0,0320	-1,28	-0,36	
280	FTIR	0,570	0,1880	7,53	2,11	
283	FTIR	0,390	0,0080	0,32	0,09	
284	FTIR	0,700	0,3180	12,73	3,57	
287	FTIR	0,530	0,1480	5,93	1,66	
288	FTIR	0,420	0,0380	1,52	0,43	
337	FTIR	0,390	0,0080	0,32	0,09	
365	FTIR	0,510	0,1280	5,12	1,44	





## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
12	enzymat. autom.	0,440	0,005	0,18	
14	enzymat. autom.	0,480	0,045	1,61	
45	enzymat. autom.	0,490	0,055	1,97	
48	enzymat. autom.	0,380	-0,055	-1,97	
50	enzymat. autom.	0,435	0,000	0,00	
56	enzymat. autom.	0,336	-0,099	-3,55	(*)
92	enzymat. autom.	0,360	-0,075	-2,69	
105	enzymat. autom.	0,352	-0,084	-2,99	

(\*) Dieser Wert wurde wegen abweichenden Verfahrens bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

### 4.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,299	-0,030	-1,38	
06	HPLC	0,501	0,172	7,79	(*)
22	HPLC	0,242	-0,087	-3,97	
64	HPLC	0,180	-0,149	-6,78	(**)
90	HPLC	0,365	0,036	1,62	
111	NMR	0,321	-0,009	-0,39	
112	NMR	0,310	-0,020	-0,89	
113	NMR	0,340	0,011	0,49	
114	NMR	0,383	0,054	2,43	
115	NMR	0,329	0,000	0,00	
116	NMR	0,338	0,008	0,38	
208	FTIR	0,400	0,071	3,21	
222	FTIR	0,690	0,361	16,38	(*)
260	FTIR	0,560	0,231	10,47	(*)

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

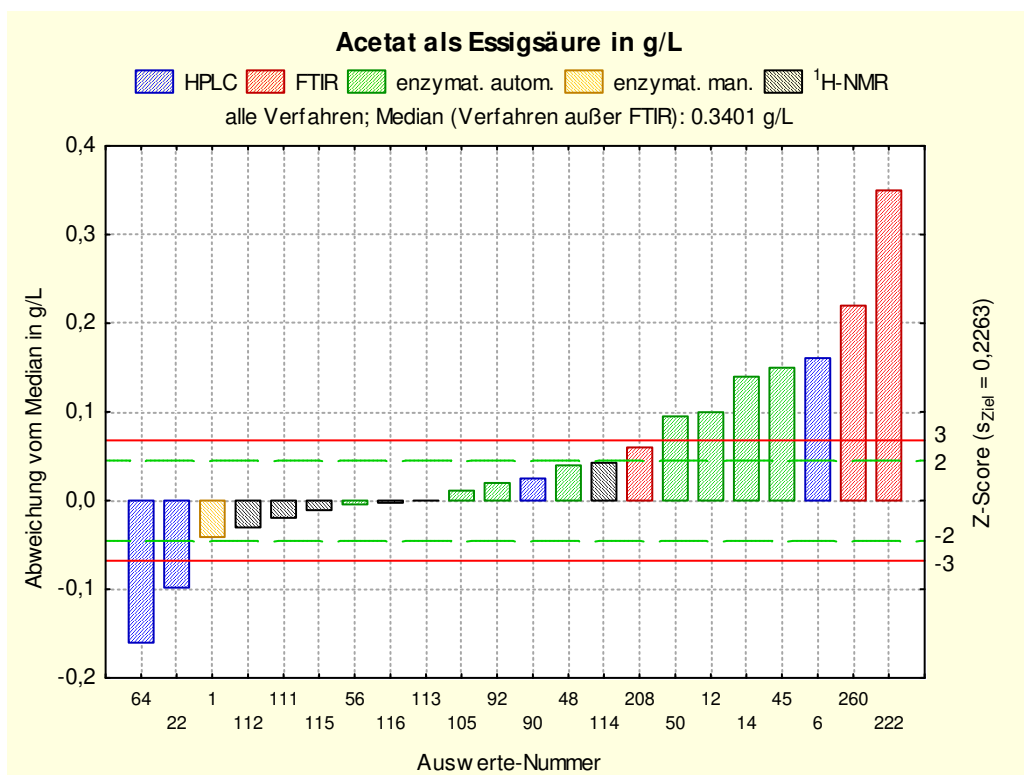
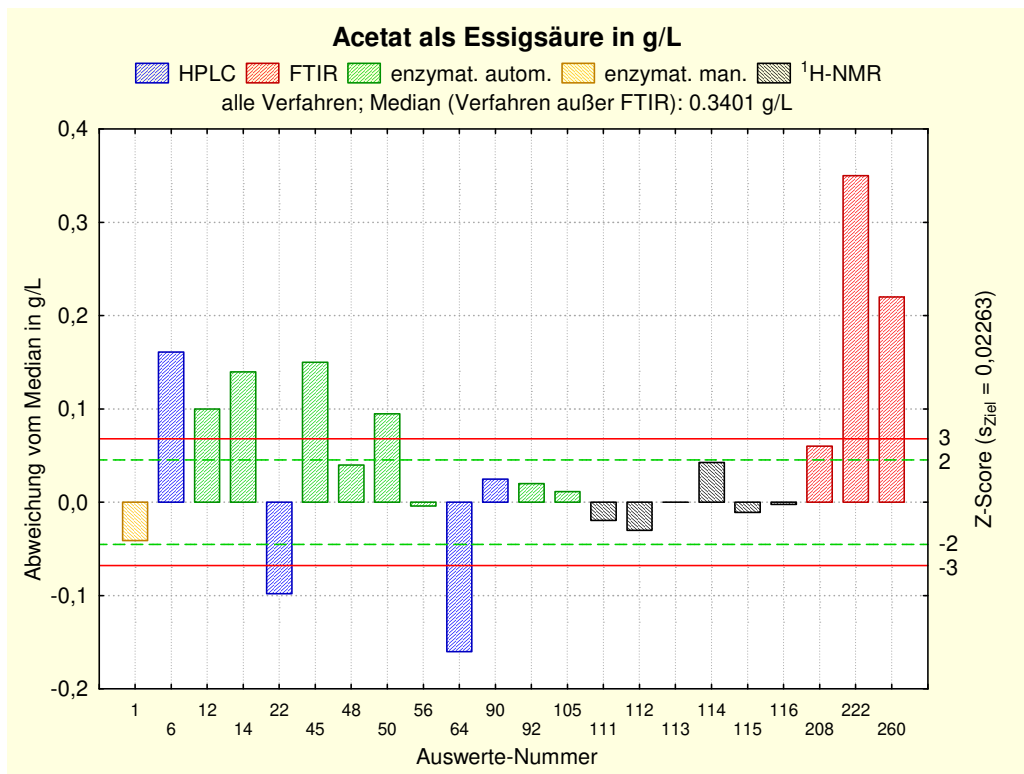
(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

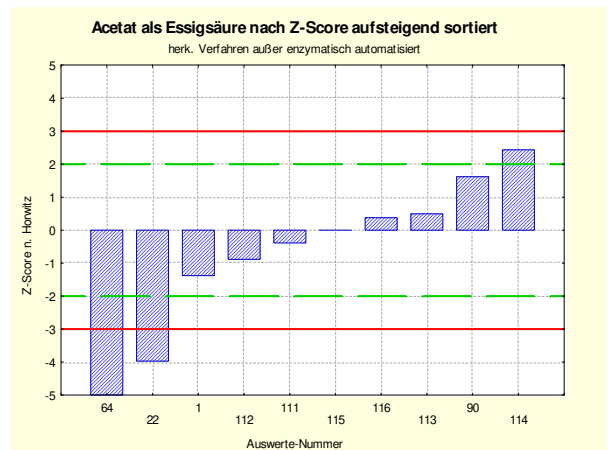
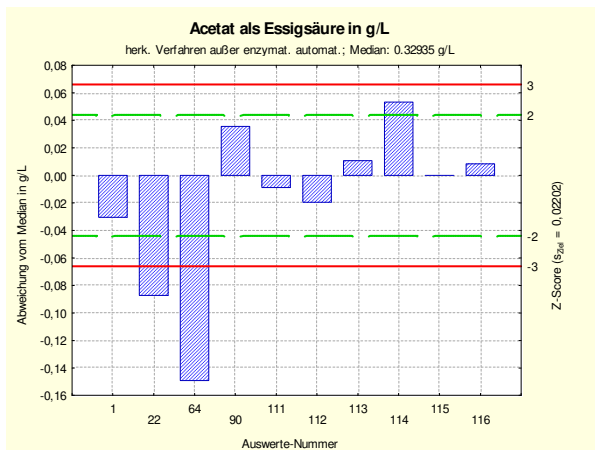
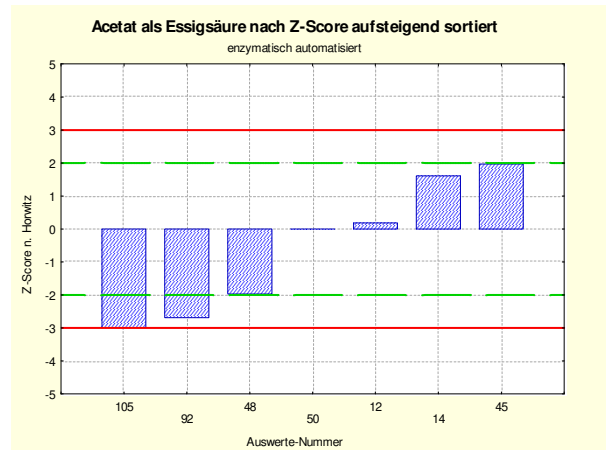
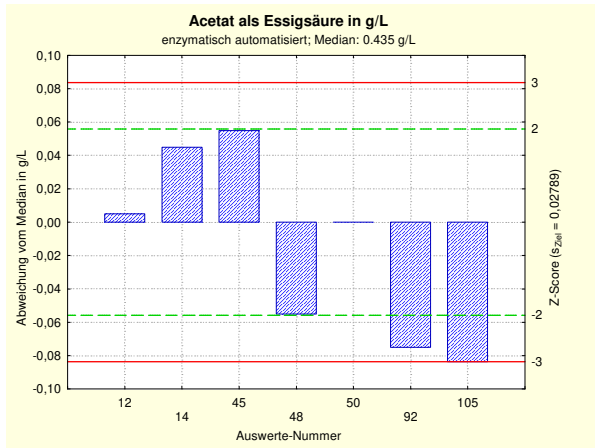
### 4.12.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat.	HPLC, enz.man., <sup>1</sup> H-NMR	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	7	10	9
Minimalwert	0,352	0,180	0,242
Mittelwert	0,420	0,311	0,325
Median	0,435	0,325	0,329
Maximalwert	0,490	0,383	0,383
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,056	0,060	0,041
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,021	0,019	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,028	0,022	0,022
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )			
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )			
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,02	2,74	1,84
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,76	0,87	0,61
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )			

4.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	0,409	0,068
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,322	0,161
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,299	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	6	0,334	0,022
	HPLC, enzymatisch manuell + <sup>1</sup> H-NMR	11	0,326	0,062
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	3	0,550	0,165





**4.13 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]****4.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,55	0,050	0,31	0,47	
08	HPLC	3,32	-0,175	-1,07	-1,64	
21	HPLC	3,47	-0,025	-0,15	-0,23	
22	HPLC	3,83	0,335	2,05	3,14	
64	HPLC	5,07	1,575	9,62	14,76	(**)
90	HPLC	3,40	-0,095	-0,58	-0,89	
92	HPLC	3,65	0,156	0,95	1,46	
111	NMR	3,36	-0,138	-0,84	-1,29	
112	NMR	3,32	-0,172	-1,05	-1,61	
113	NMR	3,52	0,020	0,12	0,19	
114	NMR	< 0,2				
115	NMR	3,64	0,143	0,87	1,34	
116	NMR	3,50	0,000	0,00	0,00	

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

**4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	3,54	0,014	0,08	0,13	
09	enz.(L-), autom.	3,42	-0,110	-0,67	-1,02	
12	enz.(L-), autom.	3,50	-0,030	-0,18	-0,28	
14	enz.(L-), autom.	4,07	0,540	3,27	5,02	(**)
31	enz.(L-), autom.	3,58	0,050	0,30	0,46	
40	enz.(L-), autom.	3,53	0,000	0,00	0,00	
45	enz.(L-), autom.	3,56	0,030	0,18	0,28	
48	enz.(L-), autom.	3,57	0,038	0,23	0,35	
50	enz.(L-), autom.	3,60	0,070	0,42	0,65	
56	enz.(L-), autom.	3,60	0,070	0,42	0,65	
65	enz.(L-) Hand	3,39	-0,142	-0,86	-1,32	
90	enz.(L-), autom.	3,53	0,000	0,00	0,00	
92	enz.(L-), autom.	3,48	-0,050	-0,30	-0,46	
105	enz.(L-), autom.	3,33	-0,205	-1,24	-1,91	
106	enz.(L-) Hand	3,31	-0,220	-1,33	-2,05	

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

**4.13.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	11	15	14
Minimalwert	3,32	3,32	3,31	3,31
Mittelwert	3,635	3,504	3,534	3,495
Median	3,505	3,495	3,530	3,530
Maximalwert	5,07	3,83	4,07	3,60
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,476	0,157	0,176	0,098
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,137	0,047	0,045	0,026
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,164	0,164	0,165	0,165
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	0,107	0,107	0,108	0,108
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	0,218	0,218		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,90	0,96	1,06	0,59
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	4,45	1,48	1,63	0,91
Quotient ( $s_L/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	2,18	0,72		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,84	0,29	0,27	0,16
Quotient ( $u_M/s_{exp \text{ herk.}}$ )	1,29	0,44	0,42	0,24
Quotient ( $u_M/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	0,63	0,22		

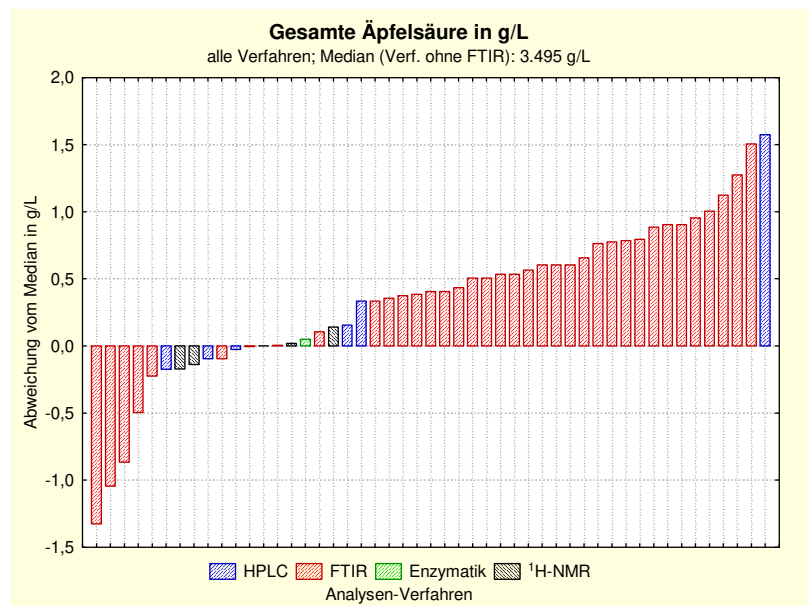
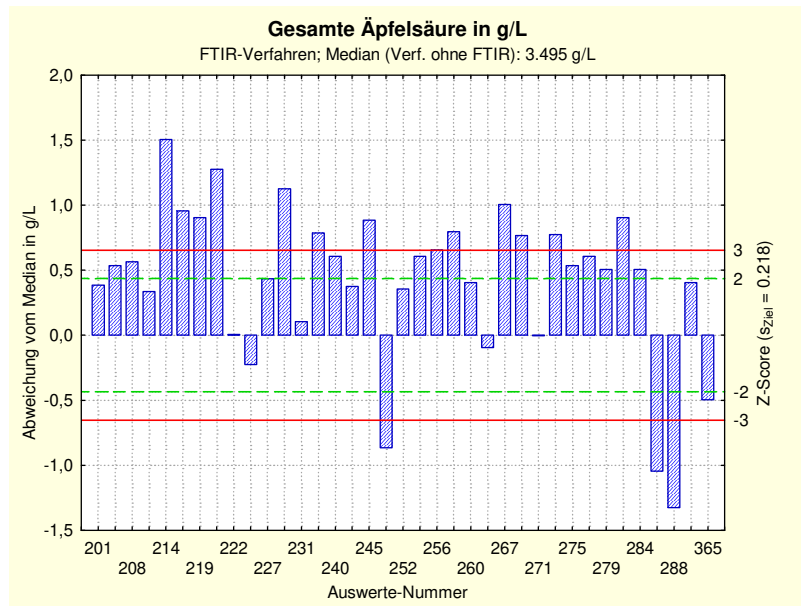
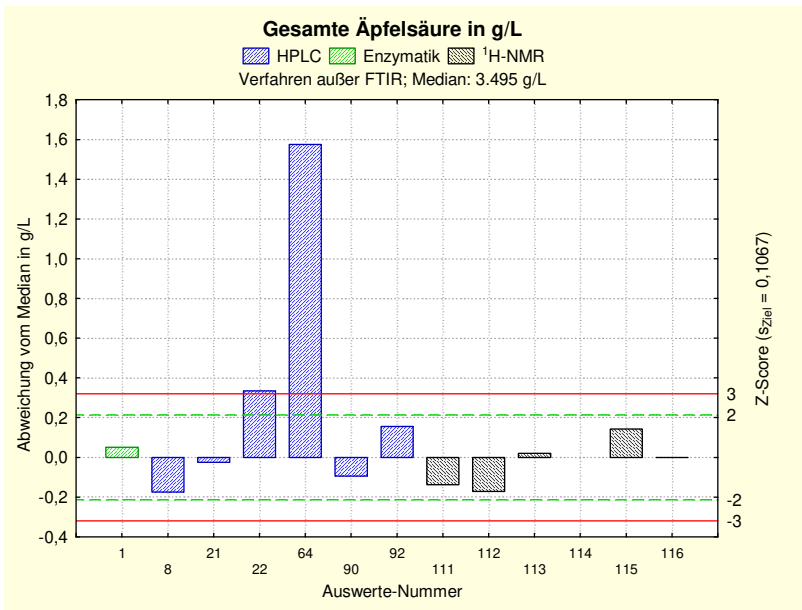
**4.13.4 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,88	0,385	2,35	1,77	
203	FTIR	4,03	0,535	3,27	2,45	
208	FTIR	4,06	0,565	3,45	2,59	
212	FTIR	3,83	0,335	2,05	1,54	
214	FTIR	5,00	1,505	9,19	6,90	(***)
216	FTIR	4,45	0,955	5,83	4,38	
219	FTIR	4,40	0,905	5,53	4,15	
221	FTIR	4,77	1,275	7,79	5,85	(***)
222	FTIR	3,50	0,005	0,03	0,02	
225	FTIR	3,27	-0,225	-1,37	-1,03	
227	FTIR	3,93	0,435	2,66	2,00	
228	FTIR	4,62	1,125	6,87	5,16	(***)
231	FTIR	3,60	0,105	0,64	0,48	
237	FTIR	4,28	0,785	4,79	3,60	
240	FTIR	4,10	0,605	3,69	2,78	
243	FTIR	3,87	0,375	2,29	1,72	
245	FTIR	4,38	0,885	5,40	4,06	
250	FTIR	2,63	-0,865	-5,28	-3,97	
252	FTIR	3,85	0,355	2,17	1,63	
254	FTIR	4,10	0,605	3,69	2,78	
256	FTIR	4,15	0,655	4,00	3,00	
258	FTIR	4,29	0,795	4,85	3,65	
260	FTIR	3,90	0,405	2,47	1,86	
265	FTIR	3,40	-0,095	-0,58	-0,44	
267	FTIR	4,50	1,005	6,14	4,61	
268	FTIR	4,26	0,765	4,67	3,51	
271	FTIR	3,49	-0,005	-0,03	-0,02	
272	FTIR	4,27	0,775	4,73	3,55	
275	FTIR	4,03	0,535	3,27	2,45	
276	FTIR	4,10	0,605	3,69	2,78	
279	FTIR	4,00	0,505	3,08	2,32	
280	FTIR	4,40	0,905	5,53	4,15	
284	FTIR	4,00	0,505	3,08	2,32	
287	FTIR	2,45	-1,045	-6,38	-4,79	
288	FTIR	2,17	-1,325	-8,09	-6,08	(***)
337	FTIR	3,90	0,405	2,47	1,86	
365	FTIR	3,00	-0,495	-3,02	-2,27	

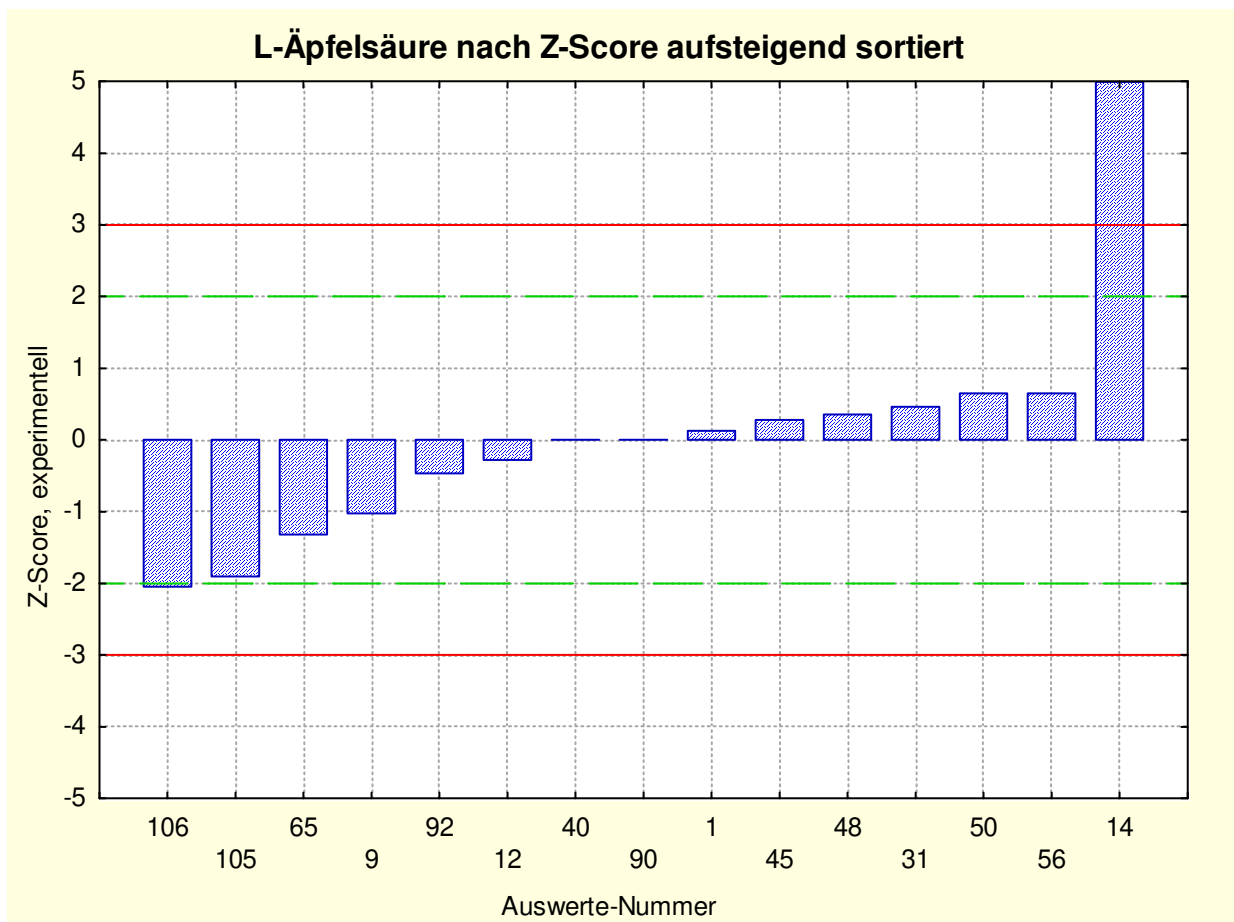
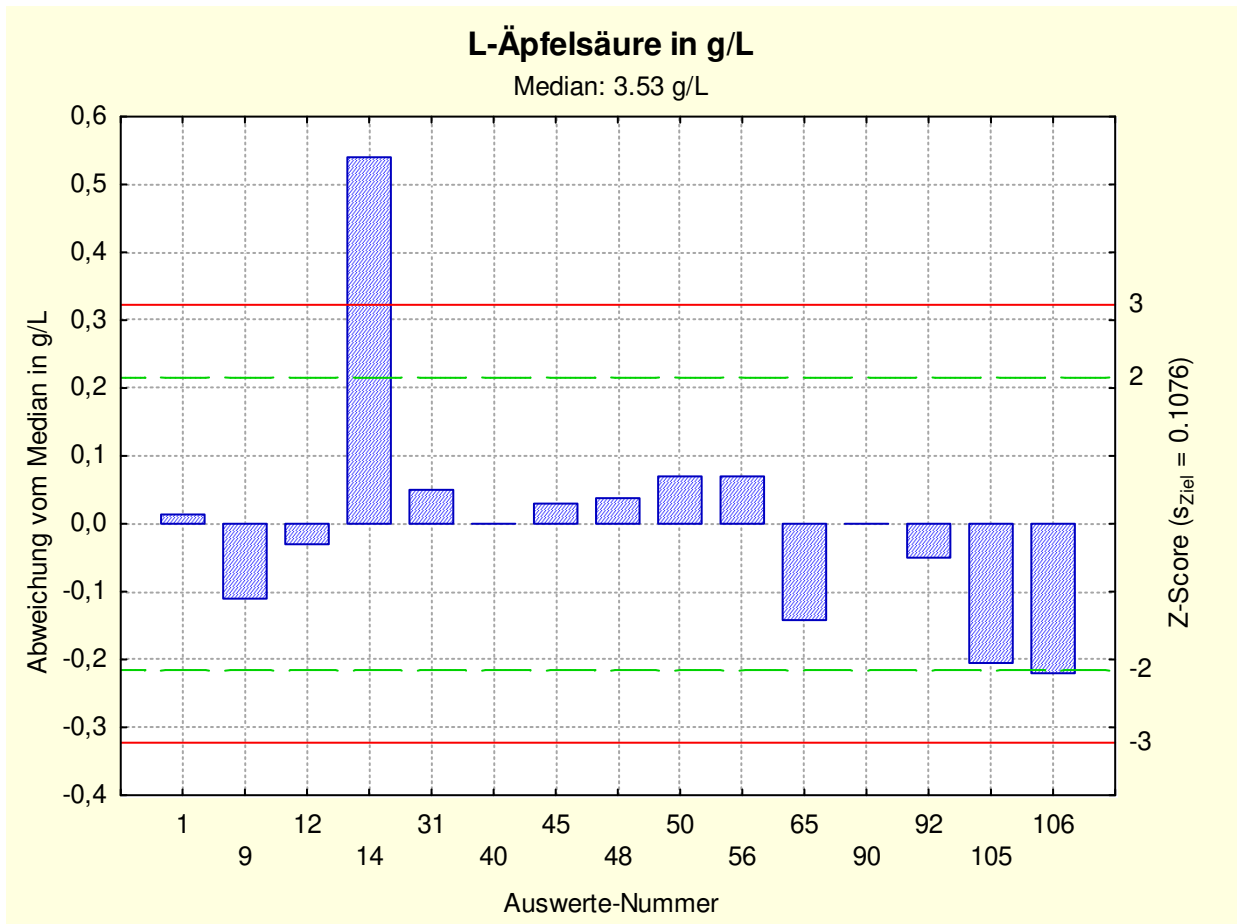
(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	3,647	0,376
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, manuell	1	3,546	
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	7	3,608	0,288
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	37	3,983	0,472
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	3,466	0,145
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	12	3,537	0,084
enz.(L-), Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	3	3,414	0,135
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	15	3,512	0,111







## 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	0,377	0,027	1,16	
08	HPLC	0,360	0,010	0,43	
09	enzymat. autom.	0,321	-0,029	-1,25	
21	HPLC	0,210	-0,140	-6,04	(**)
22	HPLC	0,350	0,000	0,00	
64	HPLC	0,150	-0,200	-8,63	(*)
65	enzymat. Hand	0,387	0,037	1,58	
90	HPLC	0,250	-0,100	-4,31	
92	HPLC	0,674	0,324	13,97	(*)
106	enzymat. Hand	0,340	-0,010	-0,43	
111	NMR	0,345	-0,005	-0,22	
112	NMR	0,318	-0,032	-1,39	
113	NMR	0,343	-0,007	-0,31	
114	NMR	0,372	0,022	0,94	
115	NMR	0,400	0,050	2,14	
116	NMR	0,334	-0,016	-0,70	

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

(\*\*) 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	0,190	0,000	0,00	0,00	
09	enz.(L-) autom.	0,162	-0,028	-2,03	-1,07	
12	enz.(L-) autom.	0,200	0,010	0,72	0,38	
14	enz.(L-) autom.	0,175	-0,015	-1,09	-0,58	
31	enz.(L-) autom.	0,200	0,010	0,72	0,38	
40	enz.(L-) autom.	0,285	0,095	6,88	3,64	
45	enz.(L-) autom.	0,196	0,006	0,43	0,23	
48	enz.(L-) autom.	0,080	-0,110	-7,97	-4,22	
50	enz.(L-) autom.	0,180	-0,010	-0,72	-0,38	
56	enz.(L-) autom.	0,240	0,050	3,62	1,92	
65	enz.(L-) Hand	0,236	0,046	3,33	1,76	
90	enz.(L-) autom.	<BG(0,25)				
105	enz.(L-) autom.	0,187	-0,003	-0,22	-0,12	
106	enz.(L-) Hand	0,160	-0,030	-2,17	-1,15	

### 4.14.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	8	7	13
Minimalwert	0,21	0,25	0,08
Mittelwert	0,324	0,341	0,192
Median	0,345	0,350	0,190
Maximalwert	0,39	0,39	0,29
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,063	0,046	0,048
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,022	0,017	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,023	0,023	0,014
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )			0,026
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{FTIR}$ )			
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,73	1,97	3,50
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )			1,85
Quotient ( $s_L/s_{FTIR}$ )			
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,97	0,74	0,97
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			0,51
Quotient ( $u_M/s_{FTIR}$ )			

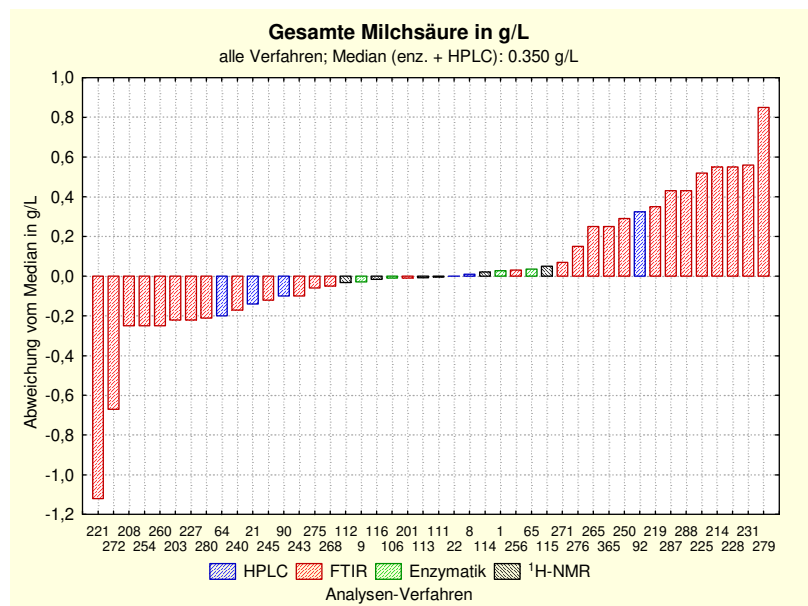
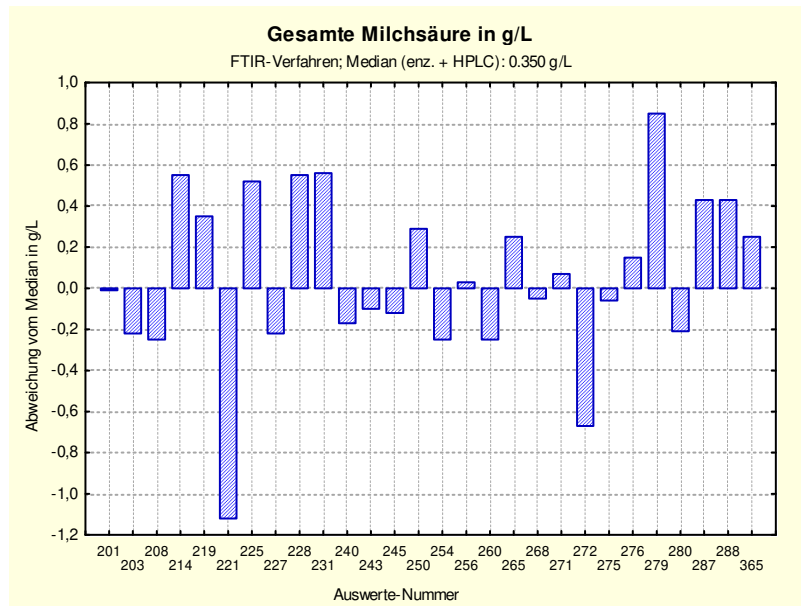
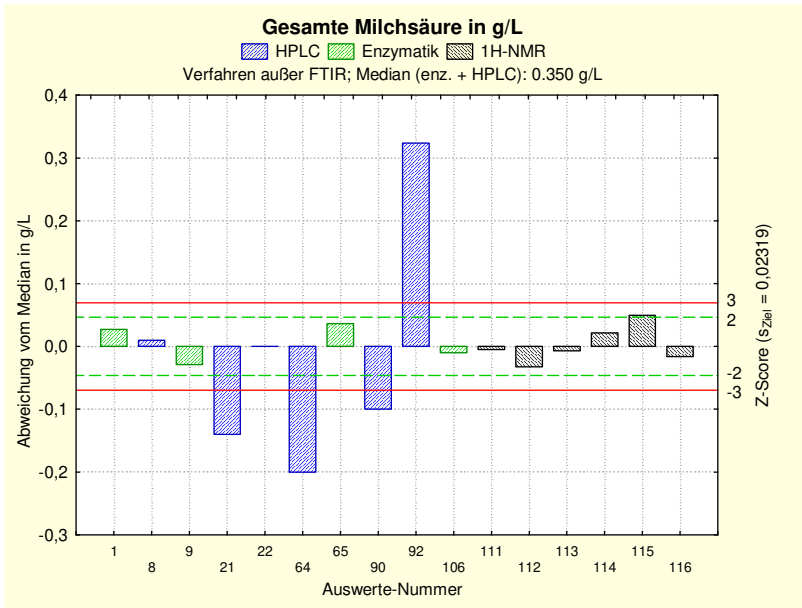
**4.14.4 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

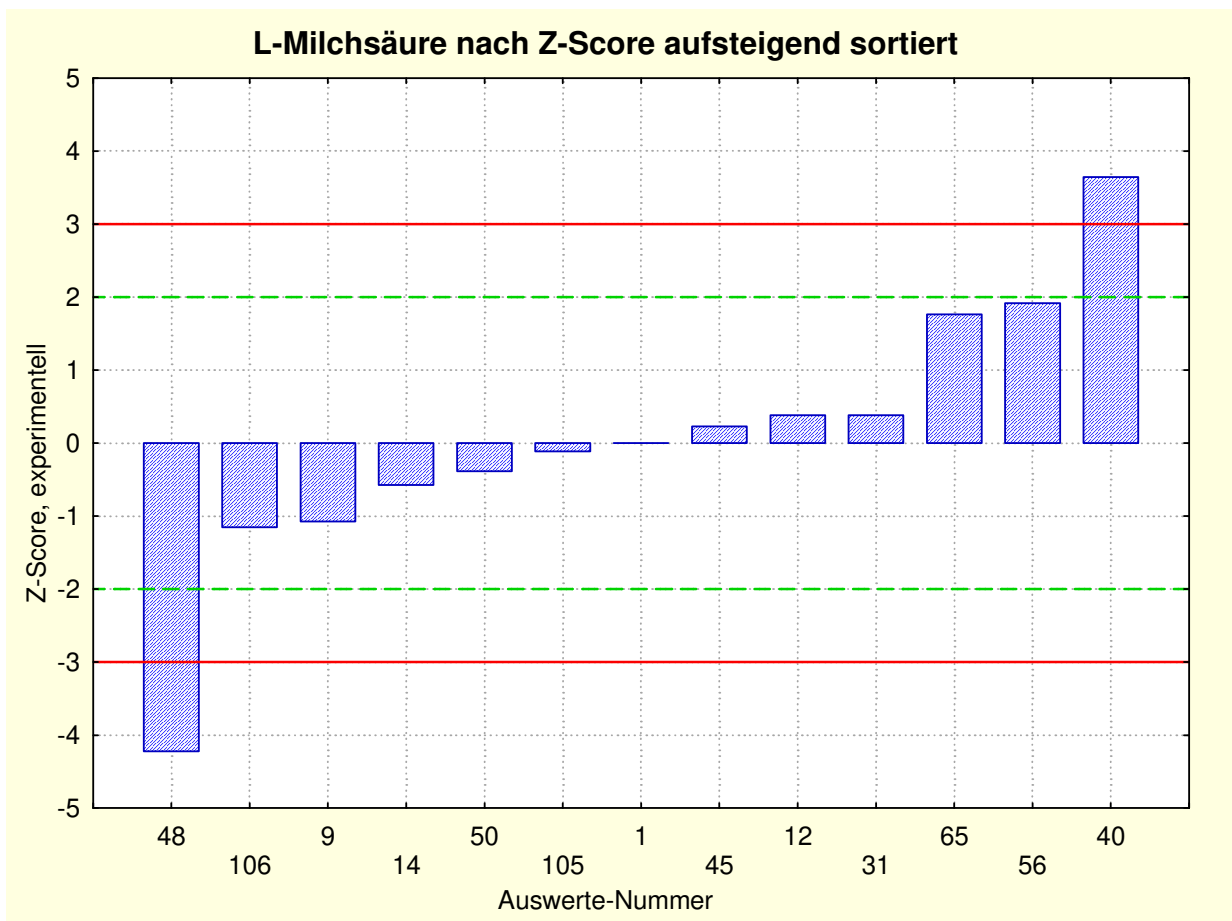
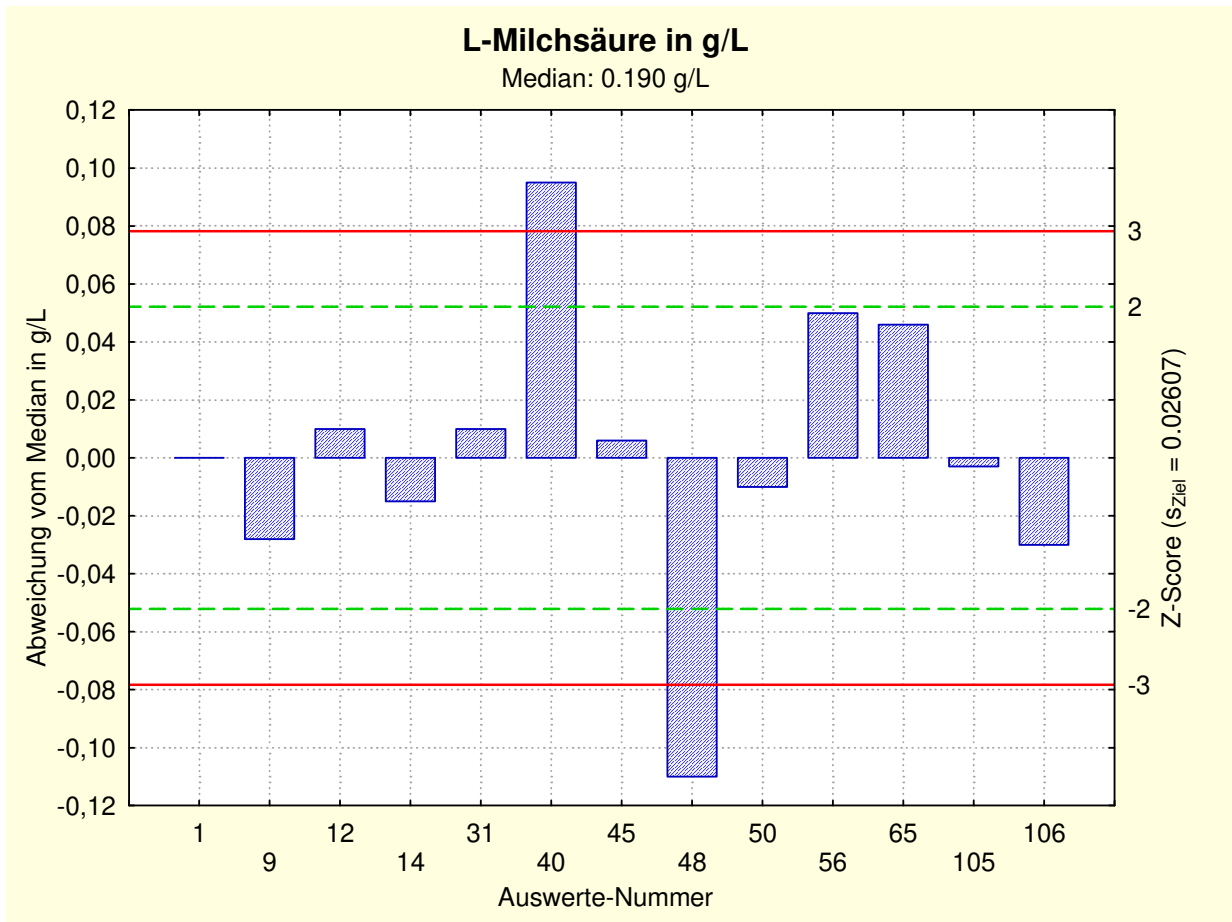
Keine Berechnung von Z-Scores, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereichs

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,340	-0,010			
203	FTIR	0,130	-0,220			
208	FTIR	0,100	-0,250			
212	FTIR	<= 0				
214	FTIR	0,900	0,550			
216	FTIR	<= 0				
219	FTIR	0,700	0,350			
221	FTIR	-0,770	-1,120			
222	FTIR	< 0,3				
225	FTIR	0,870	0,520			
227	FTIR	0,130	-0,220			
228	FTIR	0,900	0,550			
231	FTIR	0,910	0,560			
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	0,180	-0,170			
243	FTIR	0,250	-0,100			
245	FTIR	0,230	-0,120			
250	FTIR	0,640	0,290			
252	FTIR	<= 0				
254	FTIR	0,100	-0,250			
256	FTIR	0,380	0,030			
260	FTIR	0,100	-0,250			
265	FTIR	0,600	0,250			
267	FTIR	<= 0				
268	FTIR	0,300	-0,050			
271	FTIR	0,420	0,070			
272	FTIR	-0,320	-0,670			
275	FTIR	0,290	-0,060			
276	FTIR	0,500	0,150			
279	FTIR	1,200	0,850			
280	FTIR	0,140	-0,210			
284	FTIR	<= 0				
287	FTIR	0,780	0,430			
288	FTIR	0,780	0,430			
337	FTIR	<= 0				
365	FTIR	0,600	0,250			

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	0,314	0,166
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	1	0,321	
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	3	0,370	0,024
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	10	0,327	0,097
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	28	0,428	0,381
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	0,352	0,033
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	10	0,192	0,038
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	3	0,195	0,043
	alle Verfahren L-Milchsäure	13	0,193	0,036





## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P04b

### 5.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 5.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 8.1	1,00309	0,000040	0,30	
04	LwK 8.4	1,00296	-0,000090	-0,68	
05	LwK 8.4	1,00308	0,000030	0,23	
10	LwK 8.4	1,00300	-0,000050	-0,38	
15	LwK 8.4	1,00311	0,000060	0,45	
17	LwK 8.4	1,00290	-0,000150	-1,14	
18	LwK 8.4	1,00300	-0,000050	-0,38	
20	LwK 8.4	1,00311	0,000060	0,45	
23	LwK 8.4	1,00296	-0,000090	-0,68	
26	LwK 8.4	1,00290	-0,000150	-1,14	
29	LwK 8.4	1,00298	-0,000070	-0,53	
32	LwK 8.1	1,00310	0,000050	0,38	
34	LwK 8.4	1,00307	0,000020	0,15	
36	LwK 8.4	1,00307	0,000020	0,15	
38	LwK 8.4	1,00311	0,000060	0,45	
41	LwK 8.4	1,00305	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	1,00299	-0,000060	-0,45	
44	LwK 8.4	1,00310	0,000050	0,38	
53	LwK 8.4	1,00310	0,000050	0,38	
55	LwK 8.4	1,00305	0,000000	0,00	
57	LwK 8.4	1,00310	0,000050	0,38	
61	LwK 8.4	1,00300	-0,000050	-0,38	
63	LwK 8.4	1,00299	-0,000060	-0,45	
66	LwK 8.4	1,00360	0,000550	4,17	
70	LwK 8.4	1,00303	-0,000020	-0,15	
74	LwK 8.4	0,98498	-0,018070	-136,89	(**)
82	LwK 8.4	1,00328	0,000230	1,74	
86	LwK 8.4	1,00300	-0,000050	-0,38	
87	LwK 8.4	1,00302	-0,000030	-0,23	

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

#### 5.1.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	29	28
Minimalwert	0,98498	1,00290
Mittelwert	1,002439	1,003063
Median	1,003050	1,003050
Maximalwert	1,00360	1,00360
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,003360	0,000130
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000624	0,000025
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 ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	25,46	0,99
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	17,69	0,69
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	4,73	0,19
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	3,28	0,13

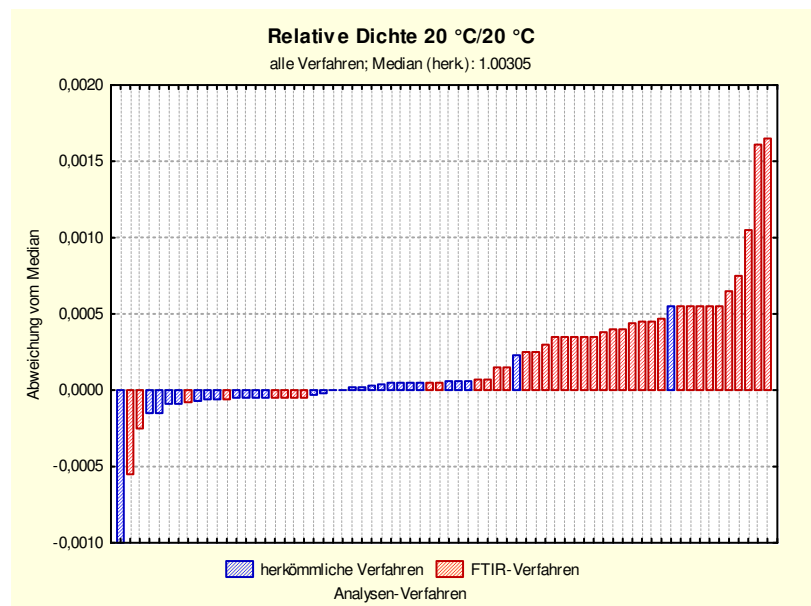
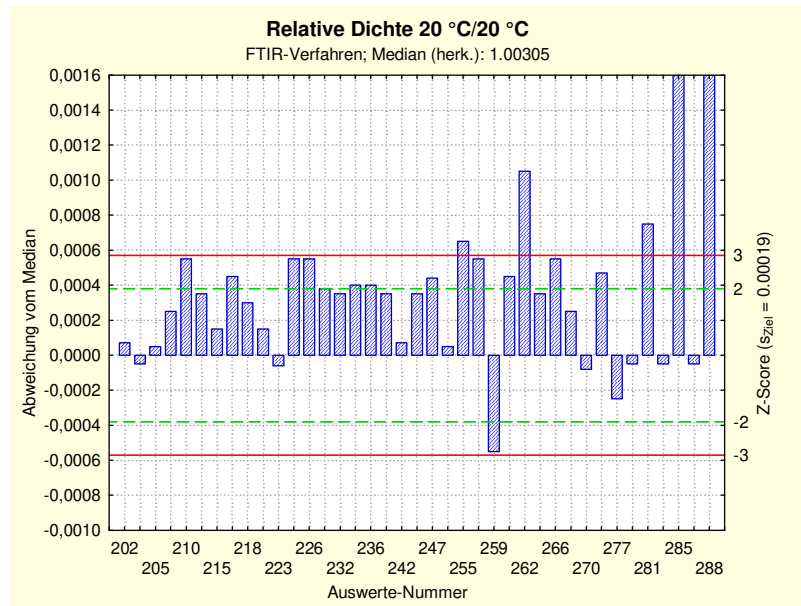
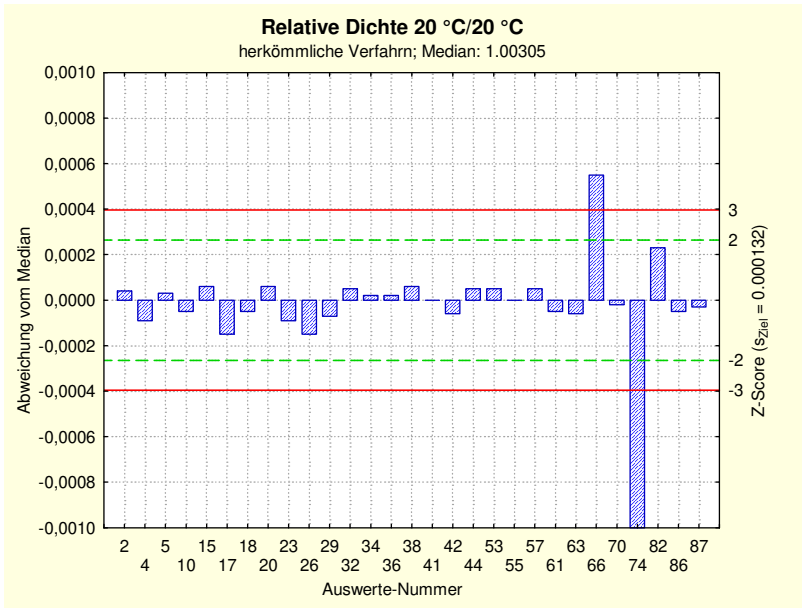
**5.1.3 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	1,00312	0,000070	0,37	
204	FTIR	1,00300	-0,000050	-0,26	
205	FTIR	1,00310	0,000050	0,26	
207	FTIR	1,00330	0,000250	1,32	
210	FTIR	1,00360	0,000550	2,89	
211	FTIR	1,00340	0,000350	1,84	
215	FTIR	1,00320	0,000150	0,79	
217	FTIR	1,00350	0,000450	2,37	
218	FTIR	1,00335	0,000300	1,58	
220	FTIR	1,00320	0,000150	0,79	
223	FTIR	1,00299	-0,000060	-0,32	
224	FTIR	1,00360	0,000550	2,89	
226	FTIR	1,00360	0,000550	2,89	
229	FTIR	1,00343	0,000380	2,00	
232	FTIR	1,00340	0,000350	1,84	
234	FTIR	1,00345	0,000400	2,11	
236	FTIR	1,00345	0,000400	2,11	
241	FTIR	1,00340	0,000350	1,84	
242	FTIR	1,00312	0,000070	0,37	
244	FTIR	1,00340	0,000350	1,84	
247	FTIR	1,00349	0,000440	2,32	
249	FTIR	1,00310	0,000050	0,26	
255	FTIR	1,00370	0,000650	3,42	
257	FTIR	1,00360	0,000550	2,89	
259	FTIR	1,00250	-0,000550	-2,89	
261	FTIR	1,00350	0,000450	2,37	
262	FTIR	1,00410	0,001050	5,53	(***)
263	FTIR	1,00340	0,000350	1,84	
266	FTIR	1,00360	0,000550	2,89	
269	FTIR	1,00330	0,000250	1,32	
270	FTIR	1,00297	-0,000080	-0,42	
273	FTIR	1,00352	0,000470	2,47	
277	FTIR	1,00280	-0,000250	-1,32	
278	FTIR	1,00300	-0,000050	-0,26	
281	FTIR	1,00380	0,000750	3,95	
282	FTIR	1,00300	-0,000050	-0,26	
285	FTIR	1,00466	0,001610	8,47	(***)
287	FTIR	1,00300	-0,000050	-0,26	
288	FTIR	1,00470	0,001650	8,68	(***)
365	FTIR	0,99370	0,000830	4,37	

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

**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	1,00310	0,000008
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	27	1,00303	0,000080
	herkömmliche Verfahren	29	1,00304	0,000078
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	39	1,00335	0,000315





## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 2.4	88,37	-0,010	-0,00	-0,02	
04	LwK 2.1	89,42	1,041	0,41	1,95	
05	LwK 2.4	87,73	-0,650	-0,26	-1,21	
10	LwK 2.1	88,00	-0,380	-0,15	-0,71	
15	LwK 2.9	89,10	0,720	0,28	1,35	
17	LwK 2.9	89,70	1,320	0,52	2,47	
18	LwK 2.1	90,31	1,930	0,76	3,61	
20	LwK 2.9	89,21	0,830	0,33	1,55	
23	LwK 2.5	87,00	-1,380	-0,54	-2,58	
26	LwK 2.4	89,35	0,970	0,38	1,81	
29	LwK 2.1	88,39	0,010	0,00	0,02	
32	LwK 2.4	87,63	-0,750	-0,29	-1,40	
38	LwK 2.9	89,40	1,020	0,40	1,91	
41	LwK 2.9	89,13	0,750	0,29	1,40	
42	LwK 2.4	89,30	0,920	0,36	1,72	
44	LwK 2.1	88,80	0,420	0,16	0,79	
53	LwK 2.9	89,42	1,040	0,41	1,94	
55	LwK 2.1	88,36	-0,020	-0,01	-0,04	
57	LwK 2.5	87,20	-1,180	-0,46	-2,21	
61	LwK 2.9	88,20	-0,180	-0,07	-0,34	
63	LwK 2.9	89,75	1,370	0,54	2,56	
66	LwK 2.5	89,85	1,470	0,58	2,75	
70	LwK 2.9	90,31	1,930	0,76	3,61	
74	LwK 2.1	88,87	0,488	0,19	0,91	
78	LwK 2.4	87,79	-0,590	-0,23	-1,10	
82	LwK 2.1	87,50	-0,880	-0,35	-1,64	
86	LwK 2.9	89,30	0,920	0,36	1,72	
87	LwK 2.9	89,18	0,804	0,32	1,50	
99	LwK 2.9	88,81	0,430	0,17	0,80	
102	LwK 2.9	88,20	-0,180	-0,07	-0,34	
103	LwK 2.4	88,30	-0,080	-0,03	-0,15	
107	LwK 2.4	89,05	0,670	0,26	1,25	
108	LwK 2.9	89,60	1,220	0,48	2,28	
111	NMR	88,70	0,316	0,12	0,59	
112	NMR	85,41	-2,969	-1,17	-5,55	(***)
113	NMR	88,89	0,510	0,20	0,95	
114	NMR	83,55	-4,831	-1,90	-9,03	(***)
116	NMR	89,02	0,644	0,25	1,20	

Die Messwerte in roter Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

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

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

### 5.2.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	16
Minimalwert	87,50
Mittelwert	88,573
Median	88,380
Maximalwert	90,31
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,780
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,195
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,547
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,31
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,46
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,88
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,36
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,22

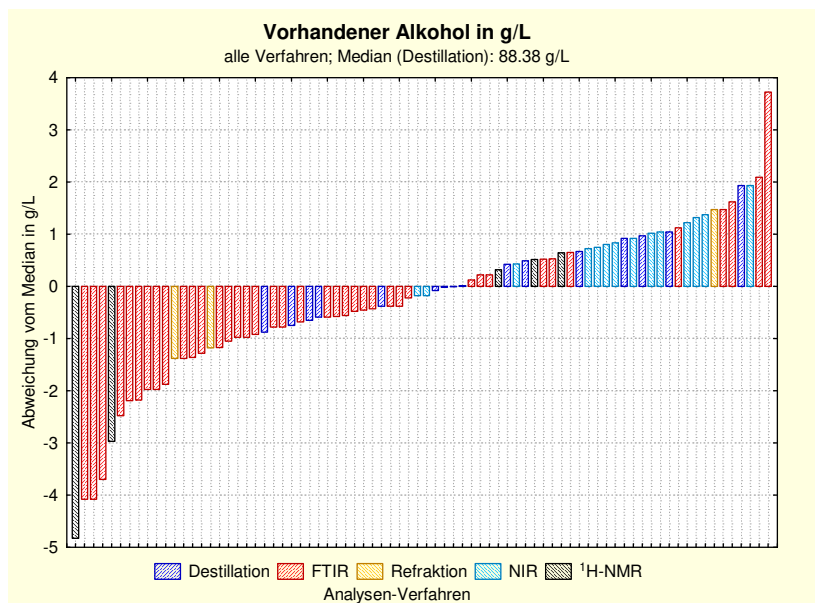
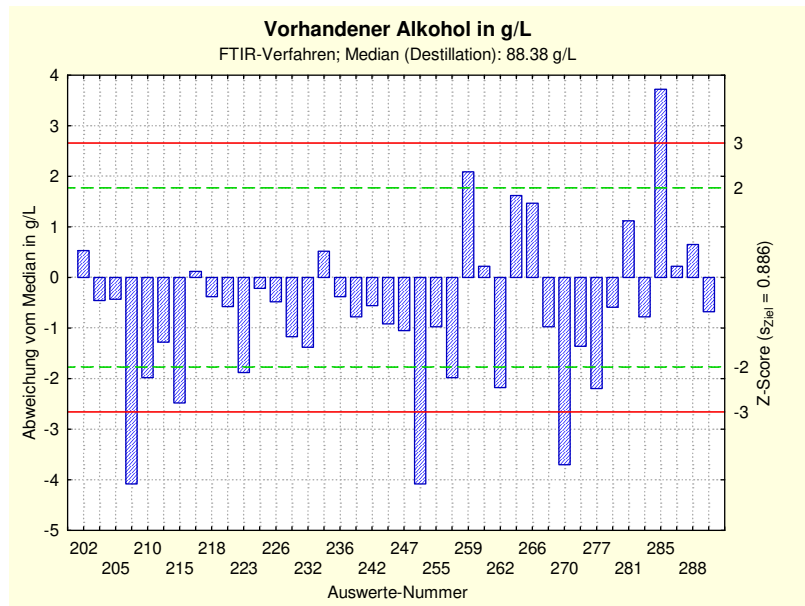
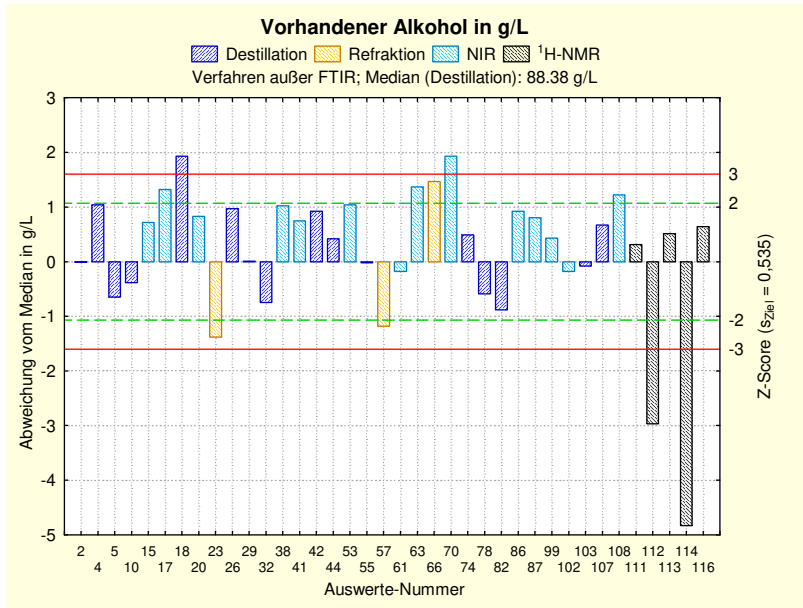
### 5.2.3 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 2.8	88,91	0,530	0,21	0,60	
204	LwK 2.8	87,92	-0,459	-0,18	-0,52	
205	LwK 2.8	87,95	-0,430	-0,17	-0,49	
207	LwK 2.8	84,30	-4,080	-1,60	-4,60	
210	LwK 2.8	86,40	-1,980	-0,78	-2,23	
211	LwK 2.8	87,10	-1,280	-0,50	-1,44	
215	LwK 2.8	85,90	-2,480	-0,97	-2,80	
217	LwK 2.8	88,50	0,120	0,05	0,14	
218	LwK 2.8	88,00	-0,380	-0,15	-0,43	
220	LwK 2.8	87,80	-0,580	-0,23	-0,65	
223	LwK 2.8	86,50	-1,880	-0,74	-2,12	
224	LwK 2.8	88,16	-0,220	-0,09	-0,25	
226	LwK 2.8	87,90	-0,480	-0,19	-0,54	
229	LwK 2.8	87,21	-1,170	-0,46	-1,32	
232	LwK 2.8	87,00	-1,380	-0,54	-1,56	
234	LwK 2.8	88,90	0,520	0,20	0,59	
236	LwK 2.8	88,00	-0,380	-0,15	-0,43	
241	LwK 2.8	87,60	-0,780	-0,31	-0,88	
242	LwK 2.8	87,82	-0,560	-0,22	-0,63	
244	LwK 2.8	87,46	-0,920	-0,36	-1,04	
247	LwK 2.8	87,33	-1,050	-0,41	-1,19	
249	LwK 2.8	84,30	-4,080	-1,60	-4,60	
255	LwK 2.8	87,40	-0,980	-0,38	-1,11	
257	LwK 2.8	86,40	-1,980	-0,78	-2,23	
259	LwK 2.8	90,47	2,090	0,82	2,36	
261	LwK 2.8	88,60	0,220	0,09	0,25	
262	LwK 2.8	86,20	-2,180	-0,86	-2,46	
263	LwK 2.8	90,00	1,620	0,64	1,83	
266	LwK 2.8	89,85	1,470	0,58	1,66	
269	LwK 2.8	87,40	-0,980	-0,38	-1,11	
270	LwK 2.8	84,68	-3,700	-1,45	-4,18	
273	LwK 2.8	87,02	-1,360	-0,53	-1,53	
277	LwK 2.8	86,19	-2,195	-0,86	-2,48	
278	LwK 2.8	87,79	-0,590	-0,23	-0,67	
281	LwK 2.8	89,50	1,120	0,44	1,26	
282	LwK 2.8	87,60	-0,780	-0,31	-0,88	
285	LwK 2.8	92,10	3,720	1,46	4,20	
287	LwK 2.8	88,60	0,220	0,09	0,25	
288	LwK 2.8	89,03	0,650	0,26	0,73	
311	LwK 2.8	87,70	-0,680	-0,27	-0,77	

Die Messwerte in **roter** Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

### 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	8	88,68	0,857
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	8 16	88,44 88,54	0,807 0,798
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	3	87,87	1,522
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	40	87,69	1,292
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	14	89,26	0,502
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	87,24	2,697



### 5.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 3.3	46,40	-0,20	-0,14	-0,34	
05	LwK 3.3	46,25	-0,35	-0,24	-0,59	
10	LwK 3.3	46,30	-0,30	-0,20	-0,51	
15	LwK 3.3	46,80	0,20	0,14	0,34	
17	LwK 3.3	46,60	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 3.3	47,00	0,40	0,27	0,67	
20	LwK 3.3	46,90	0,30	0,20	0,51	
23	LwK 3.3	45,50	-1,10	-0,74	-1,85	
26	LwK 3.3	46,32	-0,28	-0,19	-0,46	
29	LwK 3.2	46,20	-0,40	-0,27	-0,67	
32	LwK 3.3	46,20	-0,40	-0,27	-0,67	
38	LwK 3.3	46,90	0,30	0,20	0,51	
41	LwK 3.3	46,60	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	46,60	0,00	0,00	0,00	
44	LwK 3.3	46,70	0,10	0,07	0,17	
53	LwK 3.3	47,00	0,40	0,27	0,67	
55	LwK 3.3	46,50	-0,10	-0,07	-0,17	
57	LwK 3.3	46,00	-0,60	-0,41	-1,01	
61	LwK 3.3	46,30	-0,30	-0,20	-0,51	
63	LwK 3.3	47,00	0,40	0,27	0,67	
82	LwK 3.2	46,70	0,10	0,07	0,17	
86	LwK 3.3	46,60	0,00	0,00	0,00	
108	LwK 3.3	47,70	1,10	0,74	1,85	

#### 5.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR (gemessen)	46,30	-0,30	-0,20	-0,51	
205	FTIR (gemessen)	44,86	-1,74	-1,18	-2,93	
210	FTIR (gemessen)	47,50	0,90	0,61	1,52	
215	FTIR (gemessen)	45,90	-0,70	-0,47	-1,18	
217	FTIR (gemessen)	46,10	-0,50	-0,34	-0,84	
218	FTIR (gemessen)	46,79	0,19	0,13	0,32	
220	FTIR (gemessen)	45,70	-0,90	-0,61	-1,52	
223	LwK 3.3 (herk.)	45,80	-0,80	-0,54	-1,35	
229	FTIR (gemessen)	46,78	0,18	0,12	0,30	
232	k. A.	46,09	-0,51	-0,34	-0,86	
236	LwK 3.3 (herk.)	46,20	-0,40	-0,27	-0,67	
244	FTIR (gemessen)	46,65	0,05	0,03	0,08	
247	FTIR (gemessen)	45,95	-0,65	-0,44	-1,09	
255	FTIR (gemessen)	47,30	0,70	0,47	1,18	
259	LwK 3.3 (herk.)	45,80	-0,80	-0,54	-1,35	
262	FTIR (gemessen)	46,30	-0,30	-0,20	-0,51	
263	FTIR (gemessen)	47,10	0,50	0,34	0,84	
269	FTIR (gemessen)	46,90	0,30	0,20	0,51	
270	FTIR (gemessen)	47,00	0,40	0,27	0,67	
273	k. A.	45,90	-0,70	-0,47	-1,18	
282	FTIR (gemessen)	46,10	-0,50	-0,34	-0,84	
285	FTIR (gemessen)	46,80	0,20	0,14	0,34	
287	FTIR (gemessen)	47,60	1,00	0,68	1,68	
288	k. A.	51,00	4,40	2,98	7,41	(***)

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

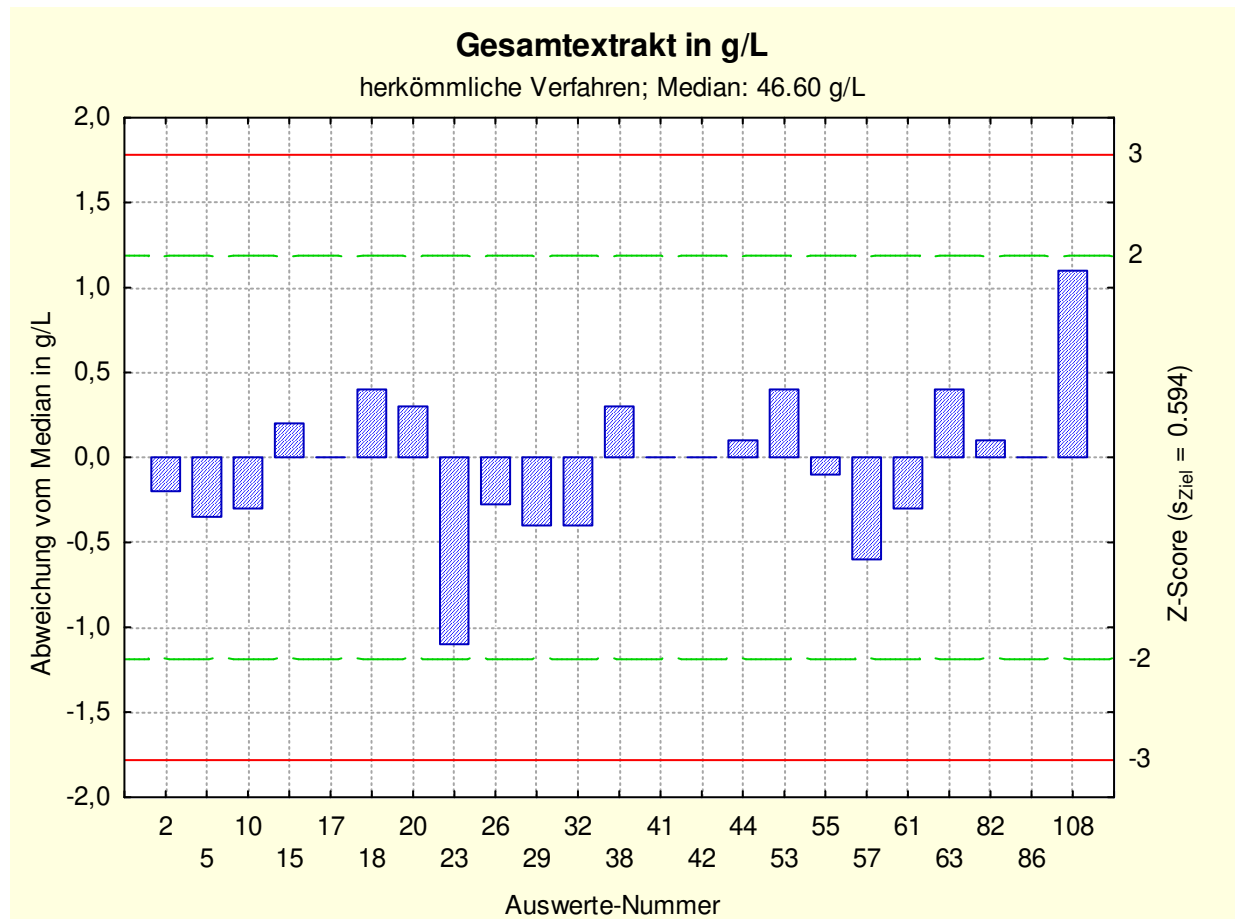
### 5.3.3 Deskriptive Ergebnisse

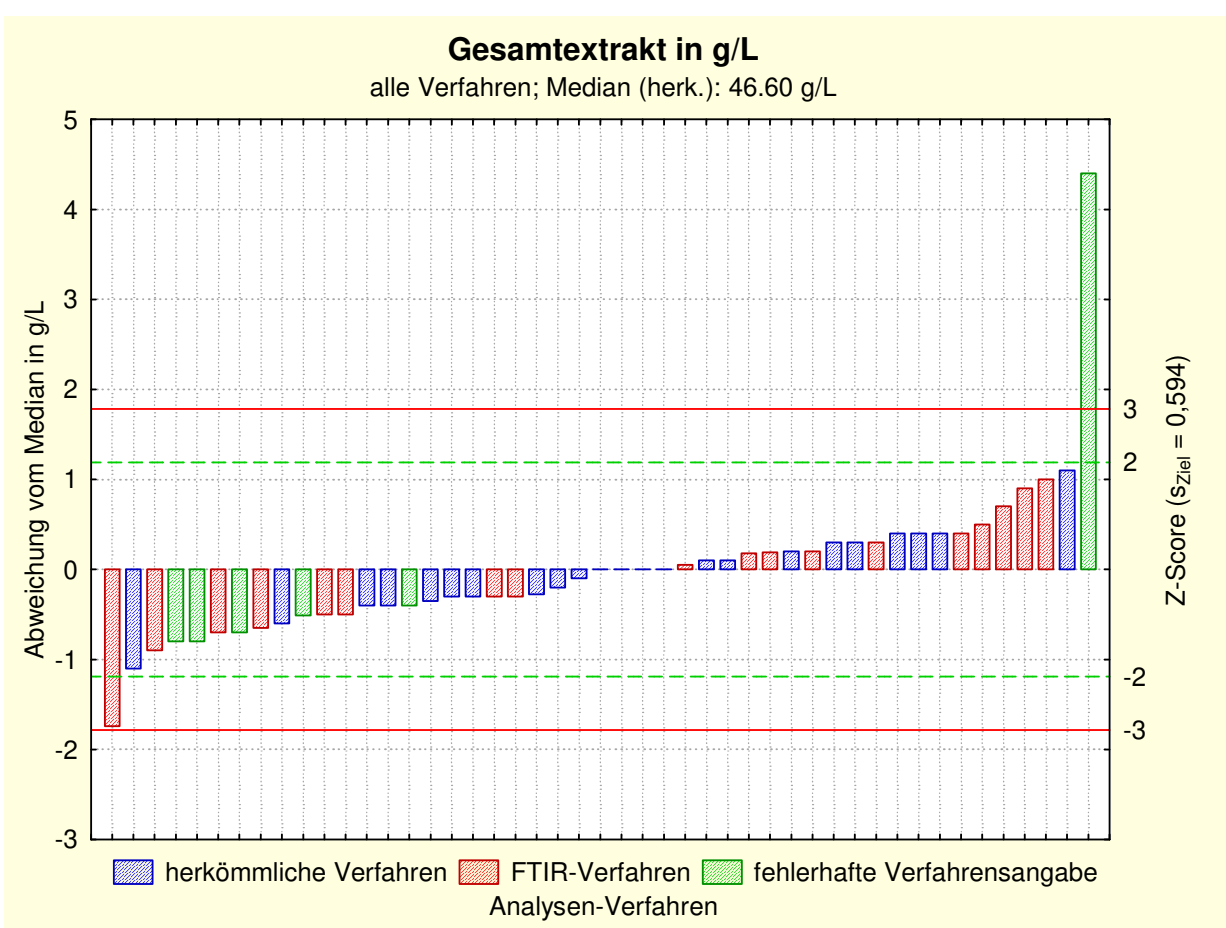
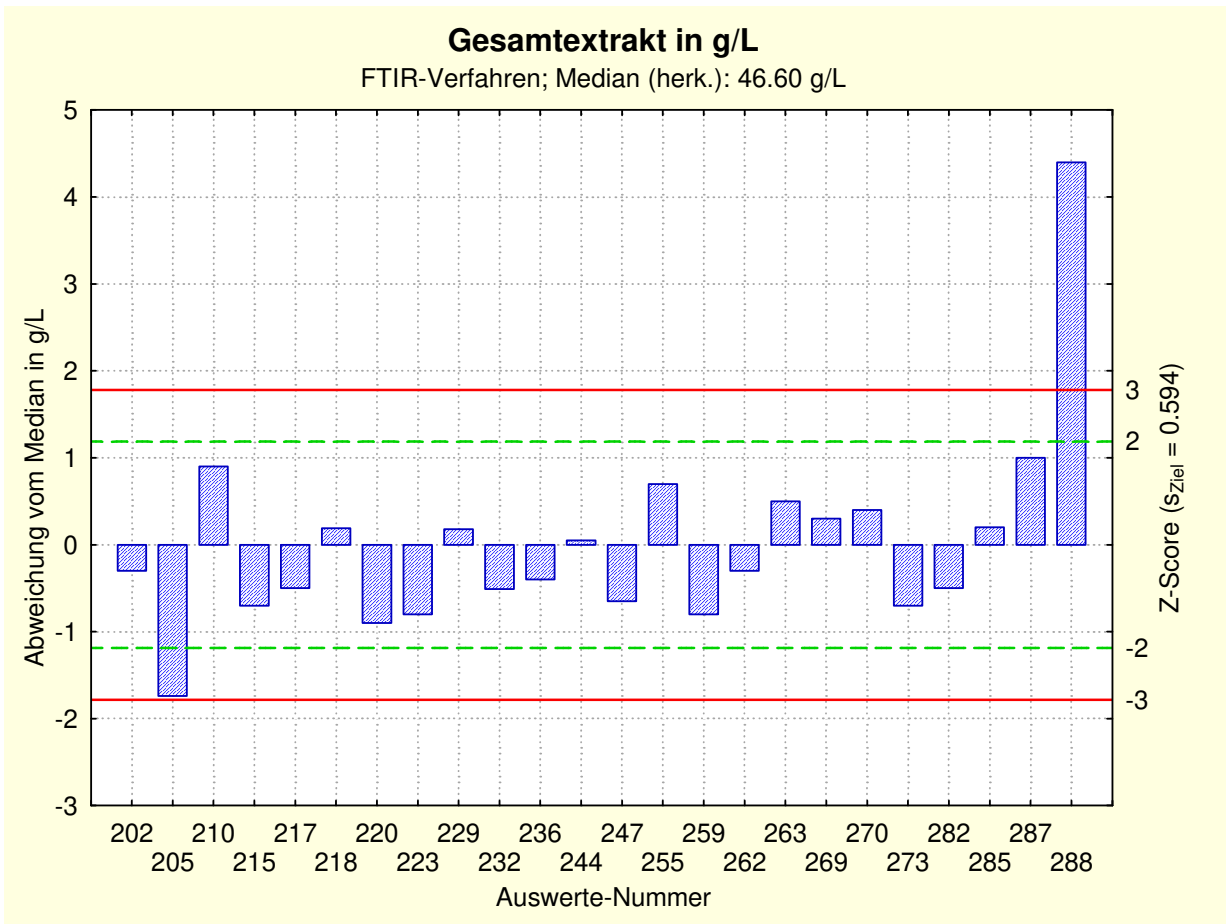
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	45,5
Mittelwert	46,57
Median	46,60
Maximalwert	47,7
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,438
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,091
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,479
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,30
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,74
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,78)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,06
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,15
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,16)

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

### 5.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	2	46,450	0,401
LwK 3.3 (herk.)	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	21	46,578	0,386
		23	46,565	0,378
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	18	46,572	0,699
k. A.	keine Verfahrensangabe	3	47,269	2,483





## 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
02	LwK 4.5	22,22	1,045	1,38	1,70	
05	LwK 4.5	21,89	0,715	0,95	1,16	
10	LwK 4.1	20,20	-0,975	-1,29	-1,59	
15	LwK 4.5	21,20	0,025	0,03	0,04	
18	LwK 4.5	21,01	-0,165	-0,22	-0,27	
20	LwK 4.7	20,81	-0,365	-0,48	-0,59	
23	LwK 4.4	22,00	0,825	1,09	1,34	
26	LwK 4.7	21,30	0,125	0,17	0,20	
29	LwK 4.5	21,15	-0,025	-0,03	-0,04	
32	LwK 4.4	21,20	0,025	0,03	0,04	
38	LwK 4.5	21,99	0,815	1,08	1,33	
41	LwK 4.5	21,30	0,125	0,17	0,20	
42	LwK 4.5	21,39	0,212	0,28	0,34	
44	LwK 4.5	21,40	0,225	0,30	0,37	
53	LwK 4.5	21,10	-0,075	-0,10	-0,12	
55	LwK 4.5	20,76	-0,415	-0,55	-0,68	
57	LwK 4.5	21,90	0,725	0,96	1,18	
61	LwK 4.5	20,00	-1,175	-1,55	-1,91	
63	LwK 4.5	19,57	-1,605	-2,12	-2,61	
70	LwK 4.5	20,77	-0,405	-0,54	-0,66	
74	LwK 4.4	22,40	1,225	1,62	1,99	
78	LwK 4.4	21,20	0,025	0,03	0,04	
82	LwK 4.5	20,46	-0,715	-0,95	-1,16	
86	LwK 4.4	23,10	1,925	2,54	3,13	
108	LwK 4.4	20,70	-0,475	-0,63	-0,77	
111	NMR	19,39	-1,782	-2,36	-2,90	
112	NMR	20,31	-0,862	-1,14	-1,40	
113	NMR	20,52	-0,655	-0,87	-1,07	
114	NMR	20,80	-0,371	-0,49	-0,60	
115	NMR	20,39	-0,787	-1,04	-1,28	
116	NMR	20,19	-0,984	-1,30	-1,60	

### 5.4.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten
Gültige Werte	18
Minimalwert	19,57
Mittelwert	21,123
Median	21,175
Maximalwert	22,22
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,679
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,160
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,757
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk_z}$ )	0,615
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,584)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,90
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk_z}$ )	1,11
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(1,16)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,21
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk_z}$ )	0,26
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,27)

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



### 5.4.3 FTIR-Laboregebnisse ( wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	21,60	0,425	0,56	0,69	
205	LwK 4.8	20,34	-0,835	-1,10	-1,36	
207	LwK 4.8	23,60	2,425	3,21	3,95	
210	LwK 4.8	19,80	-1,375	-1,82	-2,24	
211	LwK 4.8	24,30	3,125	4,13	5,08	(***)
215	LwK 4.8	21,70	0,525	0,69	0,85	
217	LwK 4.8	20,67	-0,505	-0,67	-0,82	
220	LwK 4.8	23,74	2,565	3,39	4,17	
223	LwK 4.8	22,00	0,825	1,09	1,34	
224	LwK 4.8	23,15	1,975	2,61	3,21	
226	LwK 4.8	22,20	1,025	1,35	1,67	
229	LwK 4.8	22,13	0,955	1,26	1,55	
232	LwK 4.8	21,11	-0,065	-0,09	-0,11	
234	LwK 4.8	23,46	2,285	3,02	3,72	
236	LwK 4.8	22,00	0,825	1,09	1,34	
241	LwK 4.8	19,80	-1,375	-1,82	-2,24	
242	LwK 4.8	20,64	-0,535	-0,71	-0,87	
244	LwK 4.8	22,53	1,355	1,79	2,20	
247	LwK 4.8	21,57	0,395	0,52	0,64	
249	LwK 4.8	20,50	-0,675	-0,89	-1,10	
255	LwK 4.8	22,50	1,325	1,75	2,16	
257	LwK 4.8	23,48	2,305	3,05	3,75	
259	LwK 4.8	28,10	6,925	9,15	11,27	(***)
261	LwK 4.8	21,20	0,025	0,03	0,04	
262	LwK 4.8	23,50	2,325	3,07	3,78	
263	LwK 4.8	21,76	0,585	0,77	0,95	
266	LwK 4.8	21,28	0,105	0,14	0,17	
269	LwK 4.8	22,60	1,425	1,88	2,32	
270	LwK 4.8	22,79	1,615	2,13	2,63	
273	LwK 4.8	22,58	1,405	1,86	2,29	
277	LwK 4.8	21,24	0,065	0,09	0,11	
281	LwK 4.8	23,30	2,125	2,81	3,46	
282	LwK 4.8	22,30	1,125	1,49	1,83	
285	LwK 4.8	21,84	0,665	0,88	1,08	

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

### 5.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	20,20	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	6	21,74	0,962
	reduktometrische Verfahren	7	21,53	1,111
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	16	21,17	0,723
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	2	21,06	0,393
	enzymatische und HPLC-Verfahren	18	21,16	0,665
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (mitgeteiltes Ergebnis)	34	22,11	1,307
	Basis: Vergärbare Zucker (Summe aus FTIR-Glucose und FTIR-Fructose, nachberechnet)	38	22,23	1,080
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	20,31	0,416



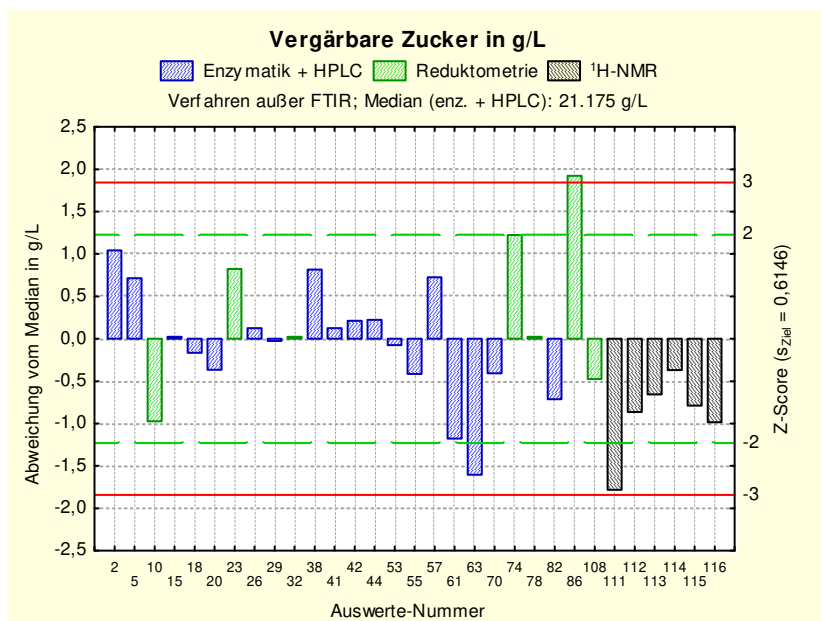
**5.4.5 FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)**

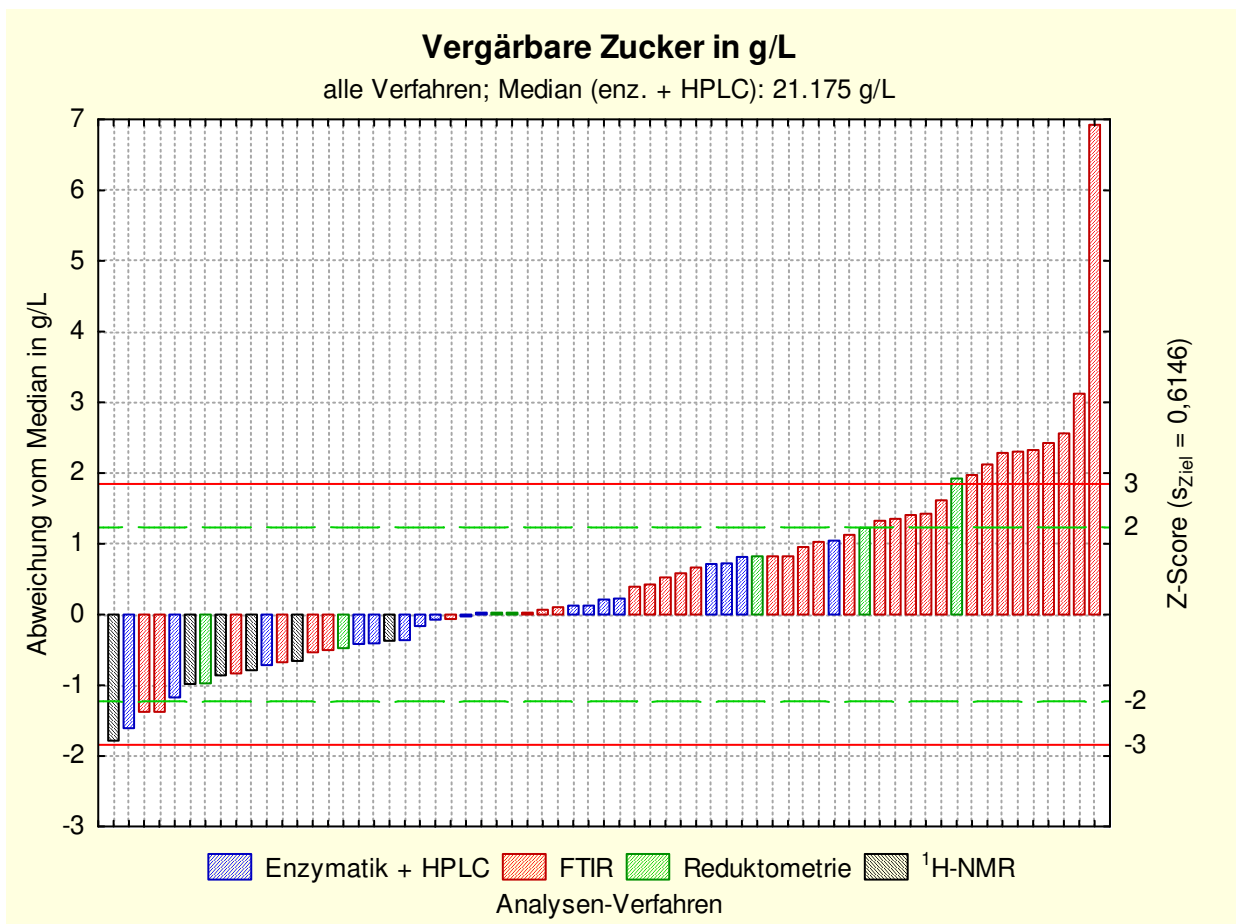
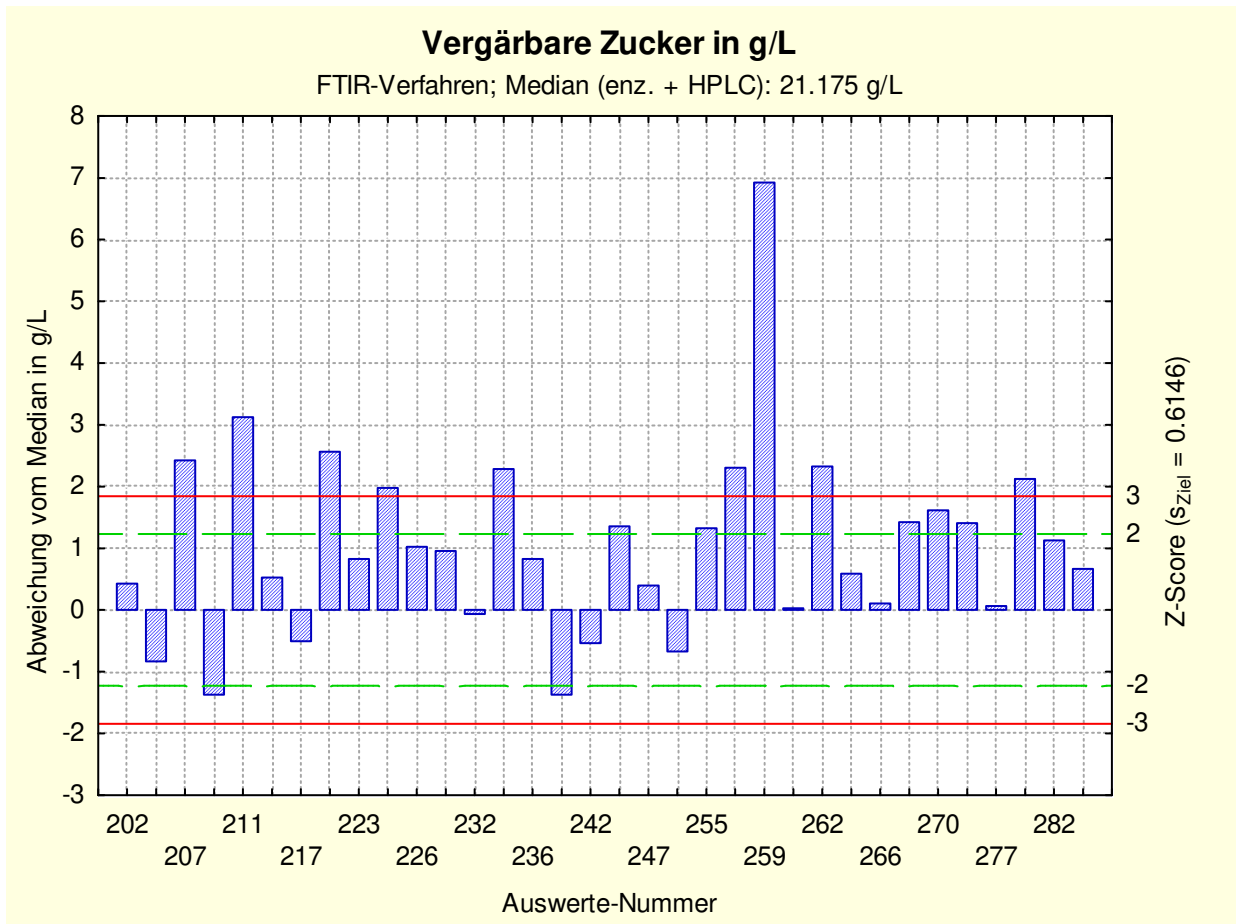
**(Summe aus FTIR-Glucose und FTIR-Fructose, vom Auswerter berechnet)**

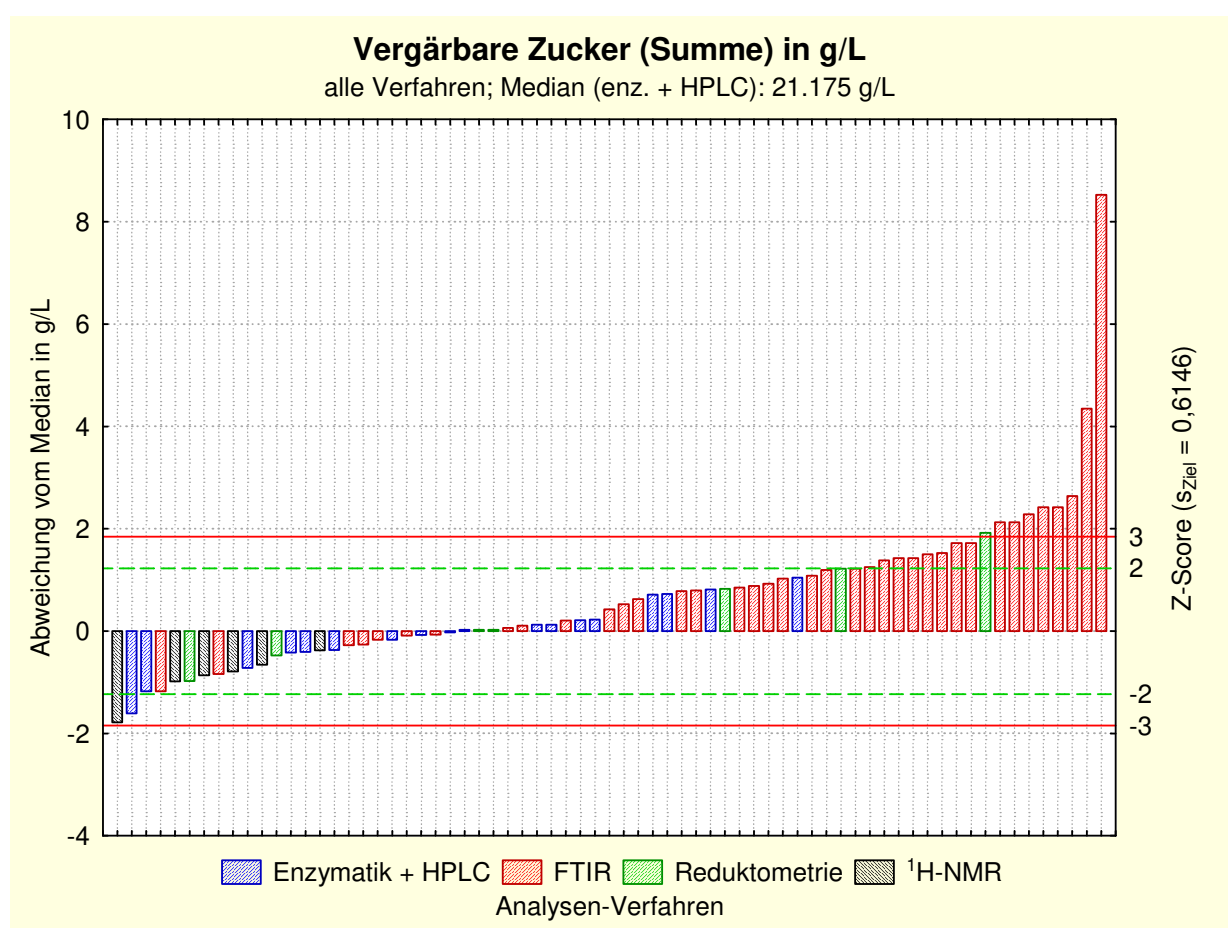
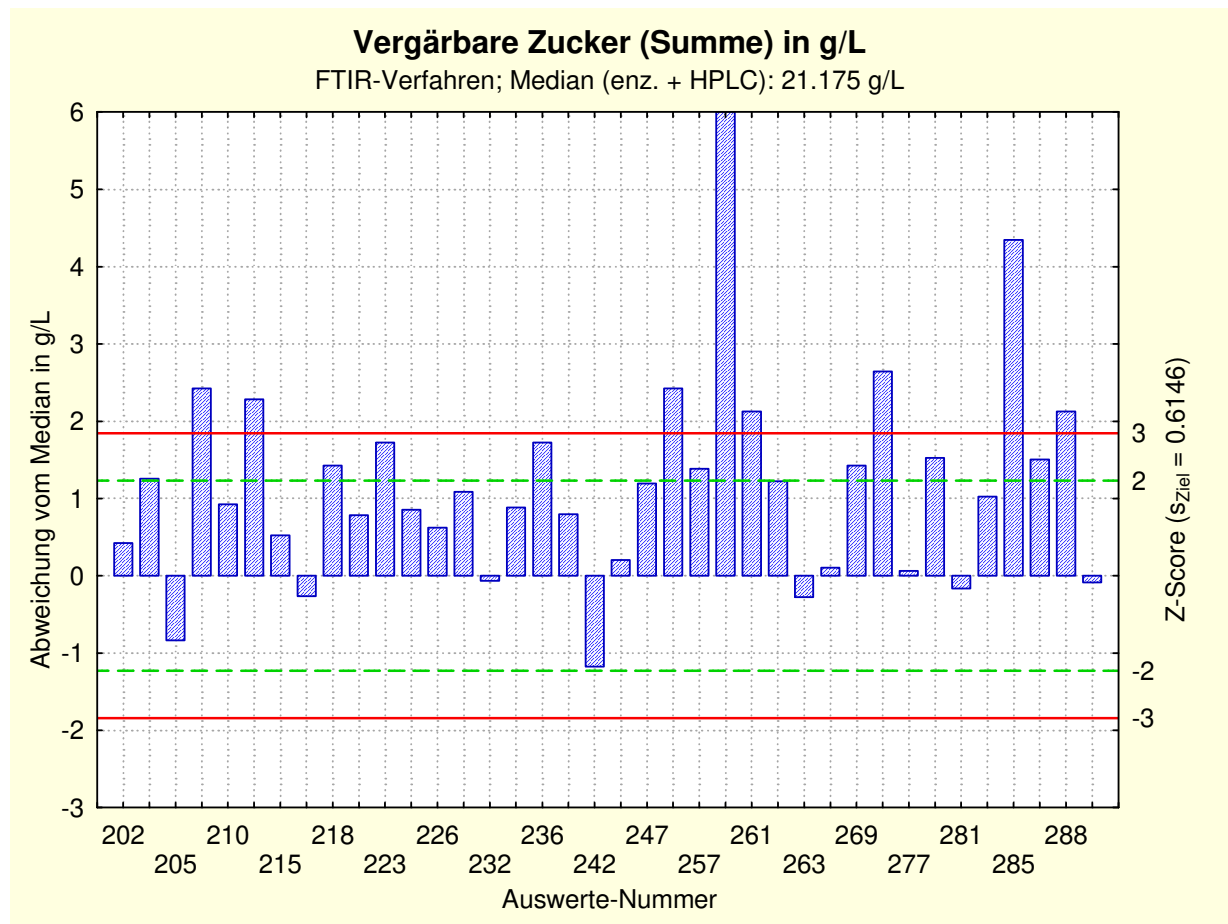
Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8(S)	21,60	0,425	0,56	0,69	
204	LwK 4.8(S)	22,43	1,255	1,66	2,04	
205	LwK 4.8(S)	20,34	-0,835	-1,10	-1,36	
207	LwK 4.8(S)	23,60	2,425	3,21	3,95	
210	LwK 4.8(S)	22,10	0,925	1,22	1,50	
211	LwK 4.8(S)	23,46	2,285	3,02	3,72	
215	LwK 4.8(S)	21,70	0,525	0,69	0,85	
217	LwK 4.8(S)	20,91	-0,265	-0,35	-0,43	
218	LwK 4.8(S)	22,60	1,425	1,88	2,32	
220	LwK 4.8(S)	21,96	0,785	1,04	1,28	
223	LwK 4.8(S)	22,90	1,725	2,28	2,81	
224	LwK 4.8(S)	22,03	0,855	1,13	1,39	
226	LwK 4.8(S)	21,80	0,625	0,83	1,02	
229	LwK 4.8(S)	22,26	1,085	1,43	1,77	
232	LwK 4.8(S)	21,11	-0,065	-0,09	-0,11	
234	LwK 4.8(S)	22,06	0,885	1,17	1,44	
236	LwK 4.8(S)	22,90	1,725	2,28	2,81	
241	LwK 4.8(S)	21,97	0,795	1,05	1,29	
242	LwK 4.8(S)	20,00	-1,175	-1,55	-1,91	
244	LwK 4.8(S)	21,38	0,205	0,27	0,33	
247	LwK 4.8(S)	22,37	1,195	1,58	1,94	
249	LwK 4.8(S)	23,60	2,425	3,21	3,95	
257	LwK 4.8(S)	22,56	1,385	1,83	2,25	
259	LwK 4.8(S)	29,70	8,525	11,27	13,87	(***)
261	LwK 4.8(S)	23,30	2,125	2,81	3,46	
262	LwK 4.8(S)	22,40	1,225	1,62	1,99	
263	LwK 4.8(S)	20,90	-0,275	-0,36	-0,45	
266	LwK 4.8(S)	21,28	0,105	0,14	0,17	
269	LwK 4.8(S)	22,60	1,425	1,88	2,32	
273	LwK 4.8(S)	23,82	2,645	3,50	4,30	
277	LwK 4.8(S)	21,24	0,065	0,09	0,11	
278	LwK 4.8(S)	22,70	1,525	2,02	2,48	
281	LwK 4.8(S)	21,01	-0,165	-0,22	-0,27	
282	LwK 4.8(S)	22,20	1,025	1,35	1,67	
285	LwK 4.8(S)	25,52	4,345	5,74	7,07	(***)
287	LwK 4.8(S)	22,68	1,505	1,99	2,45	
288	LwK 4.8(S)	23,30	2,125	2,81	3,46	
311	LwK 4.8(S)	21,09	-0,085	-0,11	-0,14	

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







## 5.5 Glucose [g/L]

### 5.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	enzymat., autom.	2,80	1,405	18,72	17,44	(*)
04	enzymat., autom.	1,47	0,075	1,00	0,93	
05	enzymat., autom.	1,47	0,075	1,00	0,93	
10	enzymat., autom.	1,30	-0,095	-1,27	-1,18	
15	enzymat., autom.	1,40	0,005	0,07	0,06	
18	enzymat., autom.	1,37	-0,025	-0,33	-0,31	
20	HPLC	1,24	-0,155	-2,07	-1,92	
26	HPLC	1,35	-0,045	-0,60	-0,56	
29	enzymat., autom.	1,32	-0,075	-1,00	-0,93	
38	enzymat., autom.	1,40	0,005	0,07	0,06	
41	enzymat., autom.	1,27	-0,125	-1,67	-1,55	
42	enzymat., autom.	1,58	0,184	2,45	2,28	
44	enzymat., autom.	1,40	0,005	0,07	0,06	
53	enzymat., autom.	1,39	-0,005	-0,07	-0,06	
57	enzymat., autom.	1,34	-0,055	-0,73	-0,68	
61	HPLC	1,31	-0,085	-1,13	-1,06	
63	enzymat. Hand	1,40	0,009	0,12	0,11	
70	enzymat., autom.	1,43	0,035	0,47	0,43	
82	enzymat. Hand	1,46	0,065	0,87	0,81	
111	NMR	1,05	-0,341	-4,54	-4,23	
112	NMR	1,66	0,261	3,47	3,24	
113	NMR	1,02	-0,375	-5,00	-4,65	
114	NMR	0,94	-0,452	-6,02	-5,61	(***)
115	NMR	1,44	0,049	0,65	0,61	
116	NMR	1,27	-0,129	-1,71	-1,60	

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

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

### 5.5.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	18
Minimalwert	1,24
Mittelwert	1,384
Median	1,395
Maximalwert	1,58
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,082
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,019
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,075
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,081
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,408
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,10
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,02
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,20
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,26
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,24
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,05

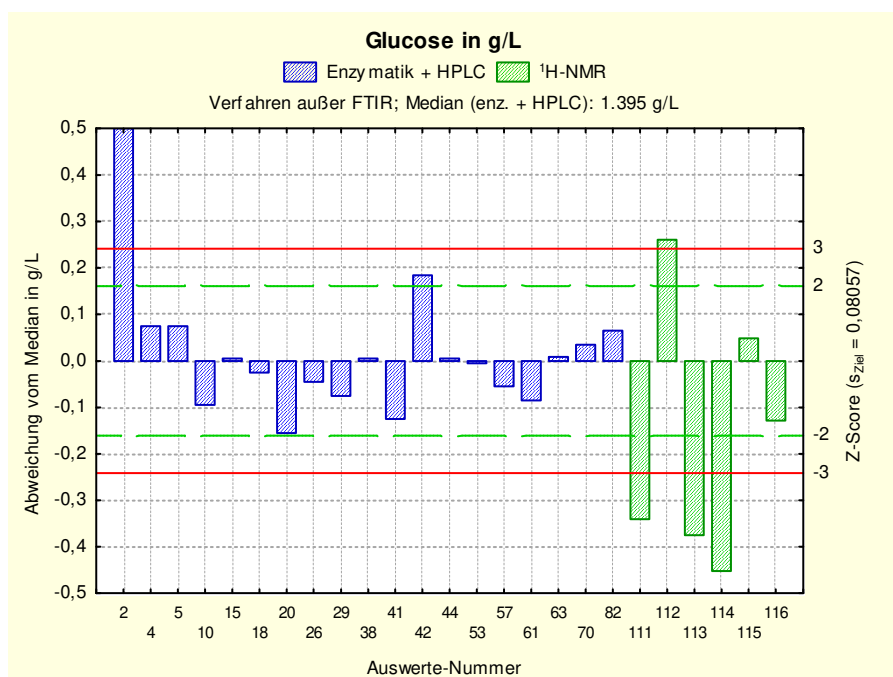
### 5.5.3 Angaben zu den Analyseverfahren

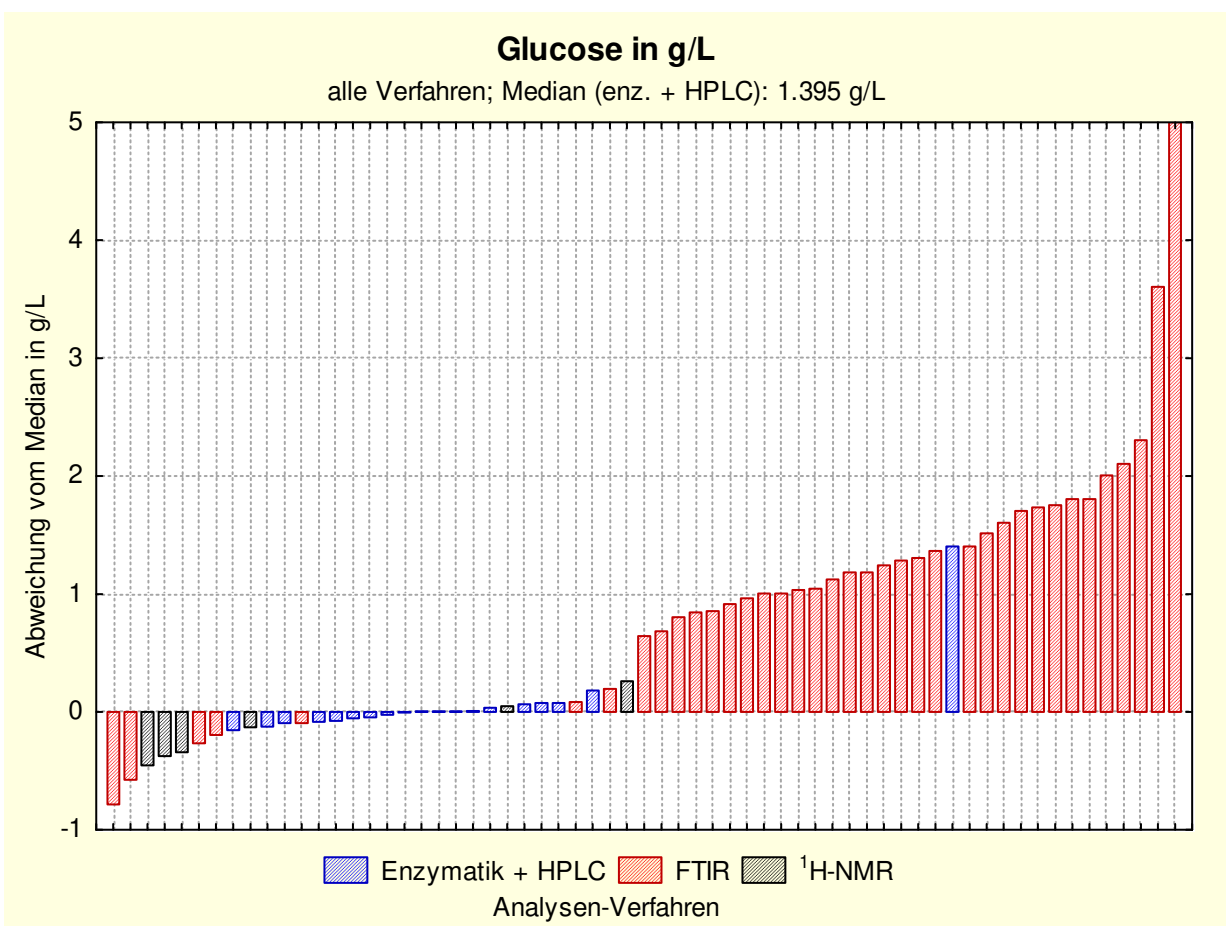
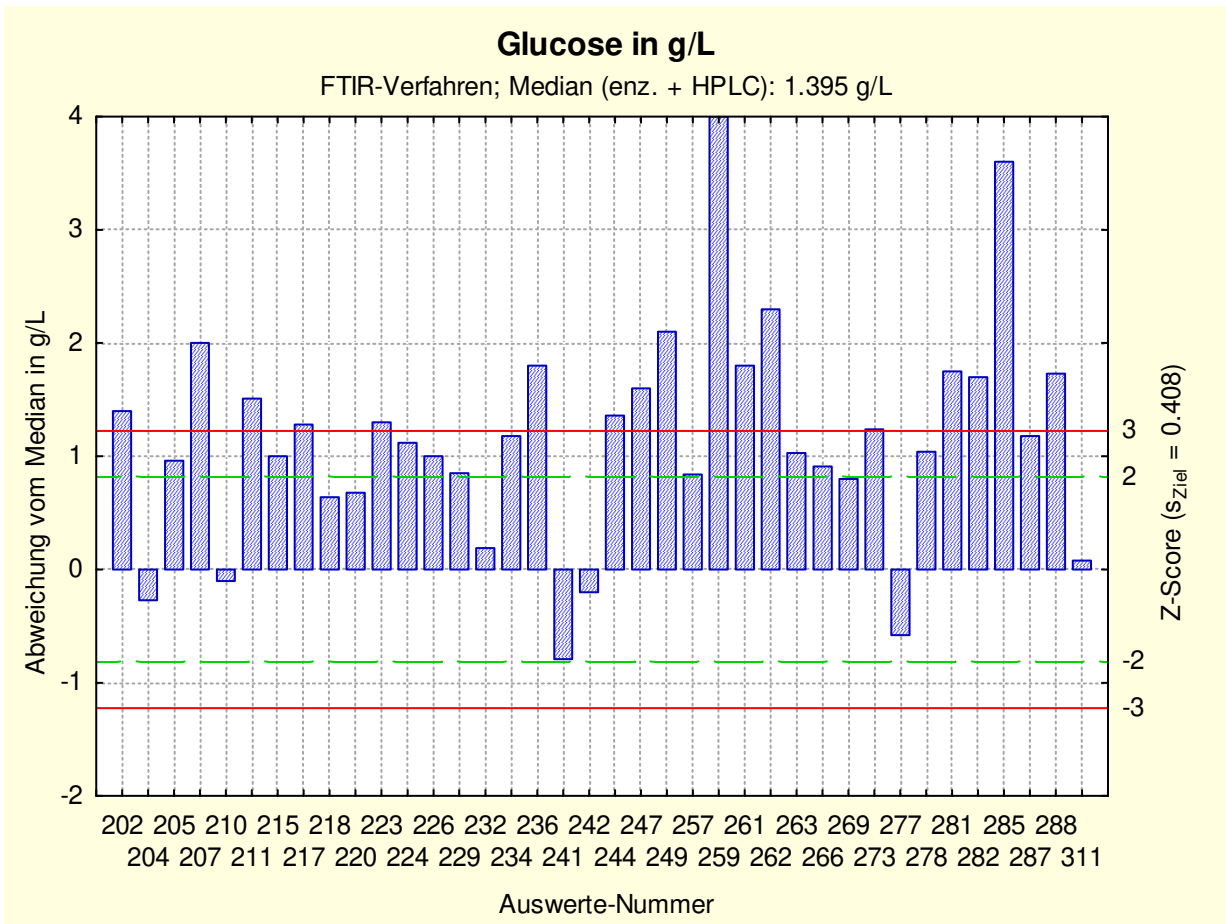
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	3	1,300	0,063
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	14	1,404	0,095
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	2	1,432	0,045
	herkömmliche Verfahren	19	1,389	0,089
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	2,523	0,800
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	1,228	0,309

5.5.4 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	2,80	1,400	18,60	3,43	
204	FTIR	1,13	-0,270	-3,59	-0,66	
205	FTIR	2,36	0,960	12,75	2,35	
207	FTIR	3,40	2,000	26,57	4,90	
210	FTIR	1,30	-0,100	-1,33	-0,25	
211	FTIR	2,91	1,510	20,06	3,70	
215	FTIR	2,40	1,000	13,28	2,45	
217	FTIR	2,68	1,280	17,00	3,14	
218	FTIR	2,04	0,640	8,50	1,57	
220	FTIR	2,08	0,680	9,03	1,67	
223	FTIR	2,70	1,300	17,27	3,19	
224	FTIR	2,52	1,120	14,88	2,75	
226	FTIR	2,40	1,000	13,28	2,45	
229	FTIR	2,25	0,850	11,29	2,08	
232	FTIR	1,59	0,190	2,52	0,47	
234	FTIR	2,58	1,180	15,67	2,89	
236	FTIR	3,20	1,800	23,91	4,41	
241	FTIR	0,61	-0,790	-10,49	-1,94	
242	FTIR	1,20	-0,200	-2,66	-0,49	
244	FTIR	2,76	1,360	18,06	3,33	
247	FTIR	3,00	1,600	21,25	3,92	
249	FTIR	3,50	2,100	27,89	5,15	(*)
257	FTIR	2,24	0,840	11,16	2,06	
259	FTIR	8,70	7,300	96,96	17,89	(*)
261	FTIR	3,20	1,800	23,91	4,41	
262	FTIR	3,70	2,300	30,55	5,64	(*)
263	FTIR	2,43	1,030	13,68	2,52	
266	FTIR	2,31	0,910	12,09	2,23	
269	FTIR	2,20	0,800	10,63	1,96	
273	FTIR	2,64	1,240	16,47	3,04	
277	FTIR	0,82	-0,580	-7,70	-1,42	
278	FTIR	2,44	1,040	13,81	2,55	
281	FTIR	3,15	1,750	23,24	4,29	
282	FTIR	3,10	1,700	22,58	4,17	
285	FTIR	5,00	3,600	47,82	8,82	(*)
287	FTIR	2,58	1,180	15,67	2,89	
288	FTIR	3,13	1,730	22,98	4,24	
311	FTIR	1,48	0,080	1,06	0,20	

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





## 5.6 Fructose [g/L]

### 5.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	enzymat., autom.	19,43	-0,360	-0,50	-0,62	
04	enzymat., autom.	20,19	0,400	0,56	0,69	
05	enzymat., autom.	20,40	0,610	0,85	1,06	
10	enzymat., autom.	19,61	-0,180	-0,25	-0,31	
15	enzymat., autom.	19,80	0,010	0,01	0,02	
18	enzymat., autom.	19,64	-0,150	-0,21	-0,26	
20	HPLC	19,57	-0,220	-0,31	-0,38	
26	HPLC	19,90	0,110	0,15	0,19	
29	enzymat., autom.	19,79	0,000	0,00	0,00	
38	enzymat., autom.	20,59	0,800	1,12	1,39	
41	enzymat., autom.	20,03	0,240	0,34	0,42	
42	enzymat., autom.	19,81	0,018	0,03	0,03	
44	enzymat., autom.	20,00	0,210	0,29	0,36	
53	enzymat., autom.	19,74	-0,050	-0,07	-0,09	
57	enzymat., autom.	20,60	0,805	1,13	1,39	
61	HPLC	19,35	-0,440	-0,62	-0,76	
63	enzymat. Hand	18,17	-1,620	-2,27	-2,81	
70	enzymat., autom.	19,34	-0,450	-0,63	-0,78	
82	enzymat. Hand	19,01	-0,780	-1,09	-1,35	
111	NMR	18,34	-1,452	-2,03	-2,51	
112	NMR	18,66	-1,133	-1,59	-1,96	
113	NMR	19,50	-0,290	-0,41	-0,50	
114	NMR	19,86	0,071	0,10	0,12	
115	NMR	18,94	-0,846	-1,18	-1,47	
116	NMR	18,92	-0,865	-1,21	-1,50	

### 5.6.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	19
Minimalwert	18,17
Mittelwert	19,735
Median	19,790
Maximalwert	20,60
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,565
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,130
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,714
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,577
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,330)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,79
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,98
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	(1,71)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,18
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,22
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,39)

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

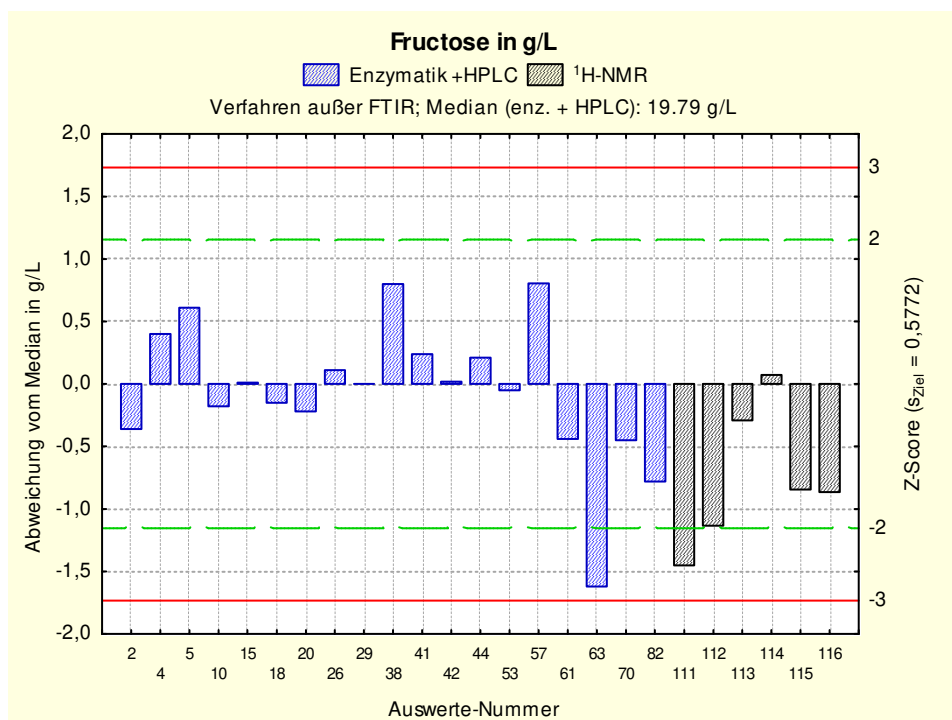
### 5.6.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	3	19,61	0,314
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	14	19,91	0,425
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	2	18,59	0,674
	herkömmliche Verfahren	19	19,77	0,500
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	19,79	0,952
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	19,04	0,631

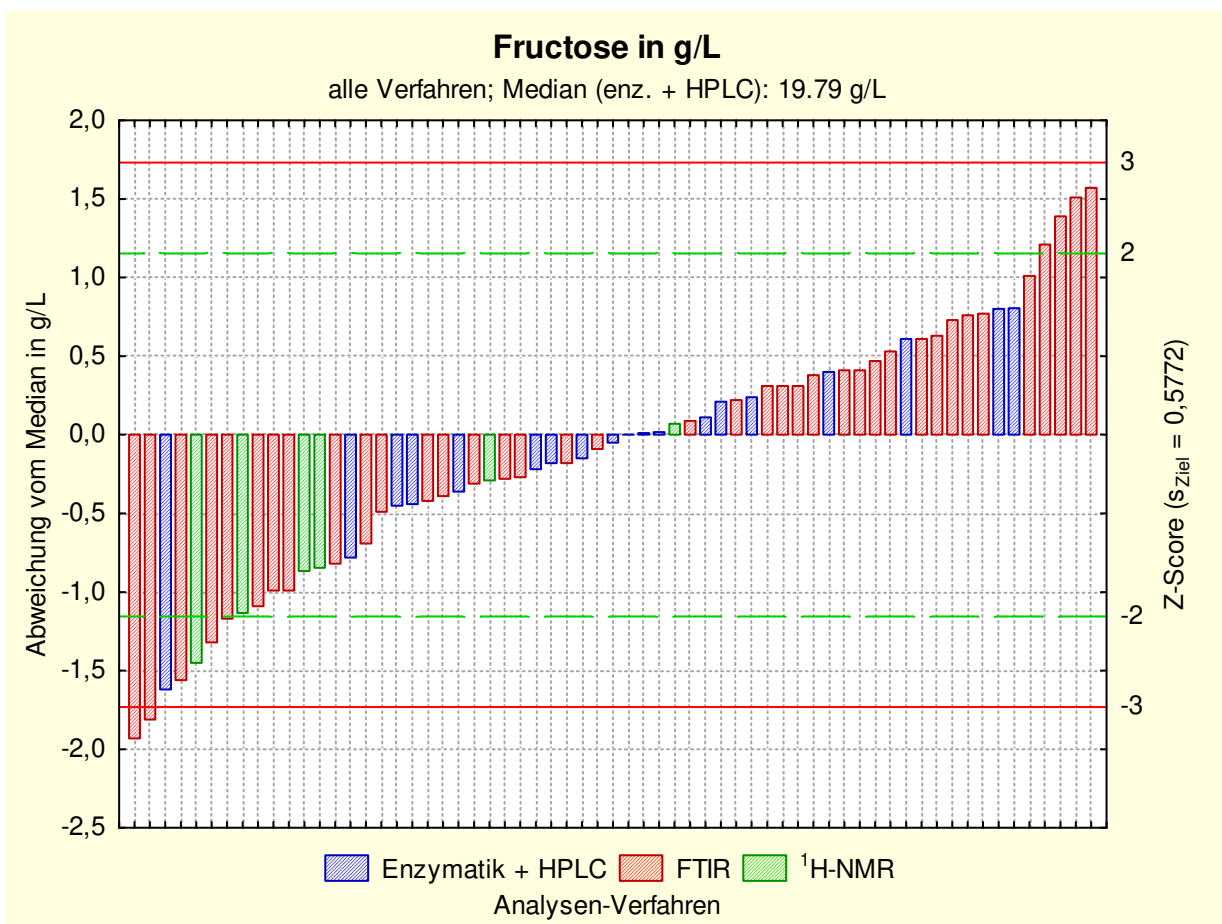
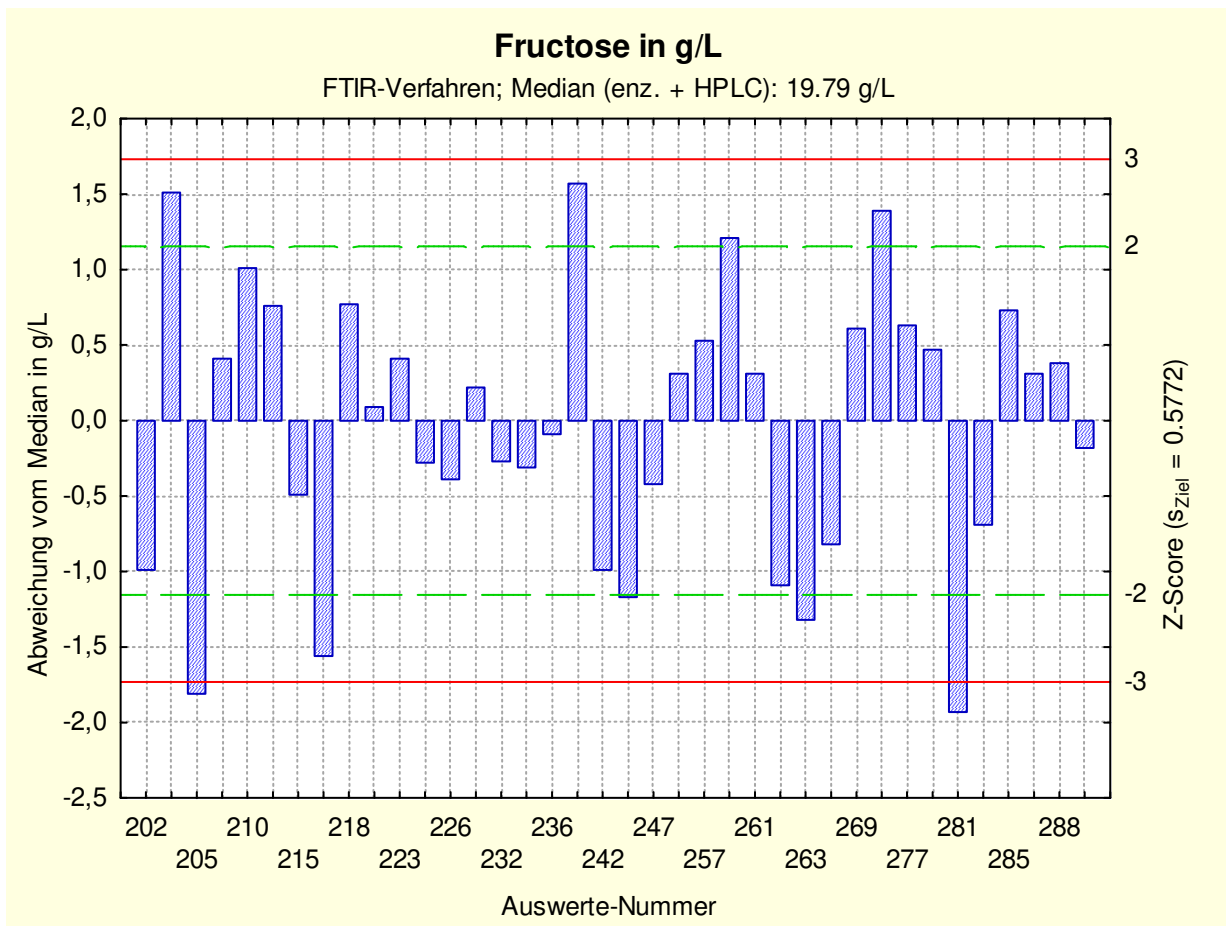


5.6.4 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	18,80	-0,990	-1,39	-1,72	
204	FTIR	21,30	1,510	2,11	2,62	
205	FTIR	17,98	-1,810	-2,53	-3,14	
207	FTIR	20,20	0,410	0,57	0,71	
210	FTIR	20,80	1,010	1,41	1,75	
211	FTIR	20,55	0,760	1,06	1,32	
215	FTIR	19,30	-0,490	-0,69	-0,85	
217	FTIR	18,23	-1,560	-2,18	-2,70	
218	FTIR	20,56	0,770	1,08	1,33	
220	FTIR	19,88	0,090	0,13	0,16	
223	FTIR	20,20	0,410	0,57	0,71	
224	FTIR	19,51	-0,280	-0,39	-0,49	
226	FTIR	19,40	-0,390	-0,55	-0,68	
229	FTIR	20,01	0,220	0,31	0,38	
232	FTIR	19,52	-0,270	-0,38	-0,47	
234	FTIR	19,48	-0,310	-0,43	-0,54	
236	FTIR	19,70	-0,090	-0,13	-0,16	
241	FTIR	21,36	1,570	2,20	2,72	
242	FTIR	18,80	-0,990	-1,39	-1,72	
244	FTIR	18,62	-1,170	-1,64	-2,03	
247	FTIR	19,37	-0,420	-0,59	-0,73	
249	FTIR	20,10	0,310	0,43	0,54	
257	FTIR	20,32	0,530	0,74	0,92	
259	FTIR	21,00	1,210	1,69	2,10	
261	FTIR	20,10	0,310	0,43	0,54	
262	FTIR	18,70	-1,090	-1,53	-1,89	
263	FTIR	18,47	-1,320	-1,85	-2,29	
266	FTIR	18,97	-0,820	-1,15	-1,42	
269	FTIR	20,40	0,610	0,85	1,06	
273	FTIR	21,18	1,390	1,95	2,41	
277	FTIR	20,42	0,630	0,88	1,09	
278	FTIR	20,26	0,470	0,66	0,81	
281	FTIR	17,86	-1,930	-2,70	-3,34	
282	FTIR	19,10	-0,690	-0,97	-1,20	
285	FTIR	20,52	0,730	1,02	1,26	
287	FTIR	20,10	0,310	0,43	0,54	
288	FTIR	20,17	0,380	0,53	0,66	
311	FTIR	19,61	-0,180	-0,25	-0,31	







## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
02	enzymat. Hand	6,09	-0,190	-0,71	
04	enzymat. autom.	6,52	0,240	0,89	
05	enzymat. autom.	6,29	0,010	0,04	
10	enzymat. Hand	6,29	0,010	0,04	
26	HPLC	6,50	0,220	0,82	
61	HPLC	6,27	-0,010	-0,04	
63	enzymat. Hand	6,01	-0,266	-0,99	
82	enzymat. Hand	6,17	-0,110	-0,41	
111	NMR	6,88	0,598	2,22	
112	NMR	6,36	0,077	0,29	
113	NMR	6,94	0,660	2,45	
114	NMR	7,21	0,934	3,47	
115	NMR	6,54	0,264	0,98	
116	NMR	6,60	0,320	1,19	

### 5.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	5,80	-0,480	-1,78	-1,38	
205	FTIR	5,94	-0,340	-1,26	-0,98	
207	FTIR	5,80	-0,480	-1,78	-1,38	
210	FTIR	5,78	-0,500	-1,86	-1,44	
211	FTIR	5,89	-0,390	-1,45	-1,12	
215	FTIR	6,06	-0,220	-0,82	-0,63	
217	FTIR	4,40	-1,880	-6,98	-5,40	(***)
218	FTIR	5,80	-0,480	-1,78	-1,38	
220	FTIR	5,91	-0,370	-1,37	-1,06	
223	FTIR	4,80	-1,480	-5,49	-4,25	
224	FTIR	5,81	-0,470	-1,74	-1,35	
226	FTIR	6,30	0,020	0,07	0,06	
229	FTIR	5,35	-0,930	-3,45	-2,67	
232	FTIR	4,83	-1,450	-5,38	-4,17	
234	FTIR	5,60	-0,680	-2,52	-1,95	
236	FTIR	5,40	-0,880	-3,27	-2,53	
241	FTIR	6,20	-0,080	-0,30	-0,23	
242	FTIR	4,80	-1,480	-5,49	-4,25	
244	FTIR	5,65	-0,630	-2,34	-1,81	
249	FTIR	5,10	-1,180	-4,38	-3,39	
257	FTIR	5,07	-1,210	-4,49	-3,48	
259	FTIR	5,50	-0,780	-2,90	-2,24	
261	FTIR	7,30	1,020	3,79	2,93	
262	FTIR	6,70	0,420	1,56	1,21	
269	FTIR	5,60	-0,680	-2,52	-1,95	
282	FTIR	5,70	-0,580	-2,15	-1,67	
285	FTIR	7,22	0,940	3,49	2,70	
287	FTIR	7,08	0,800	2,97	2,30	
288	FTIR	7,23	0,950	3,53	2,73	

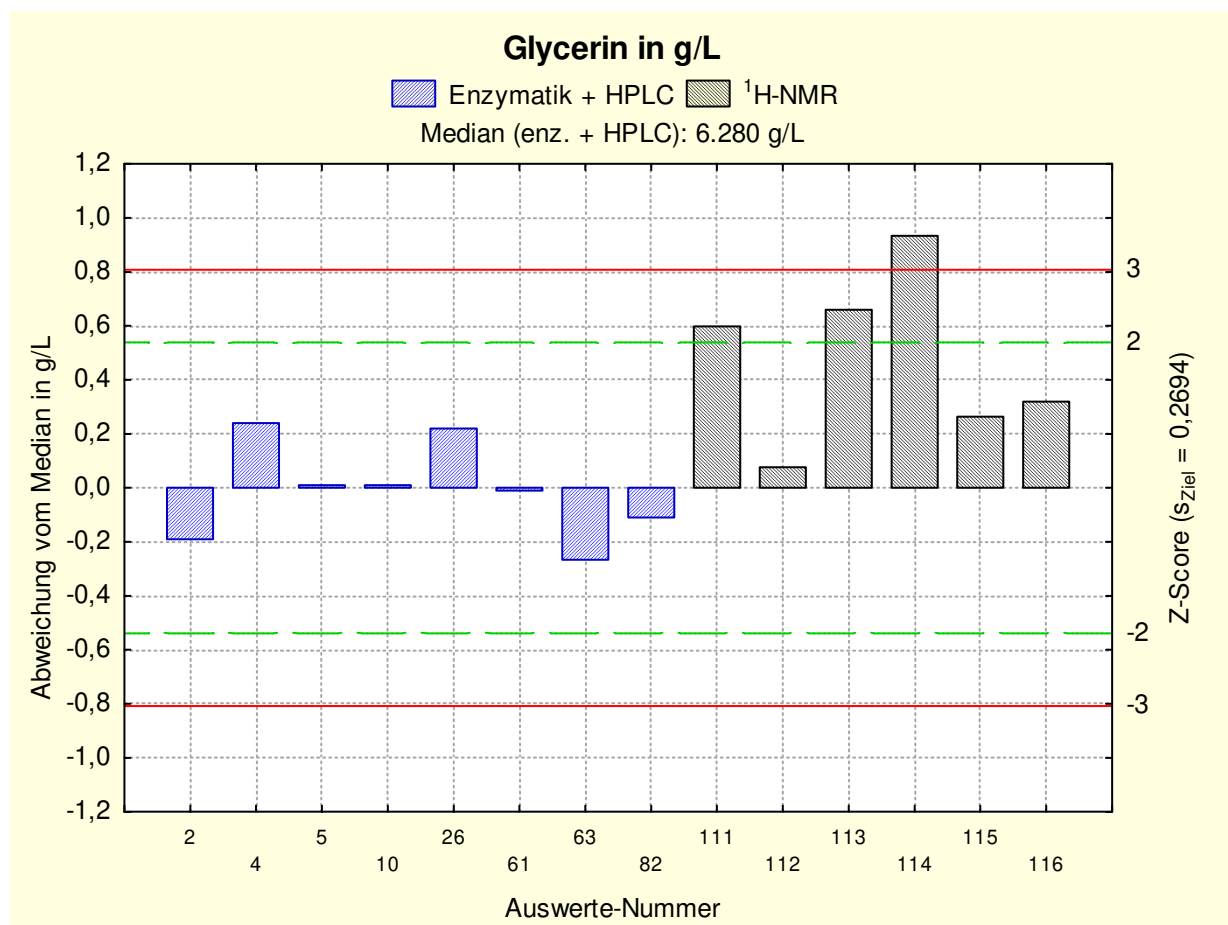
(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

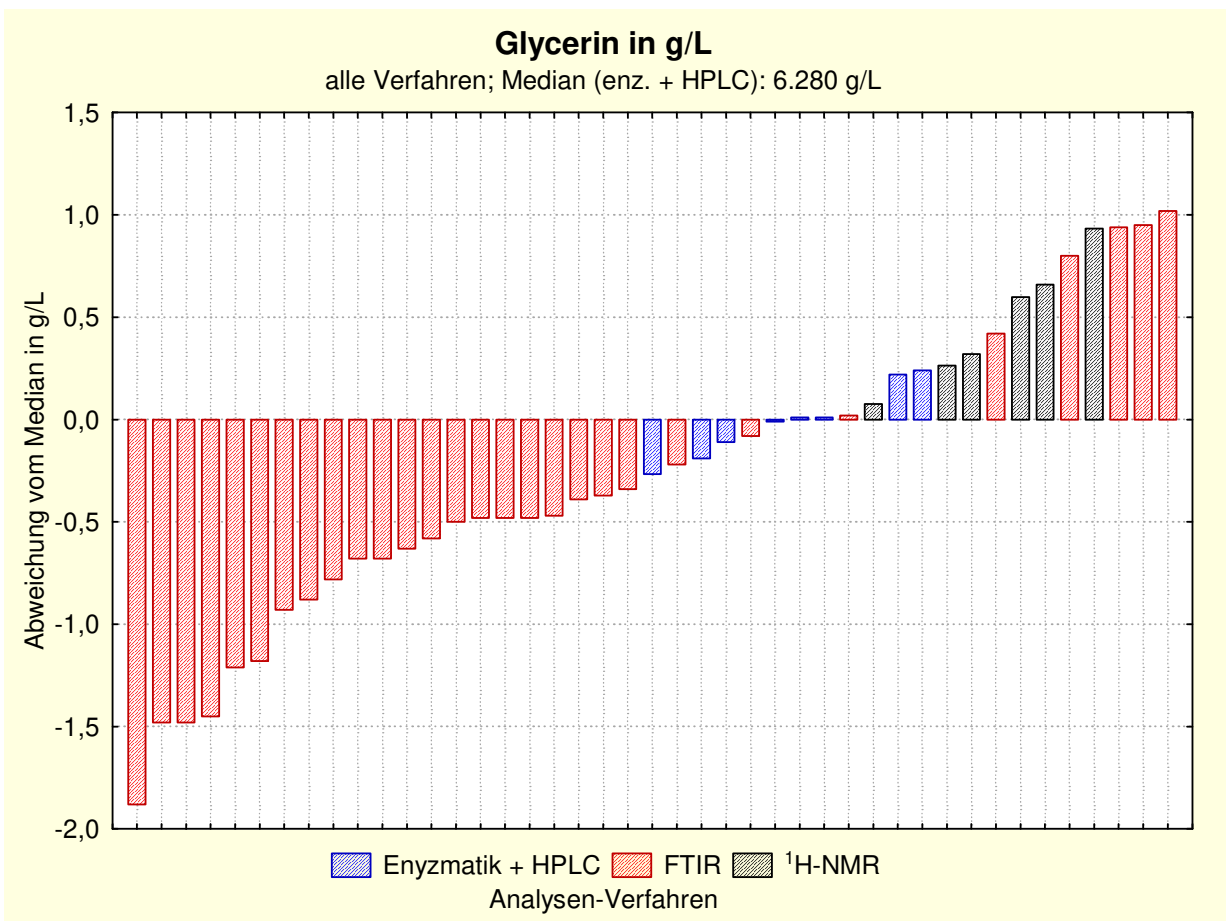
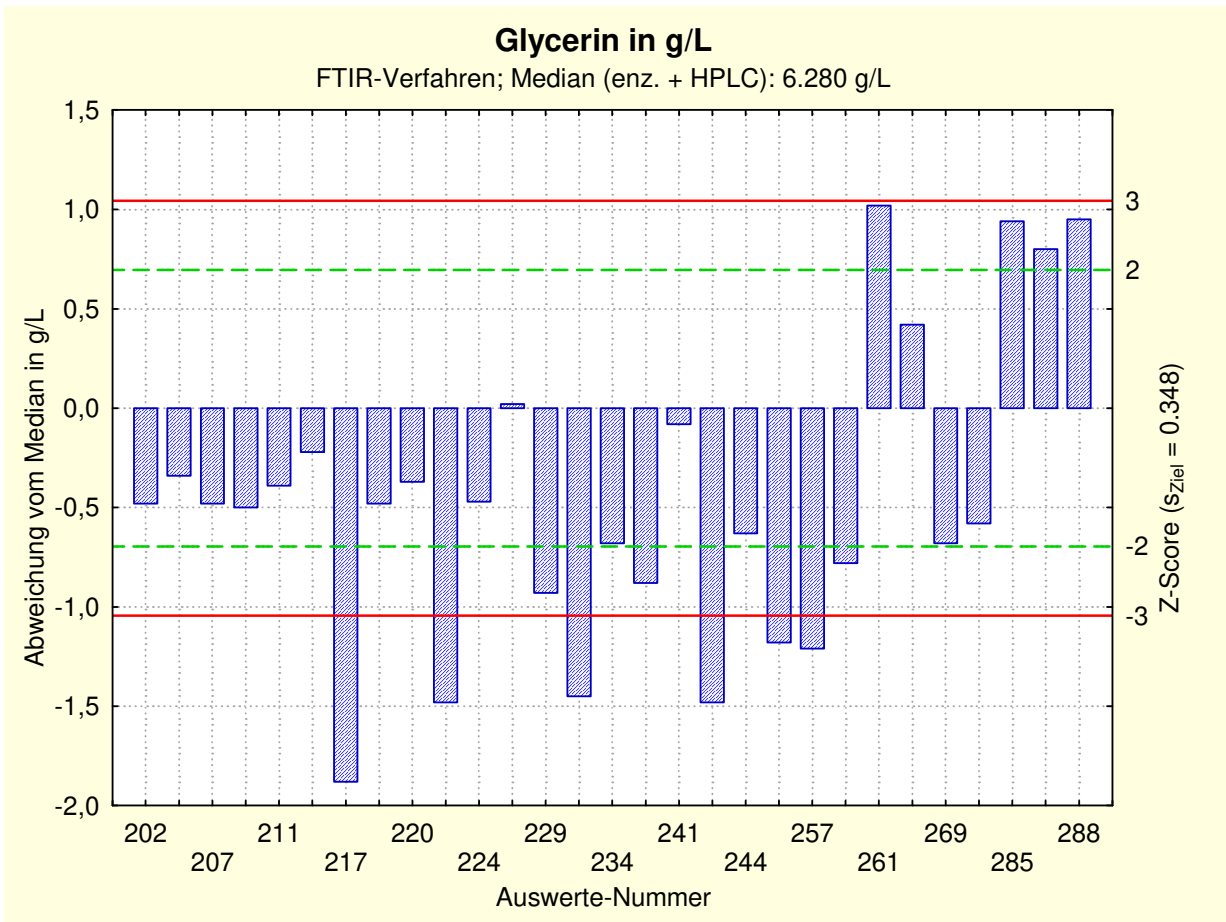
### 5.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	8
Minimalwert	6,01
Mittelwert	6,268
Median	6,280
Maximalwert	6,52
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,179
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,063
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,269
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,66
Quotient ( $s_L/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,51
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,23
Quotient ( $u_M/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,18

### 5.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	2	6,385	0,184
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	2	6,405	0,184
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	6,141	0,134
	herkömmliche Verfahren	8	6,268	0,203
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	29	5,785	0,700
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,750	0,343





## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
02	potentiometr.	3,23	-0,060	-1,26	
04	potentiometr.	3,33	0,040	0,84	
05	potentiometr.	3,22	-0,070	-1,47	
10	potentiometr.	3,18	-0,110	-2,31	
15	potentiometr.	3,24	-0,050	-1,05	
18	potentiometr.	3,33	0,035	0,74	
20	potentiometr.	3,45	0,160	3,36	
26	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
29	potentiometr.	3,23	-0,060	-1,26	
32	potentiometr.	3,22	-0,070	-1,47	
38	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
41	potentiometr.	3,30	0,010	0,21	
42	potentiometr.	3,39	0,100	2,10	
44	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
53	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
57	potentiometr.	3,27	-0,020	-0,42	
61	potentiometr.	3,00	-0,290	-6,09	(**)
63	potentiometr.	3,19	-0,100	-2,10	
70	potentiometr.	3,34	0,050	1,05	
74	potentiometr.	3,34	0,050	1,05	
78	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
82	potentiometr.	3,28	-0,010	-0,21	
86	potentiometr.	3,61	0,320	6,72	(**)

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

### 5.8.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	23	21
Minimalwert	3,00	3,18
Mittelwert	3,287	3,285
Median	3,290	3,290
Maximalwert	3,61	3,45
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,1115	0,0659
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,0233	0,0144
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,0493	0,0493
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,34	1,38
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	2,26	1,34
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,49	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,47	0,29

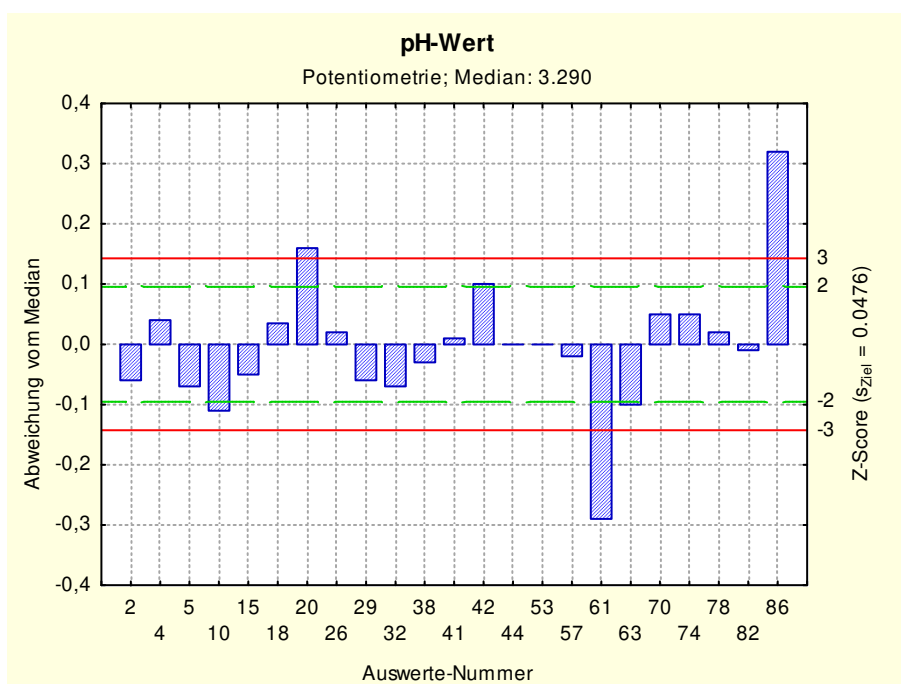
### 5.8.3 Angaben zu den Analyseverfahren

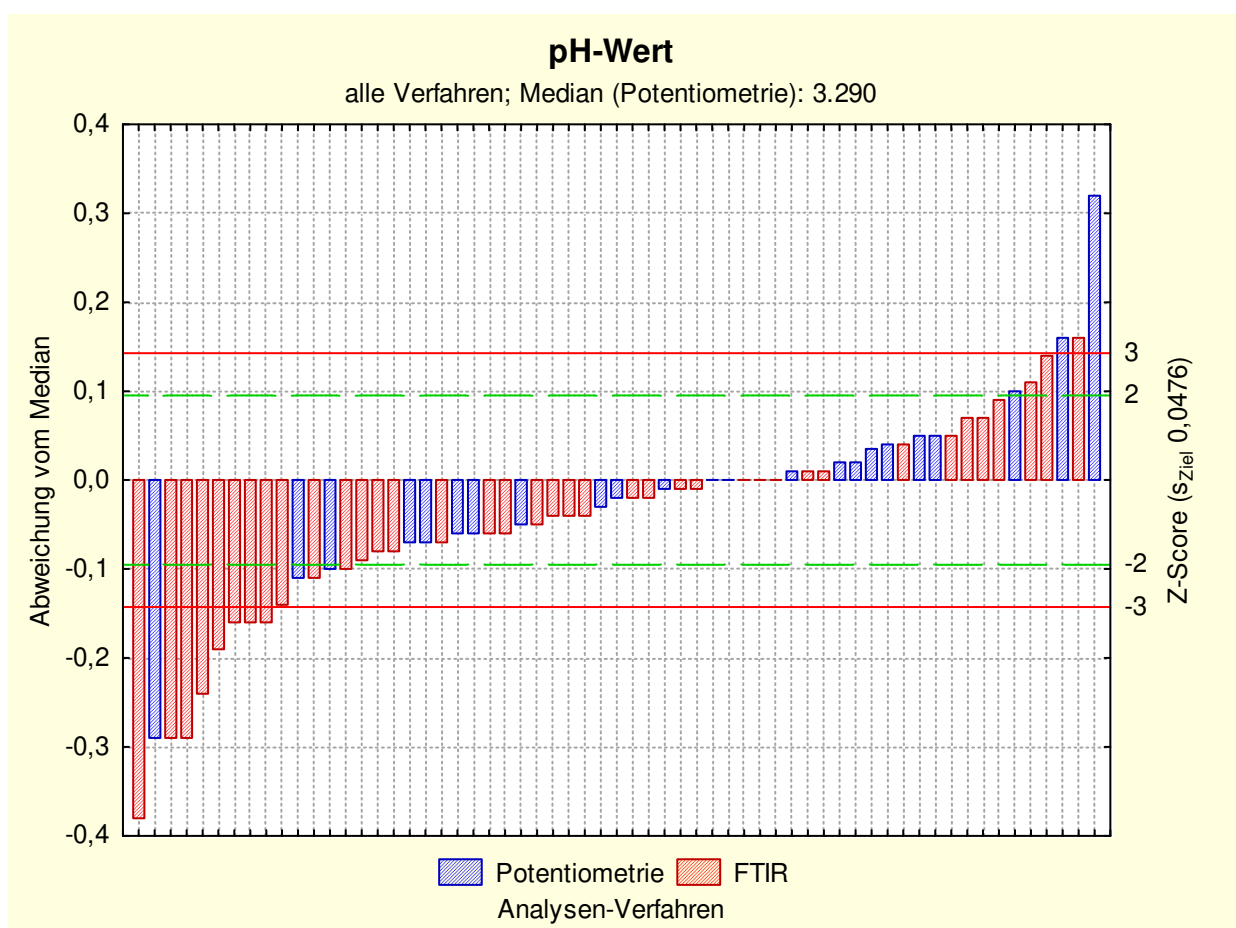
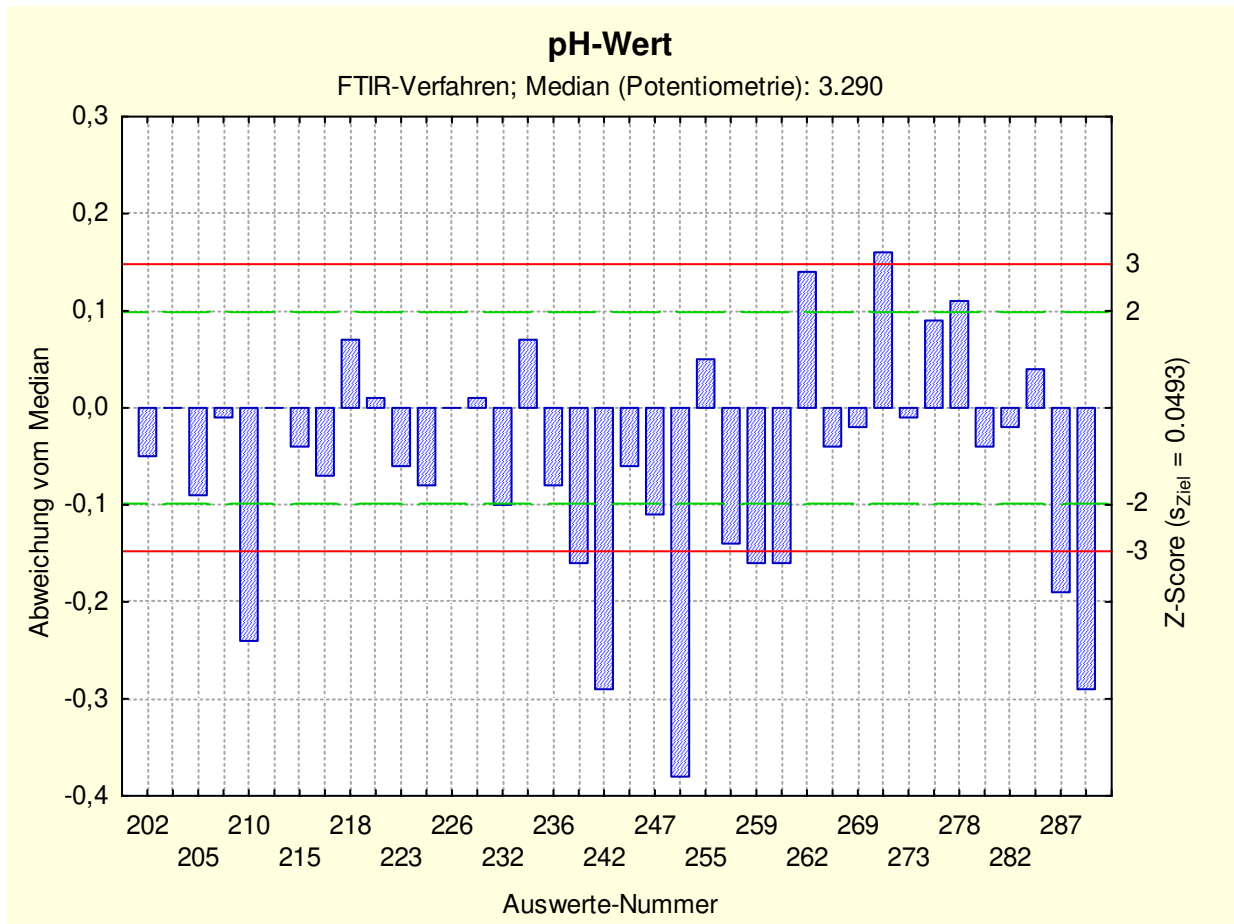
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	23	3,283	0,076
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	3,241	0,109

5.8.4 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	3,24	-0,050	-1,01	
204	FTIR	3,29	0,000	0,00	
205	FTIR	3,20	-0,090	-1,83	
207	FTIR	3,28	-0,010	-0,20	
210	FTIR	3,05	-0,240	-4,87	
211	FTIR	3,29	0,000	0,00	
215	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
217	FTIR	3,22	-0,070	-1,42	
218	FTIR	3,36	0,070	1,42	
220	FTIR	3,30	0,010	0,20	
223	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
224	FTIR	3,21	-0,080	-1,62	
226	FTIR	3,29	0,000	0,00	
229	FTIR	3,30	0,010	0,20	
232	FTIR	3,19	-0,100	-2,03	
234	FTIR	3,36	0,070	1,42	
236	FTIR	3,21	-0,080	-1,62	
241	FTIR	3,13	-0,160	-3,25	
242	FTIR	3,00	-0,290	-5,88	(***)
244	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
247	FTIR	3,18	-0,110	-2,23	
249	FTIR	2,91	-0,380	-7,71	(***)
255	FTIR	3,34	0,050	1,01	
257	FTIR	3,15	-0,140	-2,84	
259	FTIR	3,13	-0,160	-3,25	
261	FTIR	3,13	-0,160	-3,25	
262	FTIR	3,43	0,140	2,84	
266	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
269	FTIR	3,27	-0,020	-0,41	
270	FTIR	3,45	0,160	3,25	
273	FTIR	3,28	-0,010	-0,20	
277	FTIR	3,38	0,090	1,83	
278	FTIR	3,40	0,110	2,23	
281	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
282	FTIR	3,27	-0,020	-0,41	
285	FTIR	3,33	0,040	0,81	
287	FTIR	3,10	-0,190	-3,85	
288	FTIR	3,00	-0,290	-5,88	(***)

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





## 5.9 Gesamtsäure [g/L]

### 5.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 5.2.1	6,78	-0,020	-0,07	-0,19	
04	LwK 5.2.1	6,78	-0,020	-0,07	-0,19	
05	LwK 5.1	6,79	-0,010	-0,03	-0,09	
07	LwK 5.2.1	7,10	0,300	1,04	2,80	
10	LwK 5.1	6,73	-0,070	-0,24	-0,65	
15	LwK 5.2.1	7,08	0,280	0,97	2,61	
18	LwK 5.2.1	6,94	0,140	0,49	1,31	
20	LwK 5.1	7,10	0,300	1,04	2,80	
23	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
26	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
29	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
32	LwK 5.1	7,10	0,300	1,04	2,80	
38	LwK 5.1	6,76	-0,040	-0,14	-0,37	
41	LwK 5.1	7,05	0,250	0,87	2,33	
42	LwK 5.1	6,74	-0,060	-0,21	-0,56	
44	LwK 5.1	6,77	-0,030	-0,10	-0,28	
53	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 5.2.1	7,20	0,400	1,39	3,73	
57	LwK 5.1	7,02	0,220	0,76	2,05	
61	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
63	LwK 5.2.1	6,79	-0,010	-0,03	-0,09	
70	LwK 5.1	6,81	0,010	0,03	0,09	
74	LwK 5.1	6,13	-0,670	-2,32	-6,25	(**)
78	LwK 5.2.2	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
82	LwK 5.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
86	LwK 5.1	7,80	1,000	3,47	9,33	(**)

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

### 5.9.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	24
Minimalwert	6,13	6,60
Mittelwert	6,888	6,882
Median	6,800	6,800
Maximalwert	7,80	7,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,281	0,157
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,055	0,032
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,288	0,288
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,145	0,145
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,98	0,55
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,62	1,47
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,94	1,08
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,19	0,11
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,51	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,38	0,22

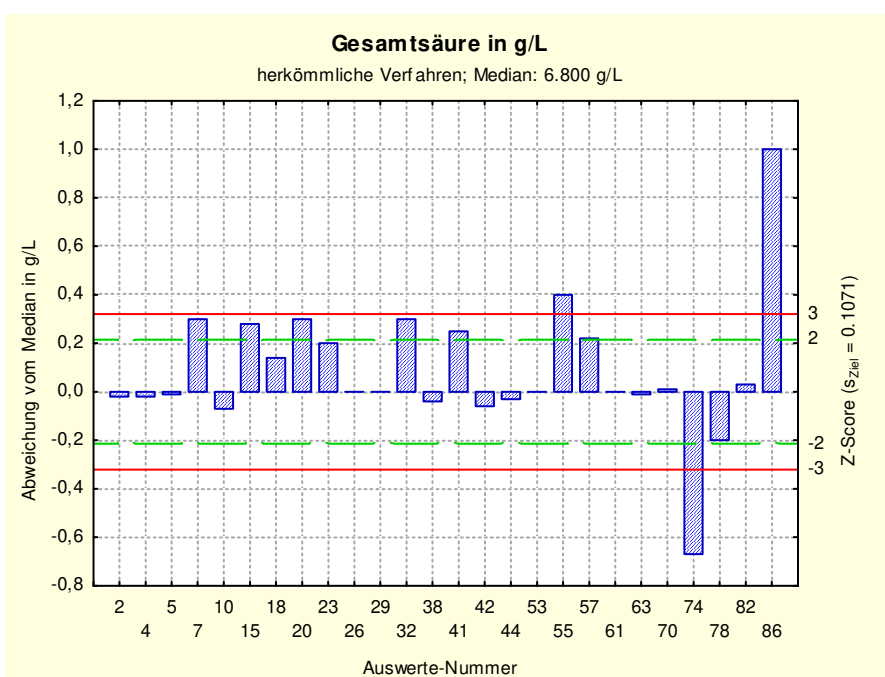
### 5.9.3 Angaben zu den Analyseverfahren

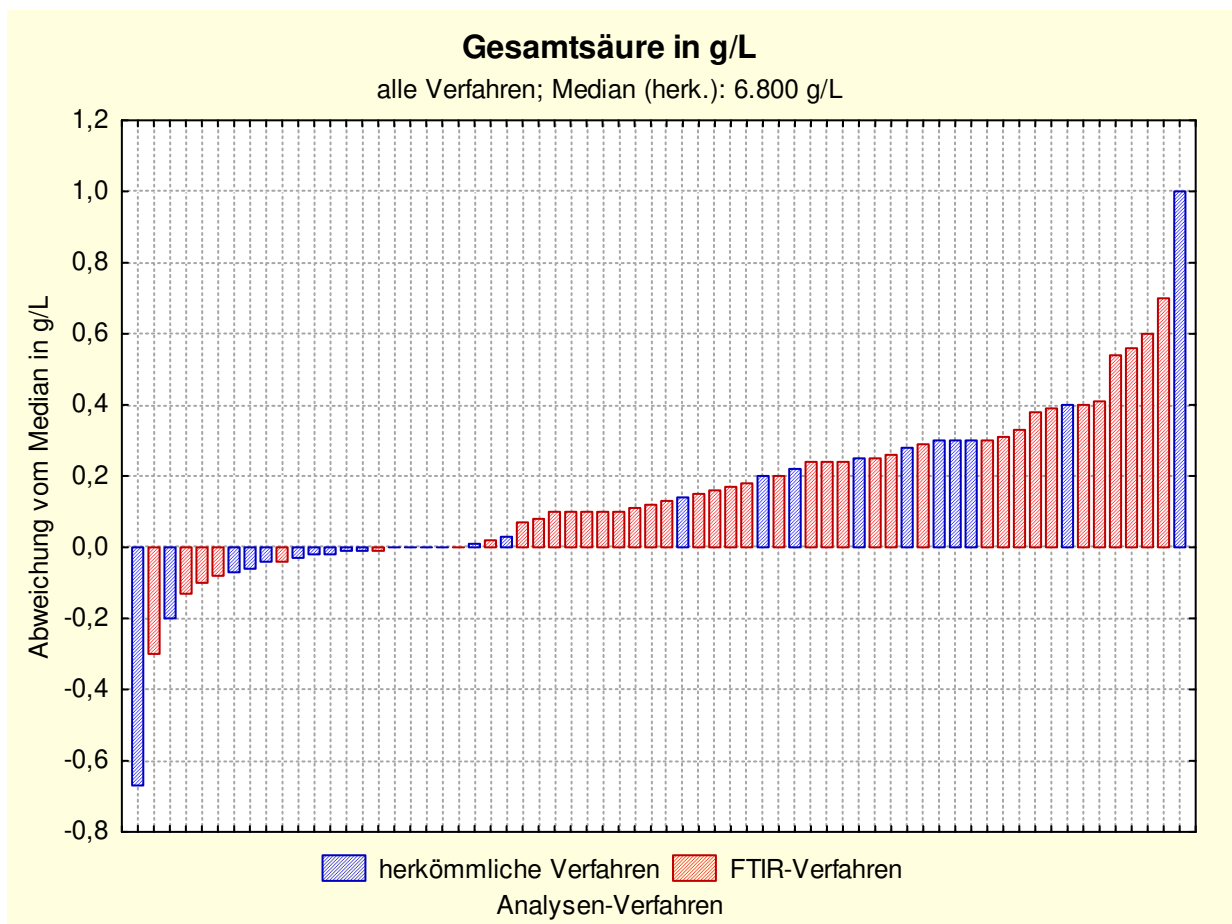
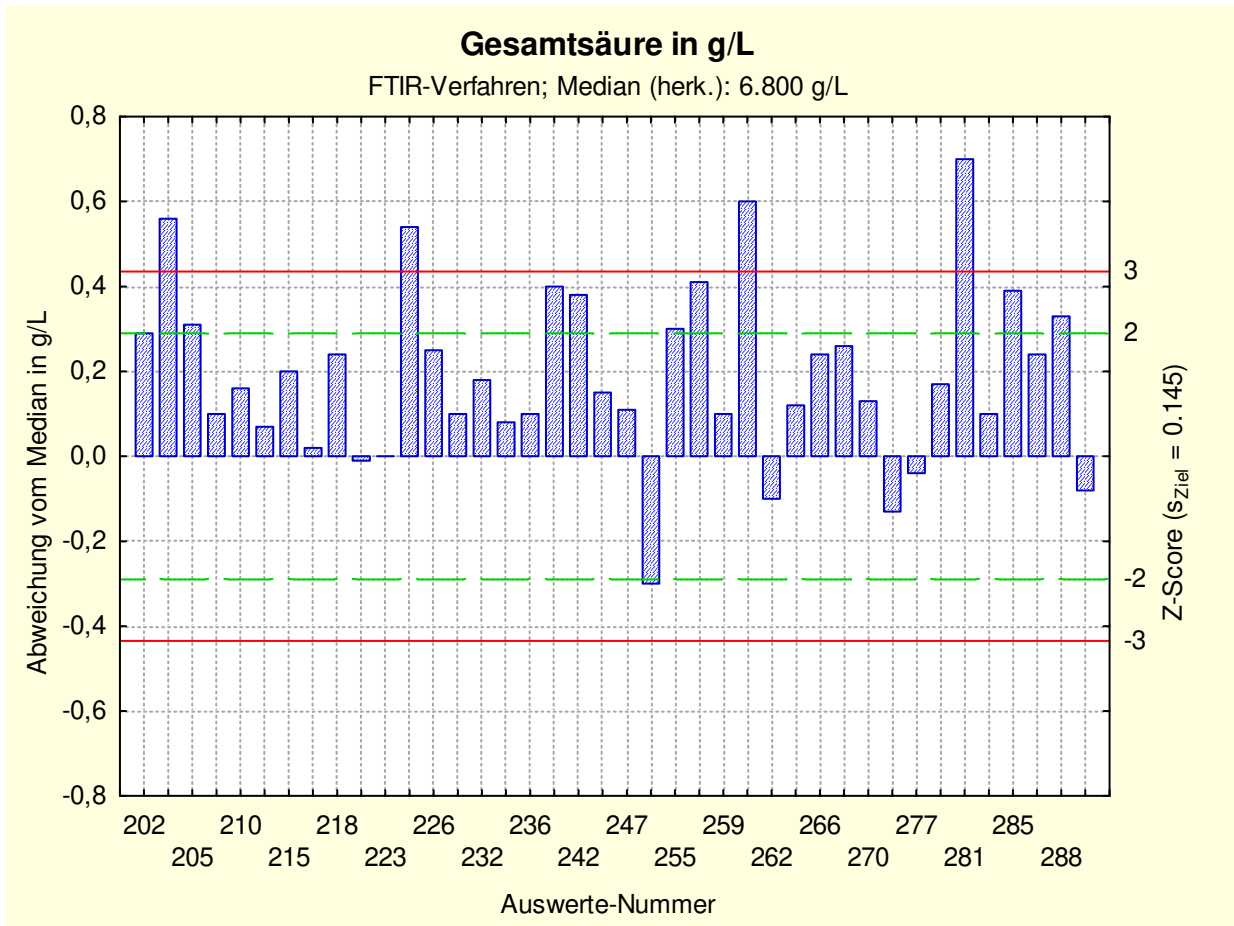
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	16	6,870	0,173
LwK 5.2.1	Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	9	6,912	0,180
LwK 5.2.2	Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	1 26	6,600 6,876	0,184
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	40	6,985	0,193



**5.9.4 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 5.3	7,09	0,290	1,01	2,00	
204	LwK 5.3	7,36	0,560	1,94	3,86	
205	LwK 5.3	7,11	0,310	1,08	2,14	
207	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
210	LwK 5.3	6,96	0,160	0,56	1,10	
211	LwK 5.3	6,87	0,070	0,24	0,48	
215	LwK 5.3	7,00	0,200	0,69	1,38	
217	LwK 5.3	6,82	0,020	0,07	0,14	
218	LwK 5.3	7,04	0,240	0,83	1,66	
220	LwK 5.3	6,79	-0,010	-0,03	-0,07	
223	LwK 5.3	6,80	0,000	0,00	0,00	
224	LwK 5.3	7,34	0,540	1,87	3,72	
226	LwK 5.3	7,05	0,250	0,87	1,72	
229	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
232	LwK 5.3	6,98	0,180	0,62	1,24	
234	LwK 5.3	6,88	0,080	0,28	0,55	
236	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
241	LwK 5.3	7,20	0,400	1,39	2,76	
242	LwK 5.3	7,18	0,380	1,32	2,62	
244	LwK 5.3	6,95	0,150	0,52	1,03	
247	LwK 5.3	6,91	0,110	0,38	0,76	
249	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
255	LwK 5.3	7,10	0,300	1,04	2,07	
257	LwK 5.3	7,21	0,410	1,42	2,83	
259	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
261	LwK 5.3	7,40	0,600	2,08	4,14	
262	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
263	LwK 5.3	6,92	0,120	0,42	0,83	
266	LwK 5.3	7,04	0,240	0,83	1,66	
269	LwK 5.3	7,06	0,260	0,90	1,79	
270	LwK 5.3	6,93	0,130	0,45	0,90	
273	LwK 5.3	6,67	-0,130	-0,45	-0,90	
277	LwK 5.3	6,76	-0,040	-0,14	-0,28	
278	LwK 5.3	6,97	0,170	0,59	1,17	
281	LwK 5.3	7,50	0,700	2,43	4,83	
282	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
285	LwK 5.3	7,19	0,390	1,35	2,69	
287	LwK 5.3	7,04	0,240	0,83	1,66	
288	LwK 5.3	7,13	0,330	1,14	2,28	
311	LwK 5.3	6,72	-0,080	-0,28	-0,55	





## 5.10 Weinsäure [g/L]

### 5.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
02	HPLC	2,76	-0,200	-1,41	
04	photometr.	2,90	-0,060	-0,42	
05	HPLC	2,89	-0,070	-0,49	
07	HPLC	1,89	-1,070	-7,52	(**)
10	photometr.	3,00	0,040	0,28	
15	photometr., autom.	3,20	0,240	1,69	
18	IC	3,05	0,090	0,63	
20	HPLC	2,63	-0,330	-2,32	
26	HPLC	2,95	-0,010	-0,07	
29	photometr., autom.	3,19	0,230	1,62	
38	photometr., autom.	3,33	0,370	2,60	
41	photometr., autom.	2,94	-0,020	-0,14	
53	photometr., autom.	3,00	0,040	0,28	
57	photometr., autom.	3,21	0,250	1,76	
61	photometr., autom.	2,96	0,000	0,00	
63	HPLC	2,89	-0,070	-0,49	
82	photometr.	3,07	0,110	0,77	
95	photometr., autom.	2,78	-0,180	-1,27	
111	NMR	3,14	0,177	1,24	
112	NMR	3,11	0,151	1,06	
113	NMR	3,25	0,290	2,04	
114	NMR	3,31	0,348	2,45	
115	NMR	2,71	-0,249	-1,75	
116	NMR	3,36	0,404	2,84	

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

### 5.10.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC		herkömml. Verfahren	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	7	6	18	17
Minimalwert	1,89	2,63	1,89	2,63
Mittelwert	2,723	2,862	2,924	2,985
Median	2,890	2,890	2,955	2,960
Maximalwert	3,05	3,05	3,33	3,33
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,391	0,148	0,312	0,180
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,148	0,060	0,073	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,139	0,139	0,142	0,142
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )				
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,227	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,81	1,06	2,19	1,26
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )				
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,72	0,65	1,37	0,79
Quotient ( $u_M/s_H$ )	1,06	0,43	0,52	0,31
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )				
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,65	0,26	0,32	0,19

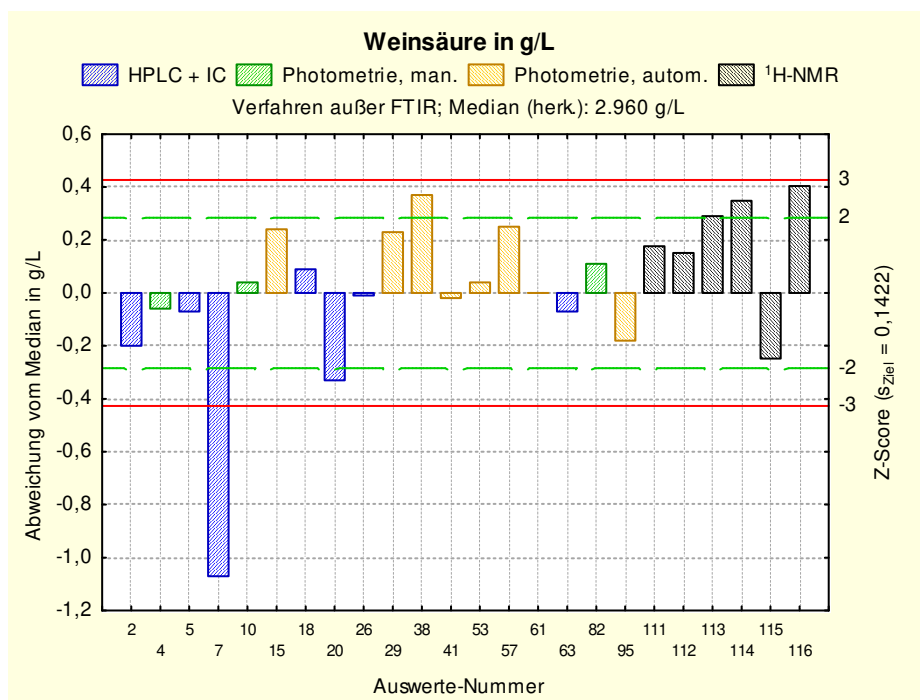
### 5.10.3 Angaben zu den Analyseverfahren

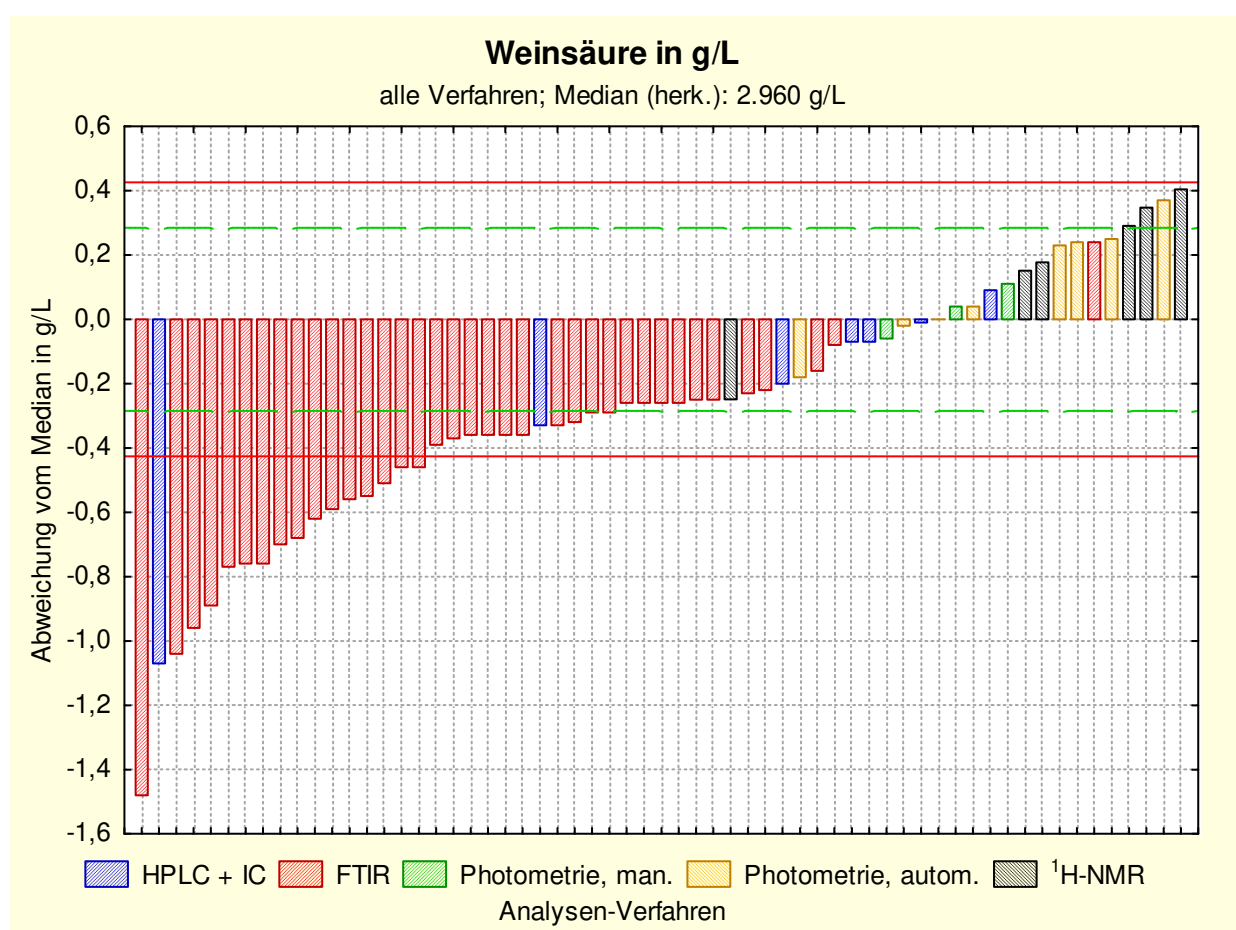
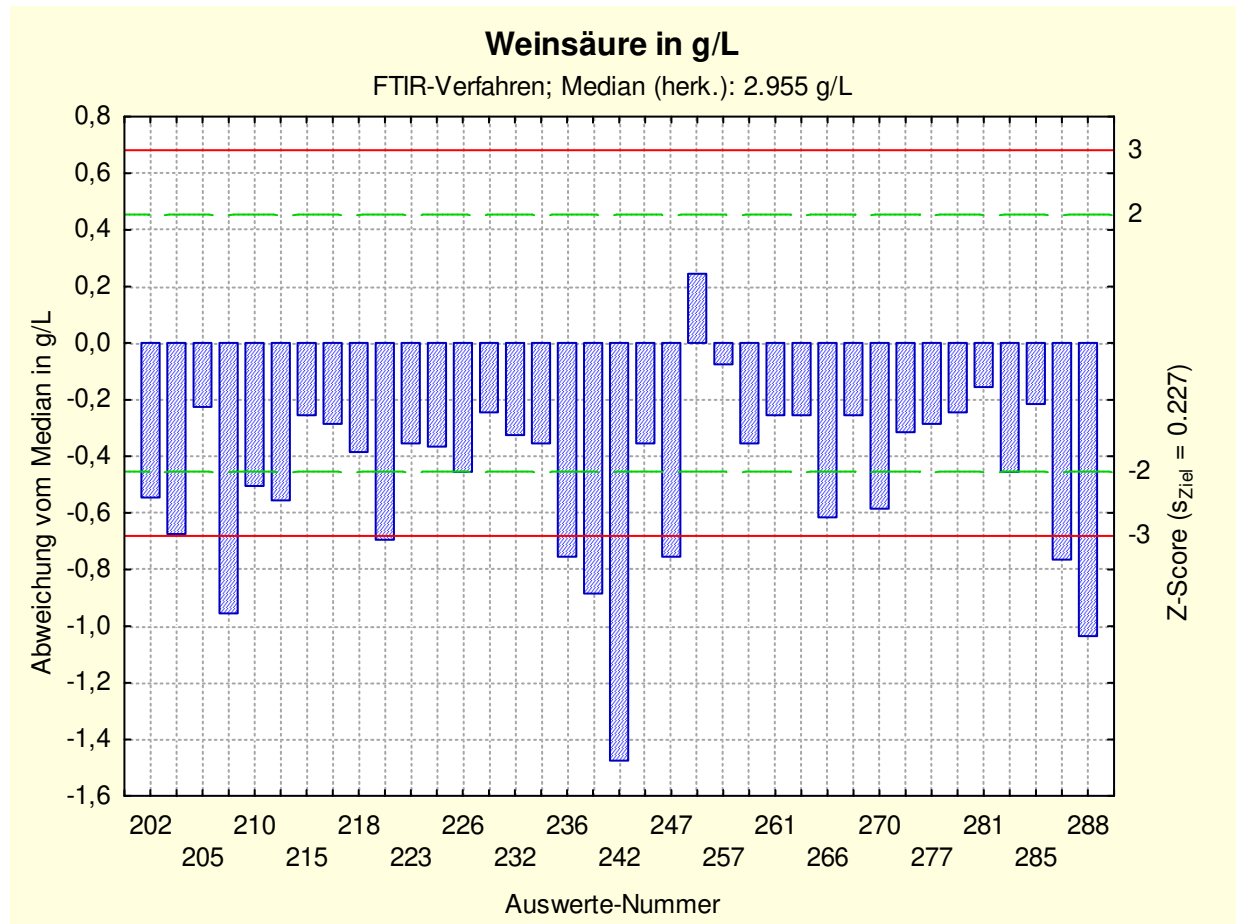
Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	2,753	0,236
IC	Ionenchromatographie	1	3,050	
	HPLC + IC	7	2,804	0,231
photometr.	photometrisch nach Rebelein	3	2,990	0,097
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	8	3,077	0,208
	alle herkömmlichen Verfahren	18	2,964	0,202
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	37	2,523	0,246
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	3,174	0,199

5.10.4 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	2,41	-0,545	-3,84	-2,40	
204	FTIR	2,28	-0,675	-4,75	-2,97	
205	FTIR	2,73	-0,225	-1,58	-0,99	
207	FTIR	2,00	-0,955	-6,73	-4,21	
210	FTIR	2,45	-0,505	-3,56	-2,22	
211	FTIR	2,40	-0,555	-3,91	-2,44	
215	FTIR	2,70	-0,255	-1,80	-1,12	
217	FTIR	2,67	-0,285	-2,01	-1,26	
218	FTIR	2,57	-0,385	-2,71	-1,70	
220	FTIR	2,26	-0,695	-4,89	-3,06	
223	FTIR	2,60	-0,355	-2,50	-1,56	
224	FTIR	2,59	-0,365	-2,57	-1,61	
226	FTIR	2,50	-0,455	-3,20	-2,00	
229	FTIR	2,71	-0,245	-1,73	-1,08	
232	FTIR	2,63	-0,325	-2,29	-1,43	
234	FTIR	2,60	-0,355	-2,50	-1,56	
236	FTIR	2,20	-0,755	-5,32	-3,33	
241	FTIR	2,07	-0,885	-6,23	-3,90	
242	FTIR	1,48	-1,475	-10,39	-6,50	(***)
244	FTIR	2,60	-0,355	-2,50	-1,56	
247	FTIR	2,20	-0,755	-5,32	-3,33	
249	FTIR	3,20	0,245	1,73	1,08	
257	FTIR	2,88	-0,075	-0,53	-0,33	
259	FTIR	2,60	-0,355	-2,50	-1,56	
261	FTIR	2,70	-0,255	-1,80	-1,12	
262	FTIR	2,70	-0,255	-1,80	-1,12	
266	FTIR	2,34	-0,615	-4,33	-2,71	
269	FTIR	2,70	-0,255	-1,80	-1,12	
270	FTIR	2,37	-0,585	-4,12	-2,58	
273	FTIR	2,64	-0,315	-2,22	-1,39	
277	FTIR	2,67	-0,285	-2,01	-1,26	
278	FTIR	2,71	-0,245	-1,73	-1,08	
281	FTIR	2,80	-0,155	-1,09	-0,68	
282	FTIR	2,50	-0,455	-3,20	-2,00	
285	FTIR	2,74	-0,215	-1,51	-0,95	
287	FTIR	2,19	-0,765	-5,39	-3,37	
288	FTIR	1,92	-1,035	-7,29	-4,56	

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





## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,357	-0,0230	-0,92	-0,81	
04	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,420	0,0400	1,61	1,40	
05	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,343	-0,0370	-1,49	-1,29	
07	OIV o. SO <sub>2</sub> -korr.	0,460	0,0800	3,22	2,80	
10	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,420	0,0400	1,61	1,40	
18	IC	0,650	0,2700	10,86	9,45	(*)
26	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,375	-0,0050	-0,20	-0,18	
29	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,400	0,0200	0,80	0,70	
32	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,500	0,1200	4,83	4,20	
42	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,390	0,0100	0,40	0,35	
44	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,370	-0,0100	-0,40	-0,35	
53	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,540	0,1600	6,43	5,60	(**)
55	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,490	0,1100	4,42	3,85	
57	Büchi SO <sub>2</sub> korr.	0,408	0,0280	1,13	0,98	
69	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,450	0,0700	2,82	2,45	
70	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,480	0,1000	4,02	3,50	
74	Wädensw. SO <sub>2</sub> ausg.	0,380	0,0000	0,00	0,00	
82	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,330	-0,0500	-2,01	-1,75	
86	Wasserdampfdest.	0,600	0,2200	8,85	7,70	(*)

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

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

### 5.11.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	11
Minimalwert	0,330	0,330
Mittelwert	0,4078	0,3957
Median	0,3900	0,3800
Maximalwert	0,540	0,490
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,065	0,052
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,019	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,025	0,025
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,54	2,08
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,26	1,81
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,72	0,58
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,73	0,63
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,65	0,55
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,21	0,18

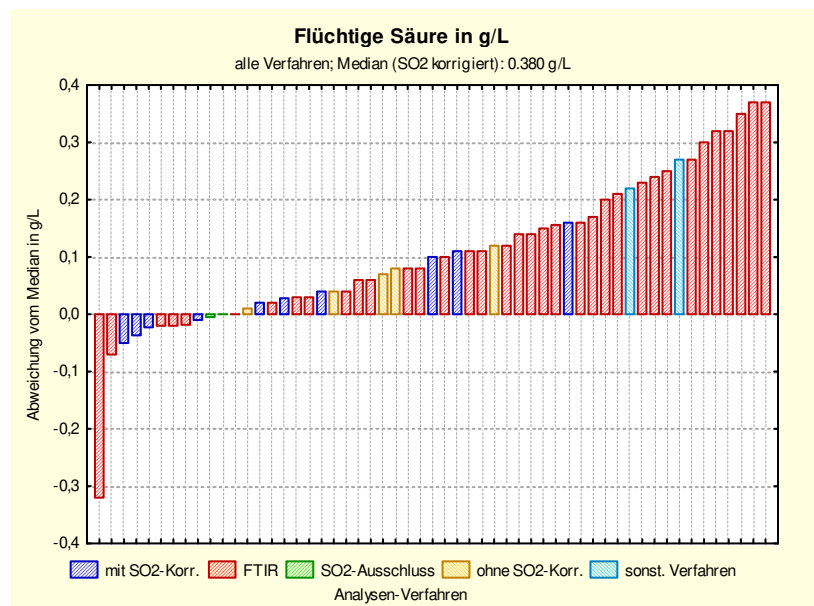
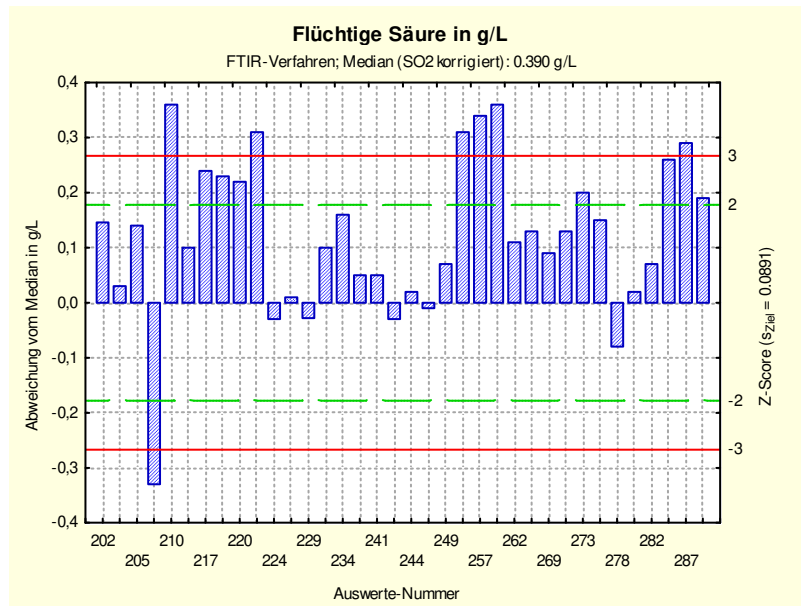
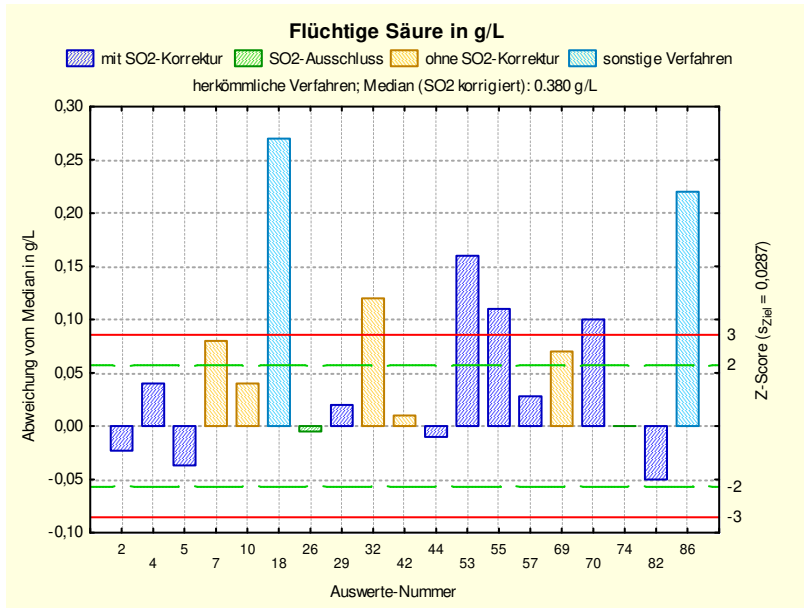
**5.11.3 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	0,536	0,1460	5,74	1,64	
204	FTIR	0,420	0,0300	1,18	0,34	
205	FTIR	0,530	0,1400	5,51	1,57	
207	FTIR	0,060	-0,3300	-12,98	-3,70	
210	FTIR	0,750	0,3600	14,16	4,04	
215	FTIR	0,490	0,1000	3,93	1,12	
217	FTIR	0,630	0,2400	9,44	2,69	
218	FTIR	0,620	0,2300	9,05	2,58	
220	FTIR	0,610	0,2200	8,65	2,47	
223	FTIR	0,700	0,3100	12,19	3,48	
224	FTIR	0,360	-0,0300	-1,18	-0,34	
226	FTIR	0,400	0,0100	0,39	0,11	
229	FTIR	0,362	-0,0280	-1,10	-0,31	
232	FTIR	0,490	0,1000	3,93	1,12	
234	FTIR	0,550	0,1600	6,29	1,80	
236	FTIR	0,440	0,0500	1,97	0,56	
241	FTIR	0,440	0,0500	1,97	0,56	
242	FTIR	0,360	-0,0300	-1,18	-0,34	
244	FTIR	0,410	0,0200	0,79	0,22	
247	FTIR	0,380	-0,0100	-0,39	-0,11	
249	FTIR	0,460	0,0700	2,75	0,79	
255	FTIR	0,700	0,3100	12,19	3,48	
257	FTIR	0,730	0,3400	13,37	3,82	
261	FTIR	0,750	0,3600	14,16	4,04	
262	FTIR	0,500	0,1100	4,33	1,23	
266	FTIR	0,520	0,1300	5,11	1,46	
269	FTIR	0,480	0,0900	3,54	1,01	
270	FTIR	0,520	0,1300	5,11	1,46	
273	FTIR	0,590	0,2000	7,87	2,24	
277	FTIR	0,540	0,1500	5,90	1,68	
278	FTIR	0,310	-0,0800	-3,15	-0,90	
281	FTIR	0,410	0,0200	0,79	0,22	
282	FTIR	0,460	0,0700	2,75	0,79	
285	FTIR	0,650	0,2600	10,23	2,92	
287	FTIR	0,680	0,2900	11,41	3,25	
288	FTIR	0,580	0,1900	7,47	2,13	

**5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO2 unber.	Halbmikrodestillation n. AVV SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,432	0,056
Halbmikro SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,330	
Wädenswil SO2 unber.	Wädenswil-Verfahren SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,450	
Wädenswil SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,380	
Gerhardt SO2 korr.	Destillationsapparat Gerhardt SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	6	0,437	0,088
Gerhardt SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,375	
OIV ohne SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,460	
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	2	0,389	0,051
Büchi SO2 korr.	Destillationsapparat Büchi, SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,408	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	12	0,404	0,065
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	36	0,517	0,140
IC	Ionenchromatographie	1	0,650	
Wasserdampfdest.	Wasserdampfdestillation (ohne nähere Angaben; Eigenbau-Apparatur)	1	0,600	







## 5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,387	-0,018	-0,69	
10	enzymat. autom.	0,460	0,055	2,10	
15	enzymat. autom.	0,350	-0,055	-2,10	
29	enzymat. autom.	0,410	0,005	0,19	
38	enzymat. autom.	0,394	-0,011	-0,42	
42	enzymat. autom.	0,400	-0,005	-0,19	
44	enzymat. autom.	0,460	0,055	2,10	
53	enzymat. autom.	0,470	0,065	2,48	
61	enzymat. autom.	0,440	0,035	1,33	
70	enzymat. autom.	0,395	-0,010	-0,38	
95	enzymat. autom.	0,405	0,000	0,00	

### 5.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
02	HPLC	0,458	0,137	6,34	(**)
20	HPLC	0,320	-0,001	-0,06	
63	enzymat. Hand	0,293	-0,028	-1,31	
111	NMR	0,320	-0,002	-0,08	
112	NMR	0,326	0,005	0,22	
113	NMR	0,341	0,020	0,91	
114	NMR	0,354	0,033	1,52	
115	NMR	0,294	-0,027	-1,25	
116	NMR	0,323	0,001	0,06	
211	FTIR	0,520	0,199	9,21	(*)
241	FTIR	0,360	0,039	1,79	
259	FTIR	0,570	0,249	11,53	(*)

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

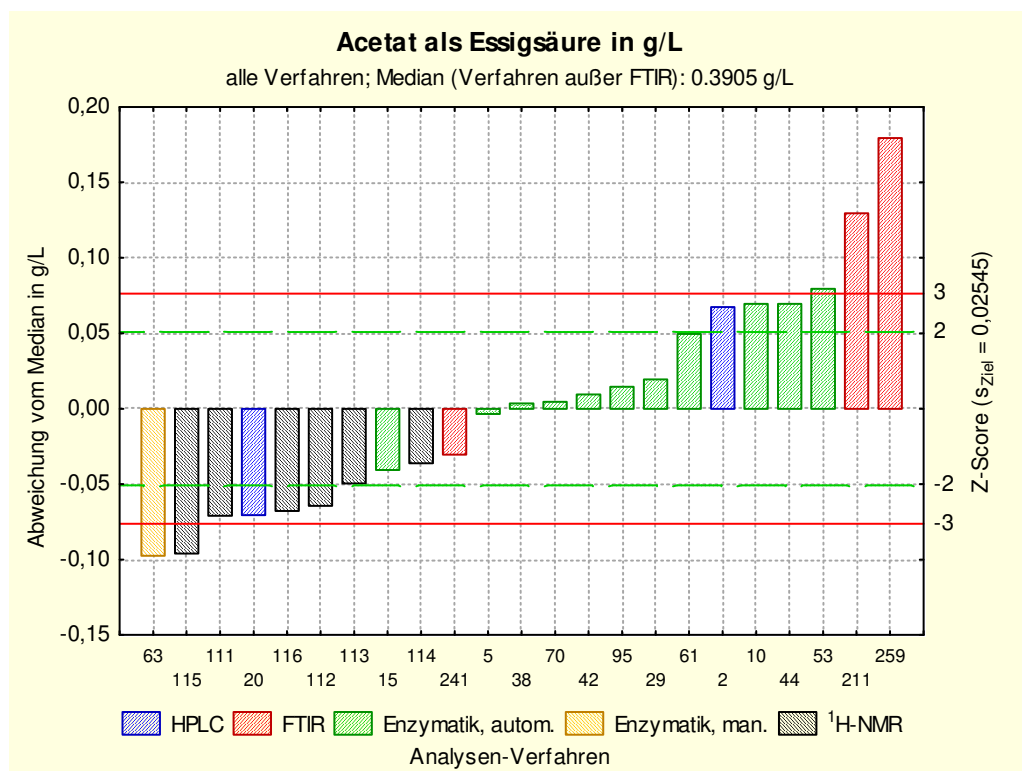
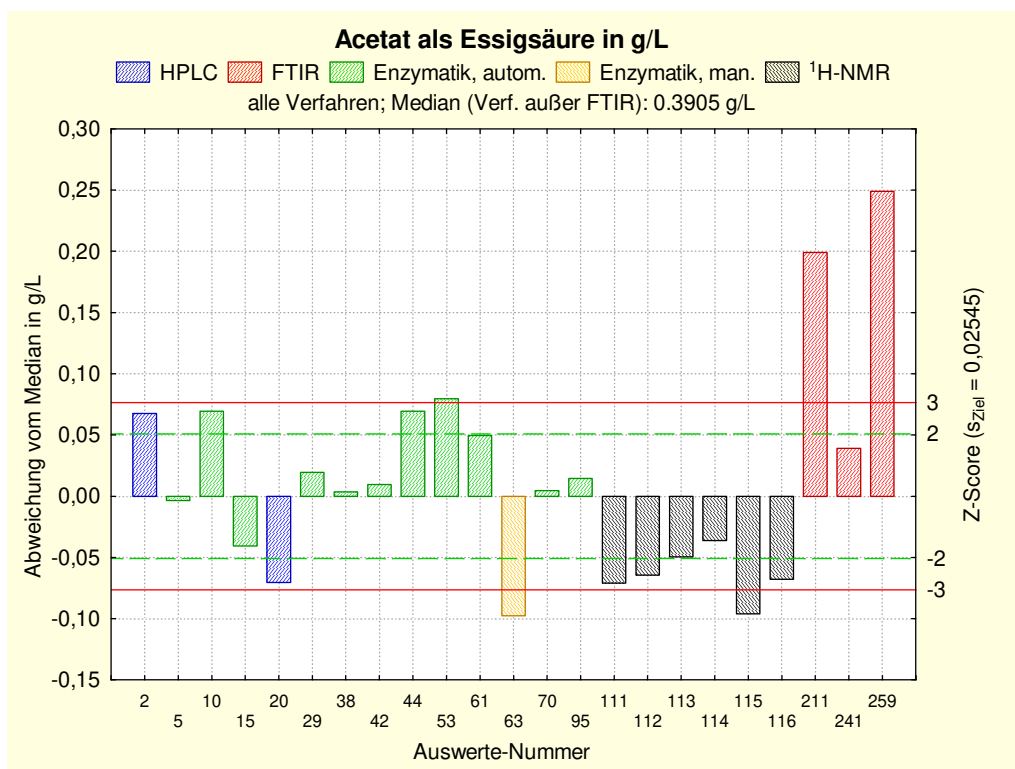
(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

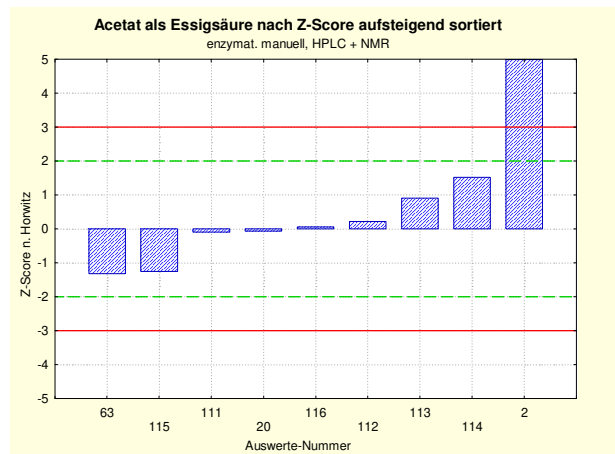
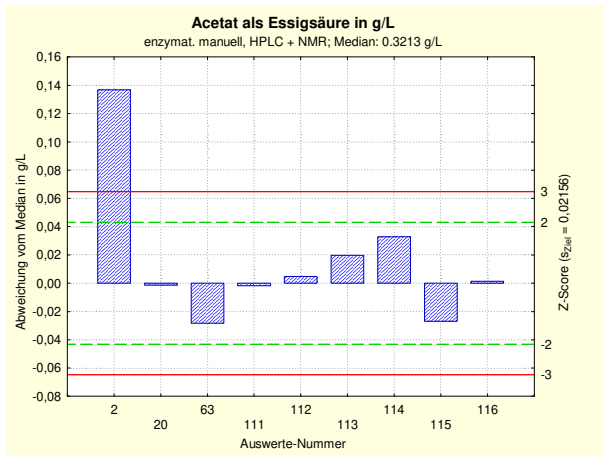
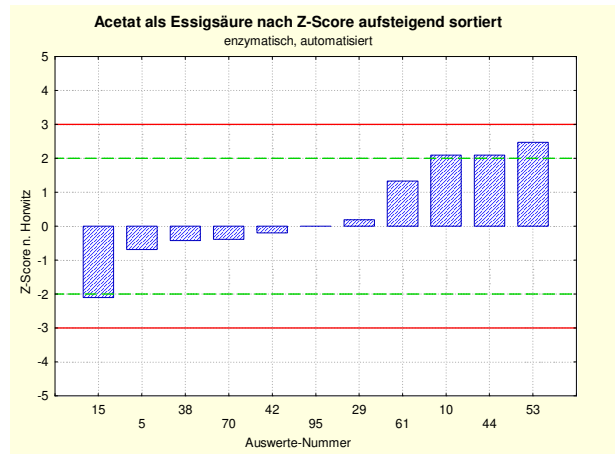
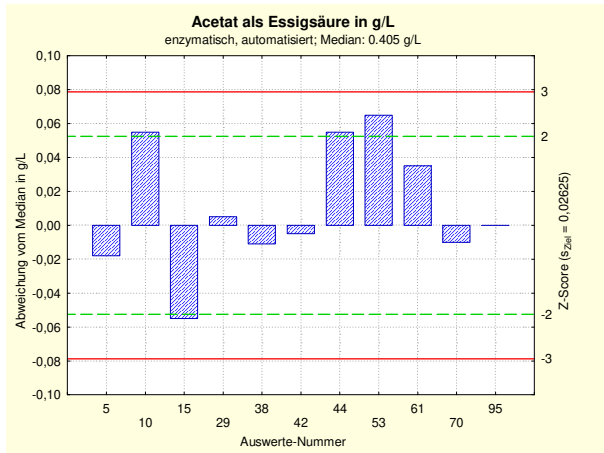
### 5.12.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat.		HPLC, enz.man., <sup>1</sup> H-NMR	
	alle Daten	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	11	9	9	8
Minimalwert	0,350	0,293	0,293	0,293
Mittelwert	0,416	0,337	0,337	0,321
Median	0,405	0,323	0,323	0,321
Maximalwert	0,470	0,458	0,458	0,354
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,037	0,050	0,050	0,021
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,011	0,017	0,017	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,026	0,022	0,022	0,022
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )				
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )				
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,42	2,29	2,29	0,96
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> )	0,43	0,76	0,76	0,34
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )				
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )				

5.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	11	0,415	0,039
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	2	0,389	0,111
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,293	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	6	0,326	0,021
	HPLC, enzymatisch manuell + <sup>1</sup> H-NMR	9	0,327	0,029
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	3	0,500	0,094





**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
02	HPLC	2,46	-0,090	-0,72	-1,09	
05	HPLC	2,55	0,000	0,00	0,00	
07	HPLC	2,32	-0,230	-1,84	-2,78	
18	IC	2,77	0,220	1,76	2,66	
20	HPLC	2,55	0,000	0,00	0,00	
26	HPLC	2,60	0,050	0,40	0,60	
63	enzymat. Hand	2,42	-0,135	-1,08	-1,63	
111	NMR	2,45	-0,103	-0,82	-1,24	
112	NMR	2,43	-0,116	-0,93	-1,40	
113	NMR	2,49	-0,060	-0,48	-0,73	
114	NMR	2,67	0,118	0,94	1,43	
115	NMR	2,37	-0,184	-1,47	-2,22	
116	NMR	2,49	-0,058	-0,46	-0,70	

**5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enz.(L-), autom.	2,62	0,008	0,07	0,10	
05	enz.(L-), autom.	2,63	0,015	0,12	0,18	
10	enz.(L-), autom.	5,03	2,418	18,91	28,71	(*)
15	enz.(L-), autom.	2,50	-0,112	-0,87	-1,32	
29	enz.(L-), autom.	2,62	0,012	0,10	0,15	
38	enz.(L-), autom.	2,66	0,048	0,38	0,57	
41	enz.(L-), autom.	2,65	0,038	0,30	0,46	
42	enz.(L-), autom.	2,54	-0,072	-0,56	-0,85	
44	enz.(L-), autom.	2,67	0,058	0,46	0,69	
53	enz.(L-), autom.	2,54	-0,072	-0,56	-0,85	
55	enz.(L-), autom.	2,60	-0,012	-0,09	-0,14	
57	enz.(L-), autom.	2,77	0,158	1,24	1,88	
61	enz.(L-), autom.	2,49	-0,122	-0,95	-1,44	
63	enz.(L-) Hand	2,42	-0,197	-1,54	-2,33	
70	enz.(L-), autom.	2,60	-0,008	-0,07	-0,10	
82	enz.(L-) Hand	2,45	-0,162	-1,26	-1,92	
95	enz.(L-), autom.	2,68	0,063	0,50	0,75	

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

**5.13.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure	L-Äpfelsäure
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	13	16
Minimalwert	2,32	2,42
Mittelwert	2,505	2,590
Median	2,490	2,612
Maximalwert	2,77	2,77
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,123	0,094
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,034	0,023
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,123	0,128
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	0,081	0,084
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	0,218	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,00	0,73
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	1,52	1,11
Quotient ( $s_L/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	0,56	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,28	0,18
Quotient ( $u_M/s_{exp \text{ herk.}}$ )	0,42	0,28
Quotient ( $u_M/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )	0,16	

**5.13.4 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

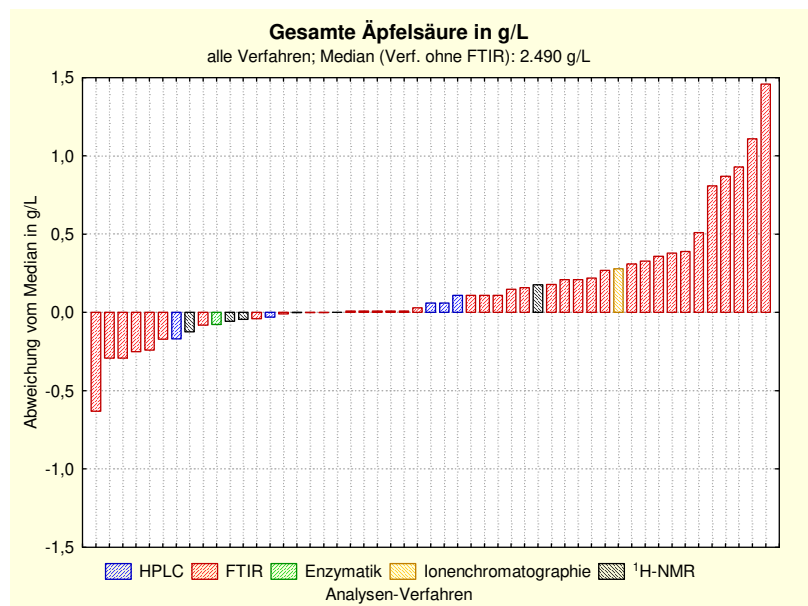
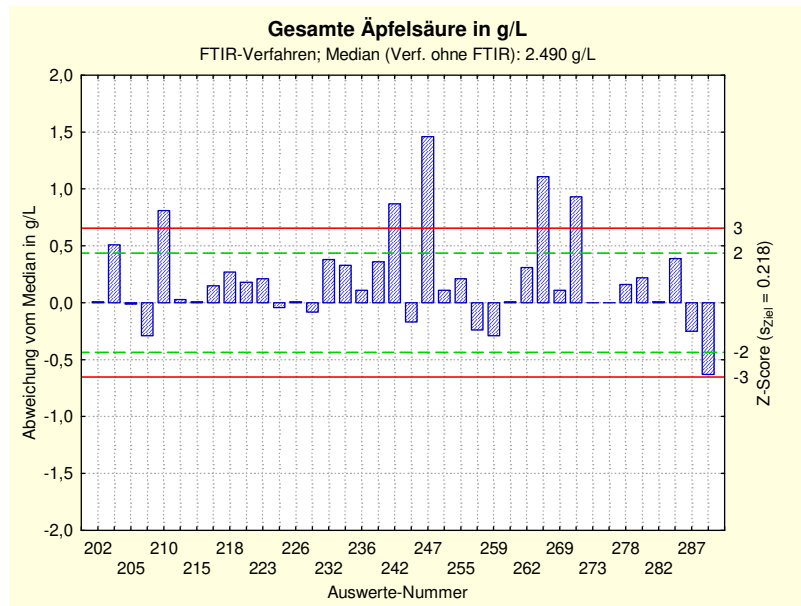
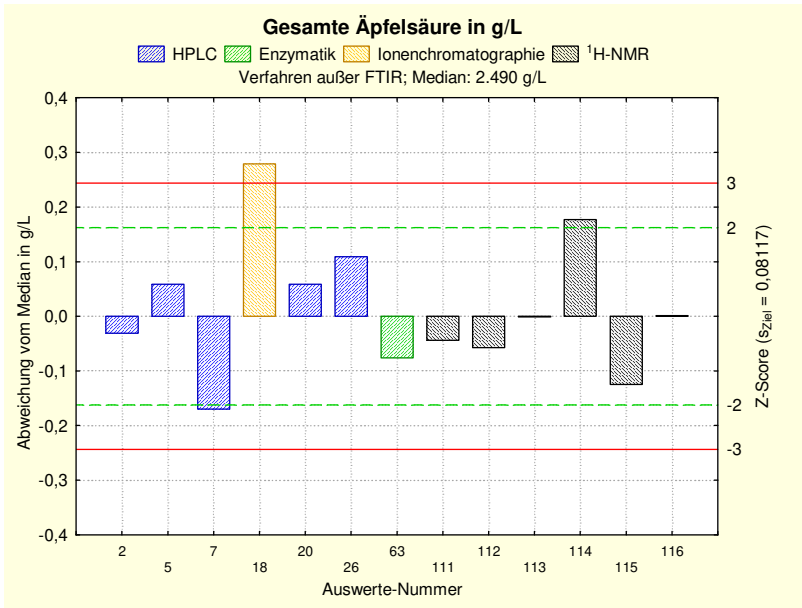
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	2,50	0,010	0,08	0,12	
204	FTIR	3,00	0,510	4,15	6,28	(***)
205	FTIR	2,48	-0,010	-0,08	-0,12	
207	FTIR	2,20	-0,290	-2,36	-3,57	
210	FTIR	3,30	0,810	6,60	9,98	(***)
211	FTIR	2,52	0,030	0,24	0,37	
215	FTIR	2,50	0,010	0,08	0,12	
217	FTIR	2,64	0,150	1,22	1,85	
218	FTIR	2,76	0,270	2,20	3,33	
220	FTIR	2,67	0,180	1,47	2,22	
223	FTIR	2,70	0,210	1,71	2,59	
224	FTIR	2,45	-0,040	-0,33	-0,49	
226	FTIR	2,50	0,010	0,08	0,12	
229	FTIR	2,41	-0,080	-0,65	-0,99	
232	FTIR	2,87	0,380	3,09	4,68	
234	FTIR	2,82	0,330	2,69	4,07	
236	FTIR	2,60	0,110	0,90	1,36	
241	FTIR	2,85	0,360	2,93	4,44	
242	FTIR	3,36	0,870	7,09	10,72	(***)
244	FTIR	2,32	-0,170	-1,38	-2,09	
247	FTIR	3,95	1,460	11,89	17,99	(*)
249	FTIR	2,60	0,110	0,90	1,36	
255	FTIR	2,70	0,210	1,71	2,59	
257	FTIR	2,25	-0,240	-1,95	-2,96	
259	FTIR	2,20	-0,290	-2,36	-3,57	
261	FTIR	2,50	0,010	0,08	0,12	
262	FTIR	2,80	0,310	2,52	3,82	
266	FTIR	3,60	1,110	9,04	13,68	(***)
269	FTIR	2,60	0,110	0,90	1,36	
270	FTIR	3,42	0,930	7,57	11,46	(***)
273	FTIR	2,49	0,000	0,00	0,00	
277	FTIR	2,49	0,000	0,00	0,00	
278	FTIR	2,65	0,160	1,30	1,97	
281	FTIR	2,71	0,220	1,79	2,71	
282	FTIR	2,50	0,010	0,08	0,12	
285	FTIR	2,88	0,390	3,18	4,81	
287	FTIR	2,24	-0,250	-2,04	-3,08	
288	FTIR	1,86	-0,630	-5,13	-7,76	(***)

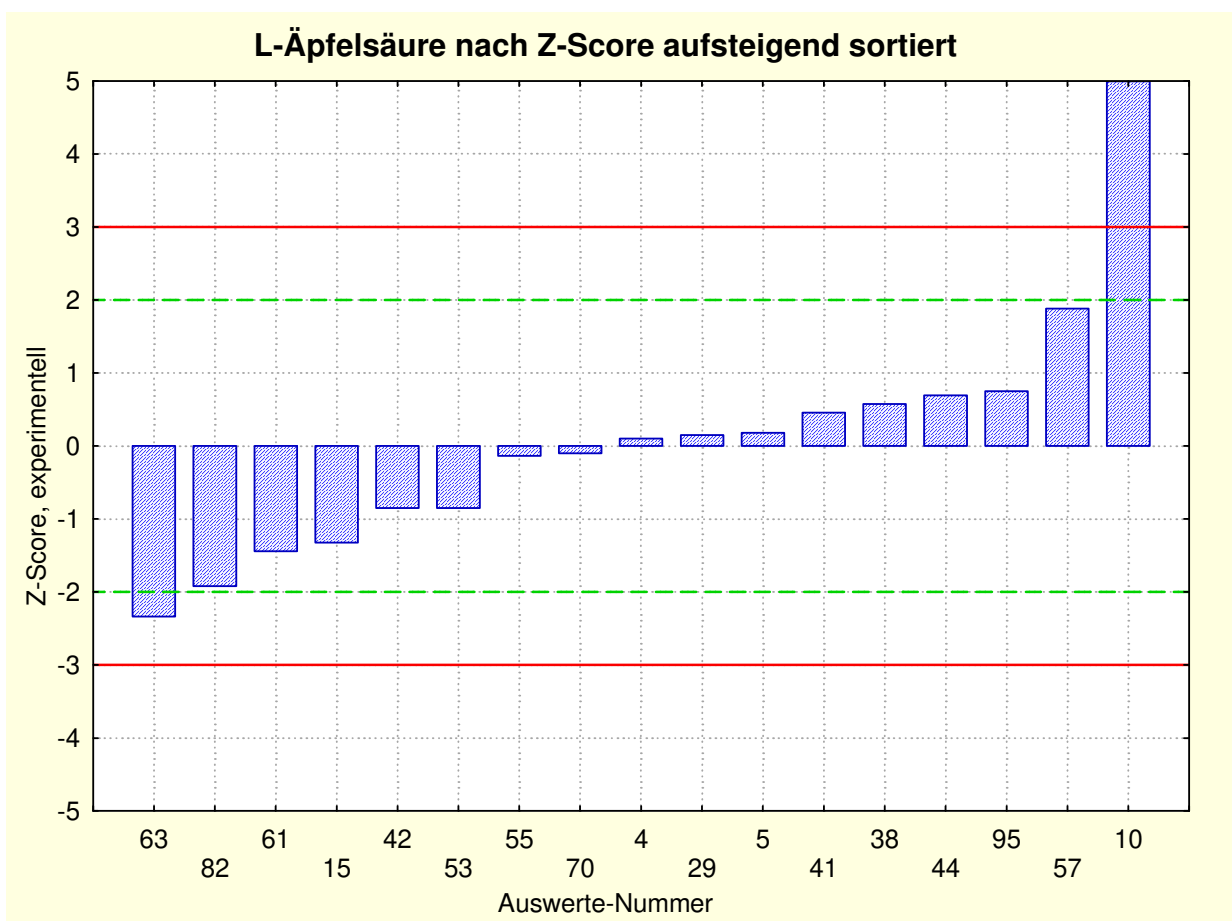
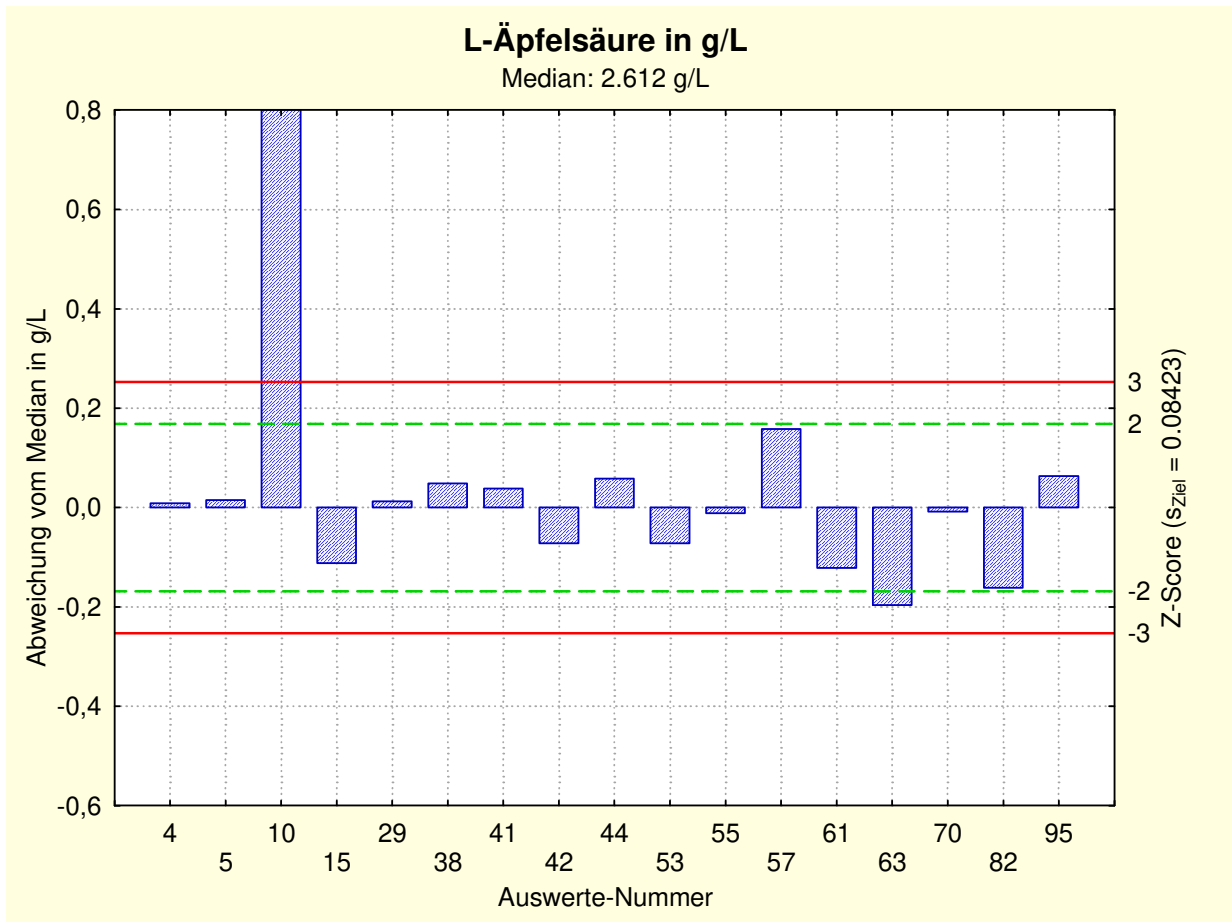
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

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

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	5	2,497	0,123
IC	Ionenchromatographie	1	2,770	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, manuell	1	2,415	
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	7	2,525	0,149
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	2,630	0,295
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,474	0,090
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	15	2,621	0,090
enz.(L-), Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	2	2,433	0,028
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	17	2,602	0,110





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

### 5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	HPLC	0,383	0,183	12,70	6,90	(*)
04	enzymat. autom.	0,220	0,020	1,39	0,75	
05	enzymat. autom.	0,178	-0,022	-1,53	-0,83	
07	HPLC	0,260	0,060	4,16	2,26	
18	IC	<NG				
20	HPLC	0,200	0,000	0,00	0,00	
26	HPLC	<= 0				
63	enzymat. Hand	0,228	0,028	1,94	1,06	
70	enzymat. autom.	0,150	-0,050	-3,47	-1,89	
95	enzymat. autom.	0,170	-0,030	-2,08	-1,13	
111	NMR	< 200				
112	NMR	< 200				
113	NMR	< 200				
114	NMR	< 200				
115	NMR	0,163	-0,037	-2,57	-1,40	
116	NMR	< 200				

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

### 5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enz.(L-) autom.	0,050	0,024	9,42	1,28	
05	enz.(L-) autom.	0,020	-0,006	-2,36	-0,32	
10	enz.(L-) autom.	<= 0				
15	enz.(L-) autom.	<= 0				
29	enz.(L-) autom.	0,022	-0,004	-1,57	-0,21	
38	enz.(L-) autom.	<= 0				
41	enz.(L-) autom.	<= 0				
42	enz.(L-) autom.	0,020	-0,006	-2,36	-0,32	
44	enz.(L-) autom.	<0,1				
53	enz.(L-) autom.	0,070	0,044	17,27	2,35	
55	enz.(L-) autom.	<= 0				
57	enz.(L-) autom.	0,020	-0,006	-2,36	-0,32	
61	enz.(L-) autom.	<= 0				
63	enz.(L-) Hand	0,085	0,059	23,16	3,15	
70	enz.(L-) autom.	0,019	-0,007	-2,85	-0,39	
82	enz.(L-) Hand	0,092	0,066	25,91	3,52	
95	enz.(L-) autom.	0,030	0,004	1,57	0,21	

### 5.14.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Daten

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure	L- Milchsäure
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	7	10
Minimalwert	0,15	0,02
Mittelwert	0,201	0,043
Median	0,200	0,026
Maximalwert	0,26	0,09
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,038	0,029
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,014	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,014	0,003
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	0,027	0,019
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,64	11,50
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	1,43	1,56
Quotient ( $s_L/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	1,00	3,64
Quotient ( $u_M/s_{exp \text{ herk.}}$ )	0,54	0,49
Quotient ( $u_M/s_{\text{FTIR}}^{\text{SÜ}}$ )		



**5.14.4 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

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

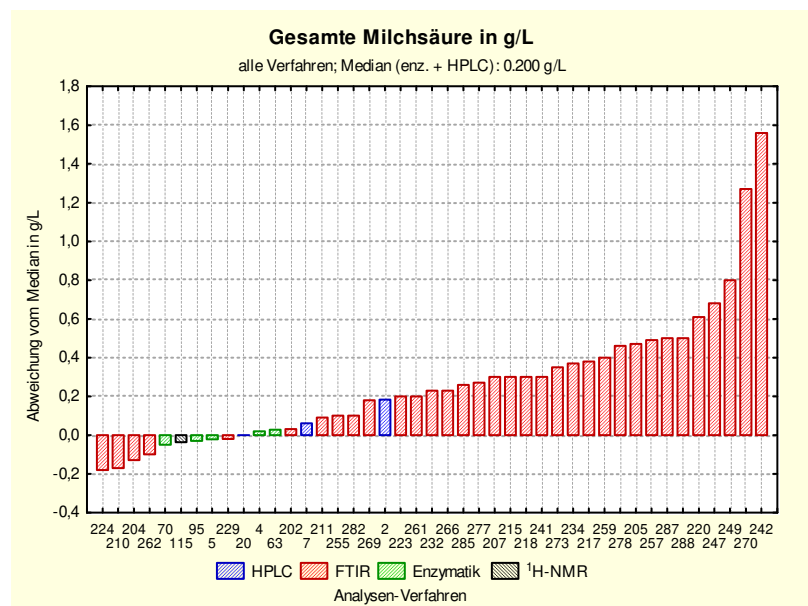
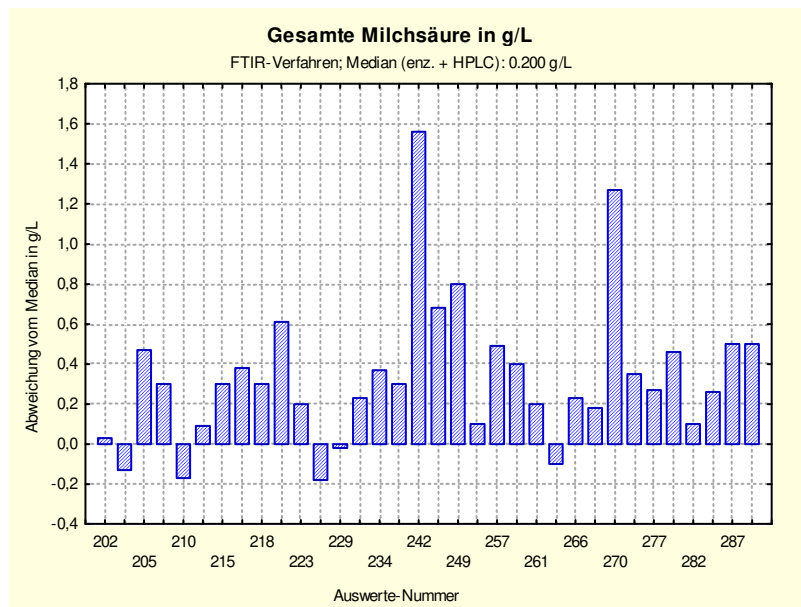
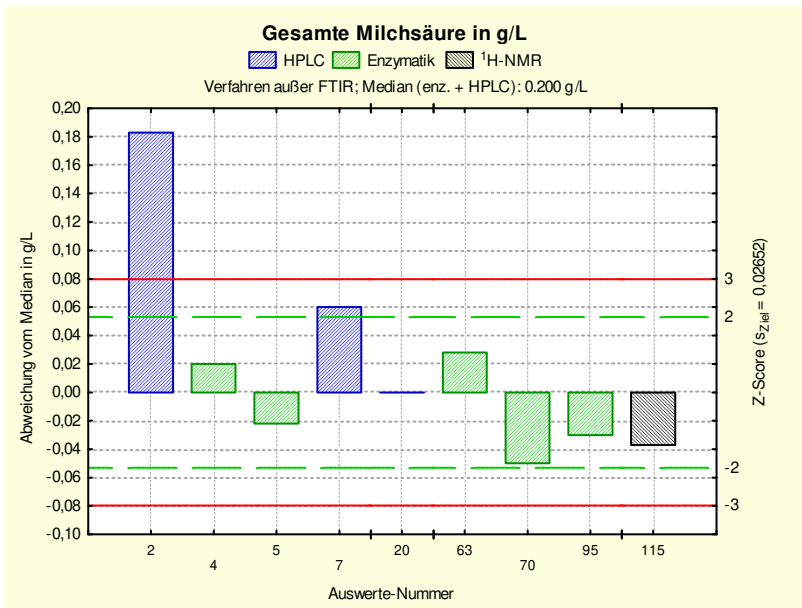
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	0,230	0,030			
204	FTIR	0,070	-0,130			(*)
205	FTIR	0,670	0,470			(*)
207	FTIR	0,500	0,300			(*)
210	FTIR	0,030	-0,170			(*)
211	FTIR	0,290	0,090			(***)
215	FTIR	0,500	0,300			(*)
217	FTIR	0,580	0,380			(*)
218	FTIR	0,500	0,300			(*)
220	FTIR	0,810	0,610			(*)
223	FTIR	0,400	0,200			(*)
224	FTIR	0,020	-0,180			(*)
226	FTIR	<= 0				
229	FTIR	0,180	-0,020			
232	FTIR	0,430	0,230			(*)
234	FTIR	0,570	0,370			(*)
236	FTIR	<= 0				
241	FTIR	0,500	0,300			(*)
242	FTIR	1,760	1,560			(*)
244	FTIR	<= 0				
247	FTIR	0,880	0,680			(*)
249	FTIR	1,000	0,800			(*)
255	FTIR	0,300	0,100			(***)
257	FTIR	0,690	0,490			(*)
259	FTIR	0,600	0,400			(*)
261	FTIR	0,400	0,200			(*)
262	FTIR	0,100	-0,100			(*)
266	FTIR	0,430	0,230			(*)
269	FTIR	0,380	0,180			(*)
270	FTIR	1,470	1,270			(*)
273	FTIR	0,550	0,350			(*)
277	FTIR	0,470	0,270			(*)
278	FTIR	0,660	0,460			(*)
281	FTIR	<= 0				
282	FTIR	0,300	0,100			(***)
285	FTIR	0,460	0,260			(*)
287	FTIR	0,700	0,500			(*)
288	FTIR	0,700	0,500			(*)

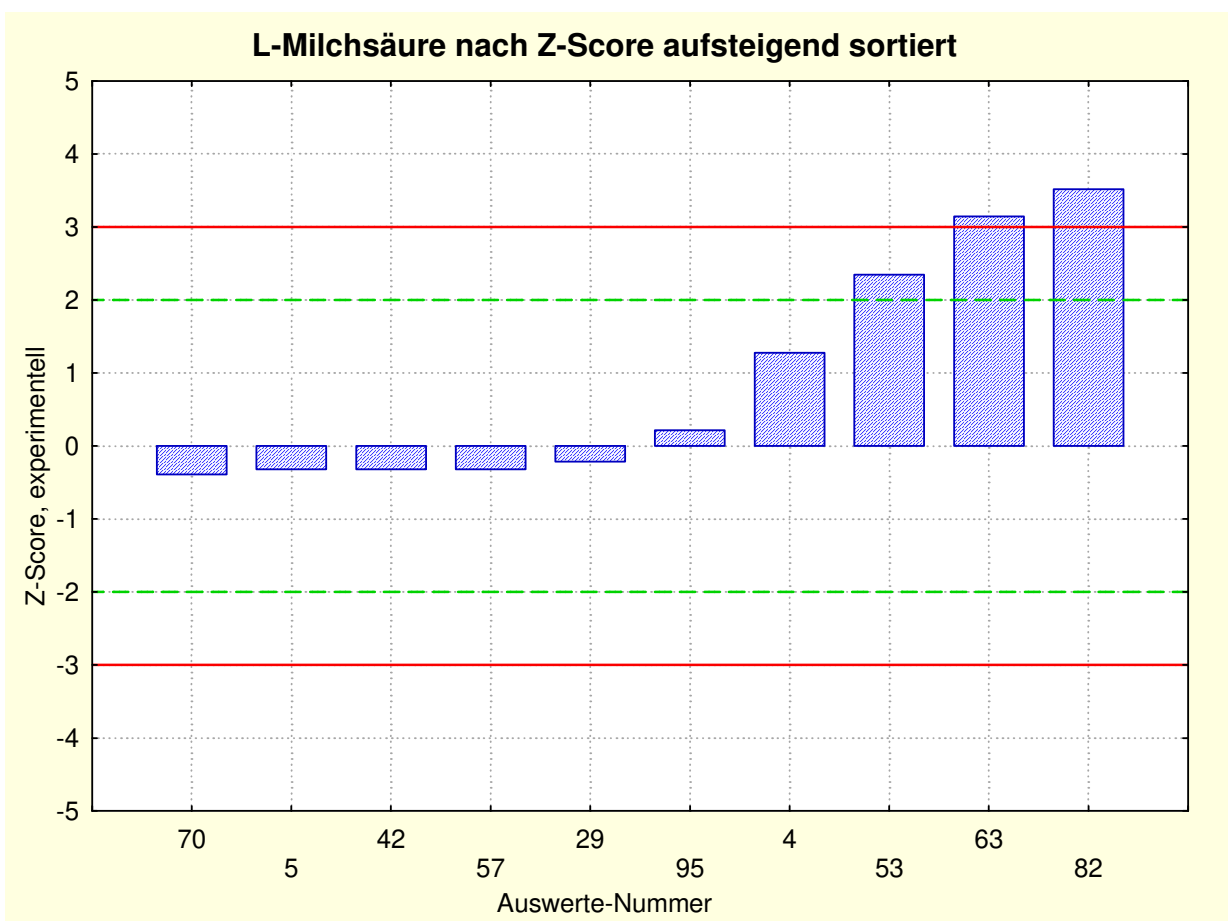
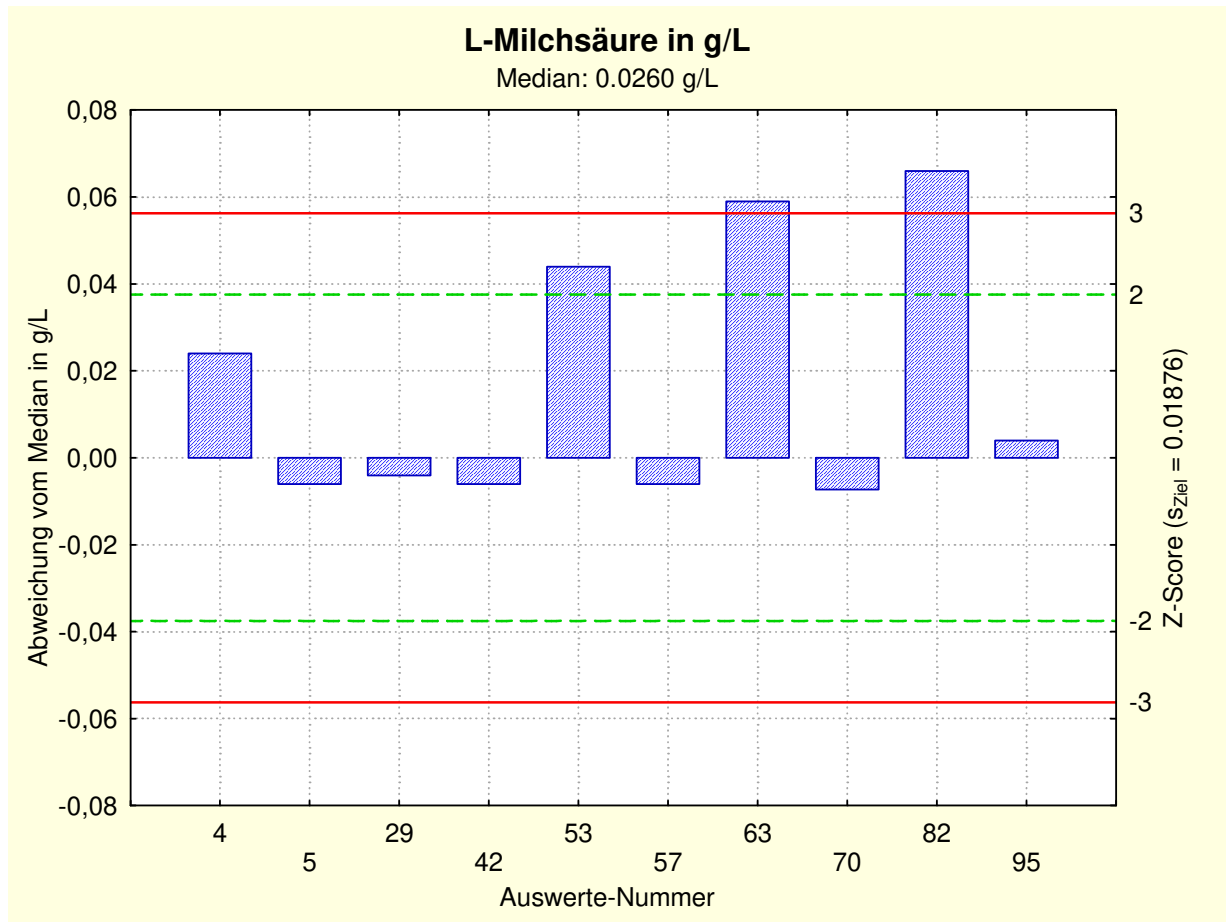
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

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

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	3	0,281	0,106
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	4	0,178	0,031
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	1	0,228	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	8	0,213	0,055
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	34	0,492	0,278
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,163	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	8	0,029	0,016
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	2	0,089	0,006
	alle Verfahren L-Milchsäure	10	0,042	0,033





## 6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT19P05

### 6.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 6.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	1,00553	0,000080	0,61	
02	LwK 8.1	1,00551	0,000060	0,45	
03	LwK 8.4	1,00549	0,000040	0,30	
04	LwK 8.4	1,00536	-0,000090	-0,68	
05	LwK 8.4	1,00543	-0,000020	-0,15	
06	LwK 8.4	1,00534	-0,000110	-0,83	
08	LwK 8.1	1,00529	-0,000160	-1,21	
09	LwK 8.4	1,00551	0,000060	0,45	
12	LwK 8.4	1,00535	-0,000100	-0,76	
14	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	
15	LwK 8.4	1,00556	0,000110	0,83	
17	LwK 8.4	1,00530	-0,000150	-1,14	
18	LwK 8.4	1,00540	-0,000050	-0,38	
19	LwK 8.4	1,00585	0,000400	3,03	
20	LwK 8.4	1,00556	0,000110	0,83	
21	LwK 8.4	1,00570	0,000250	1,89	
22	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	
23	LwK 8.4	1,00544	-0,000010	-0,08	
24	LwK 8.4	1,00565	0,000200	1,52	
25	LwK 8.4	1,00541	-0,000040	-0,30	
26	LwK 8.4	1,00530	-0,000150	-1,14	
27	LwK 8.4	1,00554	0,000090	0,68	
28	LwK 8.1	1,00530	-0,000150	-1,14	
29	LwK 8.4	1,00539	-0,000060	-0,45	
31	LwK 8.4	1,00548	0,000030	0,23	
34	LwK 8.4	1,00549	0,000040	0,30	
36	LwK 8.4	1,00544	-0,000010	-0,08	
38	LwK 8.4	1,00564	0,000190	1,44	
39	LwK 8.4	1,00539	-0,000060	-0,45	
40	LwK 8.4	1,00532	-0,000130	-0,98	
41	LwK 8.4	1,00545	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	1,05520	0,049750	376,89	(**)
43	LwK 8.4	1,00549	0,000040	0,30	
44	LwK 8.4	1,00550	0,000050	0,38	
45	LwK 8.4	1,00553	0,000080	0,61	
46	LwK 8.4	1,00538	-0,000070	-0,53	
47	LwK 8.4	1,00545	0,000000	0,00	
48	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	
50	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	
52	LwK 8.4	1,00544	-0,000009	-0,07	
53	LwK 8.4	1,00570	0,000250	1,89	
55	LwK 8.4	1,00545	0,000000	0,00	
56	LwK 8.4	1,00534	-0,000110	-0,83	
58	LwK 8.4	1,00538	-0,000070	-0,53	
60	LwK 8.4	1,00540	-0,000050	-0,38	
61	LwK 8.4	1,00540	-0,000050	-0,38	
62	LwK 8.3	1,00540	-0,000050	-0,38	
64	LwK 8.4	1,00529	-0,000160	-1,21	
65	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	
66	LwK 8.4	1,00540	-0,000050	-0,38	
68	LwK 8.4	1,00580	0,000350	2,65	
70	LwK 8.4	1,00552	0,000070	0,53	
74	LwK 8.4	0,98584	-0,019610	-148,56	(**)
75	LwK 8.4	1,00520	-0,000250	-1,89	
82	LwK 8.4	1,00576	0,000310	2,35	
83	LwK 8.2	1,00570	0,000250	1,89	
86	LwK 8.4	1,00540	-0,000050	-0,38	
87	LwK 8.4	1,00536	-0,000090	-0,68	
106	LwK 8.4	1,00560	0,000150	1,14	

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

## 6.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
202	FTIR	1,00507	-0,000380	-2,00	
203	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
204	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
205	FTIR	1,00490	-0,000550	-2,89	
206	FTIR	1,00554	0,000090	0,47	
207	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
208	FTIR	1,00253	-0,002920	-15,37	(***)
210	FTIR	1,00530	-0,000150	-0,79	
211	FTIR	1,00560	0,000150	0,79	
212	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
214	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
215	FTIR	1,00510	-0,000350	-1,84	
216	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
217	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
218	FTIR	1,00518	-0,000270	-1,42	
219	FTIR	1,00580	0,000350	1,84	
220	FTIR	1,00530	-0,000150	-0,79	
221	FTIR	1,00545	0,000000	0,00	
222	FTIR	1,00467	-0,000780	-4,11	
223	FTIR	1,00510	-0,000350	-1,84	
224	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
225	FTIR	1,00572	0,000270	1,42	
226	FTIR	1,00550	0,000050	0,26	
227	FTIR	1,00537	-0,000080	-0,42	
228	FTIR	1,00490	-0,000550	-2,89	
229	FTIR	1,00533	-0,000120	-0,63	
231	FTIR	1,00480	-0,000650	-3,42	
232	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
234	FTIR	1,00536	-0,000090	-0,47	
235	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
236	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
237	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
240	FTIR	1,00537	-0,000080	-0,42	
241	FTIR	1,00570	0,000250	1,32	
242	FTIR	1,00529	-0,000160	-0,84	
243	FTIR	1,00550	0,000050	0,26	
244	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
245	FTIR	1,00560	0,000150	0,79	
247	FTIR	1,00571	0,000260	1,37	
249	FTIR	1,00570	0,000250	1,32	
250	FTIR	1,00440	-0,001050	-5,53	(***)
251	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
252	FTIR	1,00565	0,000200	1,05	
254	FTIR	1,00570	0,000250	1,32	
255	FTIR	1,00570	0,000250	1,32	
256	FTIR	1,00524	-0,000210	-1,11	
257	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
258	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
259	FTIR	1,00400	-0,001450	-7,63	(***)
260	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
261	FTIR	1,00550	0,000050	0,26	
262	FTIR	1,00600	0,000550	2,89	
263	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
264	FTIR	1,00515	-0,000300	-1,58	
265	FTIR	1,00450	-0,000950	-5,00	(***)
266	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
267	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
268	FTIR	1,00528	-0,000170	-0,89	
269	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
270	FTIR	1,00430	-0,001150	-6,05	(***)
271	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
272	FTIR	1,00536	-0,000090	-0,47	
273	FTIR	1,00549	0,000040	0,21	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	1,00560	0,000150	0,79	
276	FTIR	1,00540	-0,000050	-0,26	
277	FTIR	1,00470	-0,000750	-3,95	
278	FTIR	1,00500	-0,000450	-2,37	
279	FTIR	1,00570	0,000250	1,32	
280	FTIR	1,00510	-0,000350	-1,84	
281	FTIR	1,00460	-0,000850	-4,47	
282	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
283	FTIR	1,00510	-0,000350	-1,84	
284	FTIR	1,00550	0,000050	0,26	
285	FTIR	1,00589	0,000440	2,32	
287	FTIR	1,00560	0,000150	0,79	
288	FTIR	1,00680	0,001350	7,11	(***)
320	FTIR	1,00520	-0,000250	-1,32	
337	FTIR	1,00543	-0,000020	-0,11	
365	FTIR	1,00490	-0,000550	-2,89	

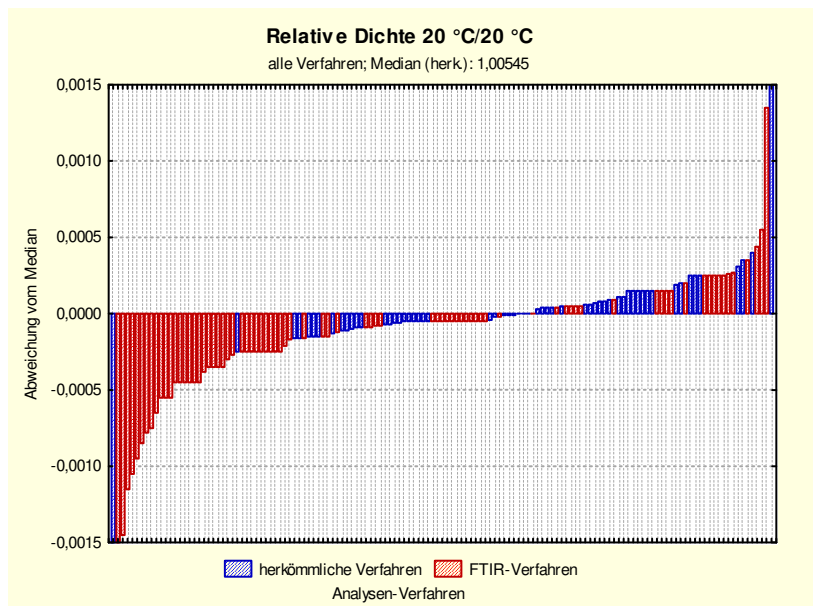
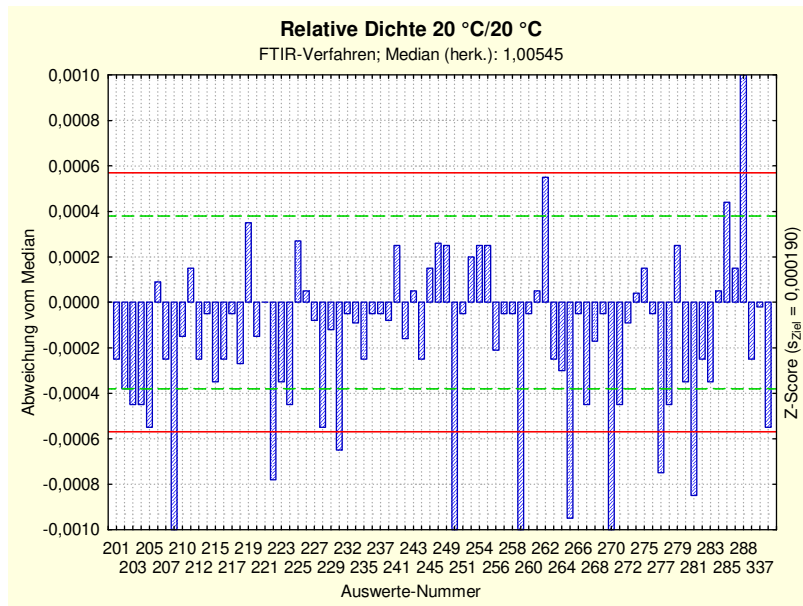
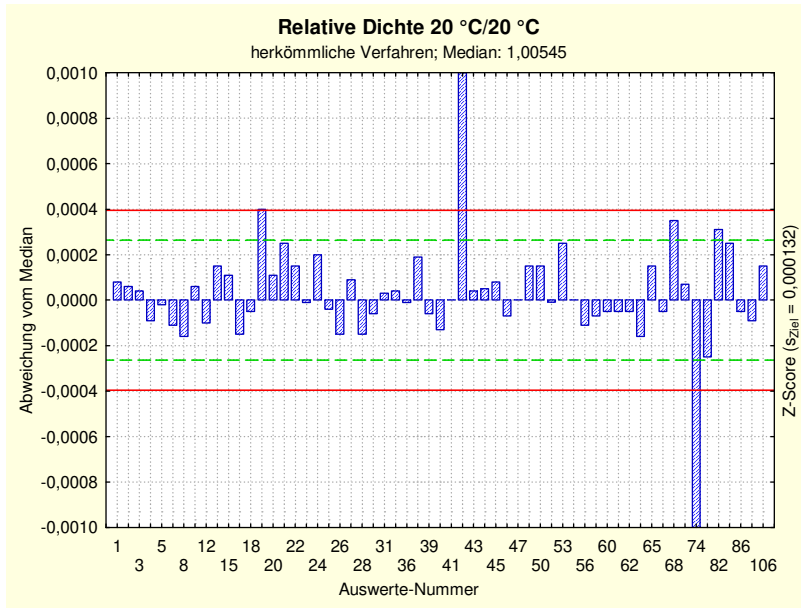
(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

**6.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	59	57
Minimalwert	0,98584	1,00520
Mittelwert	1,005989	1,005479
Median	1,005450	1,005450
Maximalwert	1,05520	1,00585
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,007002	0,000139
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000912	0,000018
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 ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	53,05	1,05
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	36,85	0,73
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	6,91	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	4,80	0,10

**6.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	4	1,00541	0,000148
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00570	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,00540	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	53	1,00548	0,000141
	herkömmliche Verfahren	59	1,00547	0,000145
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	1,00530	0,000326



## 6.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 6.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	83,00	-0,210	-0,09	-0,39	
02	LwK 2.4	83,39	0,180	0,07	0,34	
03	LwK 2.9	84,71	1,500	0,62	2,80	
04	LwK 2.1	83,50	0,292	0,12	0,55	
05	LwK 2.4	82,15	-1,060	-0,44	-1,98	
06	LwK 2.9	83,74	0,530	0,22	0,99	
08	LwK 2.4	83,66	0,450	0,19	0,84	
09	LwK 2.1	83,53	0,320	0,13	0,60	
12	LwK 2.9	84,20	0,990	0,41	1,85	
14	LwK 2.9	84,00	0,790	0,33	1,48	
15	LwK 2.9	83,30	0,090	0,04	0,17	
17	LwK 2.9	84,40	1,190	0,49	2,22	
18	LwK 2.1	84,31	1,100	0,45	2,06	
19	LwK 2.9	83,70	0,490	0,20	0,92	
20	LwK 2.9	83,84	0,630	0,26	1,18	
21	LwK 2.7	83,60	0,390	0,16	0,73	
22	LwK 2.9	83,50	0,290	0,12	0,54	
23	LwK 2.5	81,20	-2,010	-0,83	-3,76	
24	LwK 2.9	82,70	-0,510	-0,21	-0,95	
25	LwK 2.9	83,98	0,770	0,32	1,44	
26	LwK 2.4	83,45	0,240	0,10	0,45	
27	LwK 2.5	80,30	-2,910	-1,20	-5,44	(***)
28	LwK 2.4	82,50	-0,710	-0,29	-1,33	
29	LwK 2.1	83,11	-0,100	-0,04	-0,19	
31	LwK 2.9	83,60	0,390	0,16	0,73	
38	LwK 2.9	83,80	0,590	0,24	1,10	
40	LwK 2.4	83,50	0,290	0,12	0,54	
41	LwK 2.9	83,60	0,390	0,16	0,73	
42	LwK 2.9	83,30	0,090	0,04	0,17	
43	LwK 2.9	83,70	0,490	0,20	0,92	
44	LwK 2.1	83,00	-0,210	-0,09	-0,39	
45	LwK 2.9	84,30	1,090	0,45	2,04	
46	LwK 2.5	82,80	-0,410	-0,17	-0,77	
47	LwK 2.1	84,10	0,890	0,37	1,66	
48	LwK 2.4	83,00	-0,210	-0,09	-0,39	
50	LwK 2.9	84,00	0,790	0,33	1,48	
52	LwK 2.9	84,10	0,890	0,37	1,66	
53	LwK 2.9	84,21	1,000	0,41	1,87	
55	LwK 2.1	82,82	-0,390	-0,16	-0,73	
56	LwK 2.9	83,50	0,290	0,12	0,54	
58	LwK 2.9	84,00	0,790	0,33	1,48	
60	LwK 2.1	83,58	0,370	0,15	0,69	
61	LwK 2.9	83,80	0,590	0,24	1,10	
62	LwK 2.1	81,30	-1,910	-0,79	-3,57	
64	LwK 2.1	83,06	-0,150	-0,06	-0,28	
65	LwK 2.5	83,95	0,740	0,31	1,38	
66	LwK 2.5	85,85	2,640	1,09	4,93	
68	LwK 2.1	84,50	1,290	0,53	2,41	
70	LwK 2.9	84,79	1,580	0,65	2,95	
74	LwK 2.1	83,34	0,134	0,06	0,25	
75	LwK 2.9	85,70	2,490	1,03	4,65	
78	LwK 2.4	81,32	-1,890	-0,78	-3,53	
82	LwK 2.1	81,80	-1,410	-0,58	-2,64	
83	LwK 2.2	85,80	2,590	1,07	4,84	
86	LwK 2.9	84,30	1,090	0,45	2,04	
87	LwK 2.9	83,74	0,528	0,22	0,99	
92	LwK 2.4	83,22	0,010	0,00	0,02	
97	LwK 2.1	83,20	-0,010	-0,00	-0,02	
99	LwK 2.9	83,68	0,470	0,19	0,88	
101	LwK 2.9	83,70	0,490	0,20	0,92	

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

Der rot markierte Wert wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.



**Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
102	LwK 2.9	83,80	0,590	0,24	1,10	
103	LwK 2.4	82,96	-0,250	-0,10	-0,47	
106	LwK 2.5	83,47	0,260	0,11	0,49	
107	LwK 2.4	83,45	0,240	0,10	0,45	
108	LwK 2.9	84,10	0,890	0,37	1,66	
111	NMR	80,69	-2,523	-1,04	-4,72	
112	NMR	77,17	-6,039	-2,50	-11,29	(***)
113	NMR	81,31	-1,901	-0,79	-3,55	
114	NMR	76,60	-6,611	-2,73	-12,36	(***)
116	NMR	80,69	-2,525	-1,04	-4,72	

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

**6.2.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	83,01	-0,200	-0,08	-0,23	
202	LwK 2.8	84,84	1,630	0,67	1,84	
203	LwK 2.8	83,50	0,290	0,12	0,33	
204	LwK 2.8	85,00	1,791	0,74	2,02	
205	LwK 2.8	84,41	1,200	0,50	1,35	
206	LwK 2.8	84,02	0,810	0,33	0,91	
207	LwK 2.8	79,50	-3,710	-1,53	-4,19	
208	LwK 2.8	82,31	-0,900	-0,37	-1,02	
210	LwK 2.8	82,60	-0,610	-0,25	-0,69	
211	LwK 2.8	83,20	-0,010	-0,00	-0,01	
212	LwK 2.8	84,15	0,940	0,39	1,06	
214	LwK 2.8	84,40	1,190	0,49	1,34	
215	LwK 2.8	81,20	-2,010	-0,83	-2,27	
216	LwK 2.8	84,65	1,440	0,60	1,63	
217	LwK 2.8	84,40	1,190	0,49	1,34	
218	LwK 2.8	84,00	0,790	0,33	0,89	
219	LwK 2.8	83,70	0,490	0,20	0,55	
220	LwK 2.8	83,90	0,690	0,29	0,78	
221	LwK 2.8	82,30	-0,910	-0,38	-1,03	
222	LwK 2.8	83,80	0,590	0,24	0,67	
223	LwK 2.8	82,60	-0,610	-0,25	-0,69	
224	LwK 2.8	83,88	0,670	0,28	0,76	
225	LwK 2.8	84,77	1,560	0,64	1,76	
226	LwK 2.8	84,10	0,890	0,37	1,00	
227	LwK 2.8	83,08	-0,130	-0,05	-0,15	
228	LwK 2.8	82,00	-1,210	-0,50	-1,37	
229	LwK 2.8	82,91	-0,300	-0,12	-0,34	
231	LwK 2.8	82,70	-0,510	-0,21	-0,58	
232	LwK 2.8	82,90	-0,310	-0,13	-0,35	
234	LwK 2.8	84,70	1,490	0,62	1,68	
235	LwK 2.8	83,00	-0,210	-0,09	-0,24	
236	LwK 2.8	83,40	0,190	0,08	0,21	
237	LwK 2.8	82,07	-1,140	-0,47	-1,29	
240	LwK 2.8	84,50	1,290	0,53	1,46	
241	LwK 2.8	83,40	0,190	0,08	0,21	
242	LwK 2.8	83,23	0,020	0,01	0,02	
243	LwK 2.8	83,50	0,290	0,12	0,33	
244	LwK 2.8	84,02	0,810	0,33	0,91	
245	LwK 2.8	85,20	1,990	0,82	2,25	
246	LwK 2.8	83,50	0,290	0,12	0,33	
247	LwK 2.8	82,99	-0,220	-0,09	-0,25	
248	LwK 2.8	82,88	-0,330	-0,14	-0,37	
249	LwK 2.8	80,70	-2,510	-1,04	-2,83	
250	LwK 2.8	83,47	0,260	0,11	0,29	
251	LwK 2.8	83,90	0,690	0,29	0,78	
252	LwK 2.8	84,40	1,190	0,49	1,34	
254	LwK 2.8	82,80	-0,410	-0,17	-0,46	
255	LwK 2.8	83,40	0,190	0,08	0,21	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
256	LwK 2.8	82,10	-1,110	-0,46	-1,25	
257	LwK 2.8	83,30	0,090	0,04	0,10	
258	LwK 2.8	84,30	1,090	0,45	1,23	
259	LwK 2.8	84,95	1,740	0,72	1,96	
260	LwK 2.8	82,80	-0,410	-0,17	-0,46	
261	LwK 2.8	84,20	0,990	0,41	1,12	
262	LwK 2.8	82,30	-0,910	-0,38	-1,03	
263	LwK 2.8	85,80	2,590	1,07	2,92	
264	LwK 2.8	87,00	3,790	1,57	4,28	
265	LwK 2.8	84,00	0,790	0,33	0,89	
266	LwK 2.8	85,85	2,640	1,09	2,98	
267	LwK 2.8	83,20	-0,010	-0,00	-0,01	
268	LwK 2.8	85,55	2,340	0,97	2,64	
269	LwK 2.8	83,10	-0,110	-0,05	-0,12	
270	LwK 2.8	81,53	-1,680	-0,69	-1,90	
271	LwK 2.8	82,86	-0,350	-0,14	-0,40	
272	LwK 2.8	81,80	-1,410	-0,58	-1,59	
273	LwK 2.8	82,98	-0,230	-0,10	-0,26	
275	LwK 2.8	84,10	0,890	0,37	1,00	
276	LwK 2.8	81,40	-1,810	-0,75	-2,04	
277	LwK 2.8	82,16	-1,050	-0,43	-1,19	
278	LwK 2.8	83,21	-0,000	-0,00	-0,00	
279	LwK 2.8	81,60	-1,610	-0,67	-1,82	
280	LwK 2.8	83,60	0,390	0,16	0,44	
281	LwK 2.8	84,84	1,633	0,68	1,84	
282	LwK 2.8	84,20	0,990	0,41	1,12	
283	LwK 2.8	83,72	0,510	0,21	0,58	
284	LwK 2.8	84,80	1,590	0,66	1,79	
285	LwK 2.8	84,90	1,690	0,70	1,91	
287	LwK 2.8	83,24	0,030	0,01	0,03	
288	LwK 2.8	83,46	0,250	0,10	0,28	
311	LwK 2.8	83,50	0,290	0,12	0,33	
320	LwK 2.8	82,40	-0,810	-0,33	-0,91	
337	LwK 2.8	81,99	-1,220	-0,50	-1,38	
365	LwK 2.8	84,30	1,090	0,45	1,23	

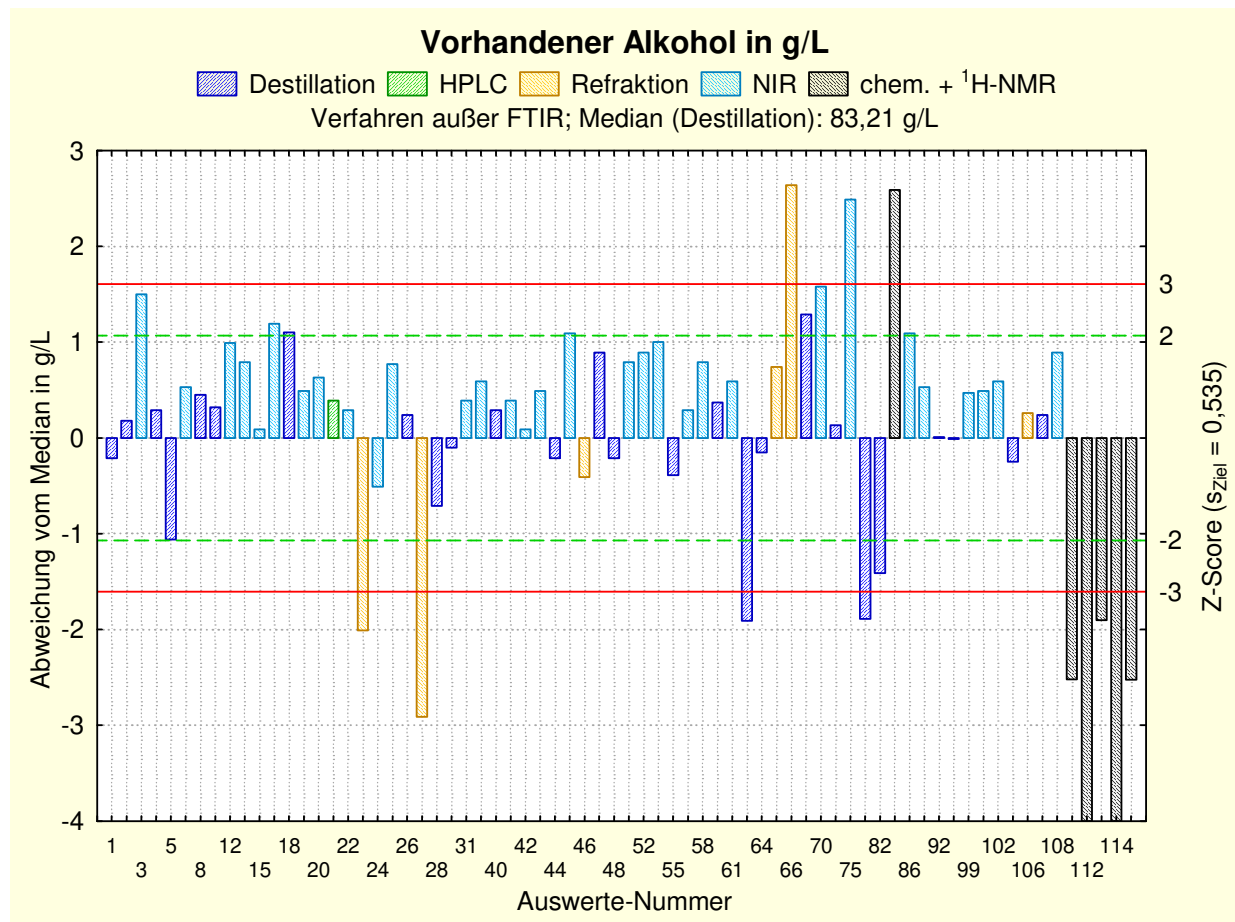
Rot markierte Werte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.

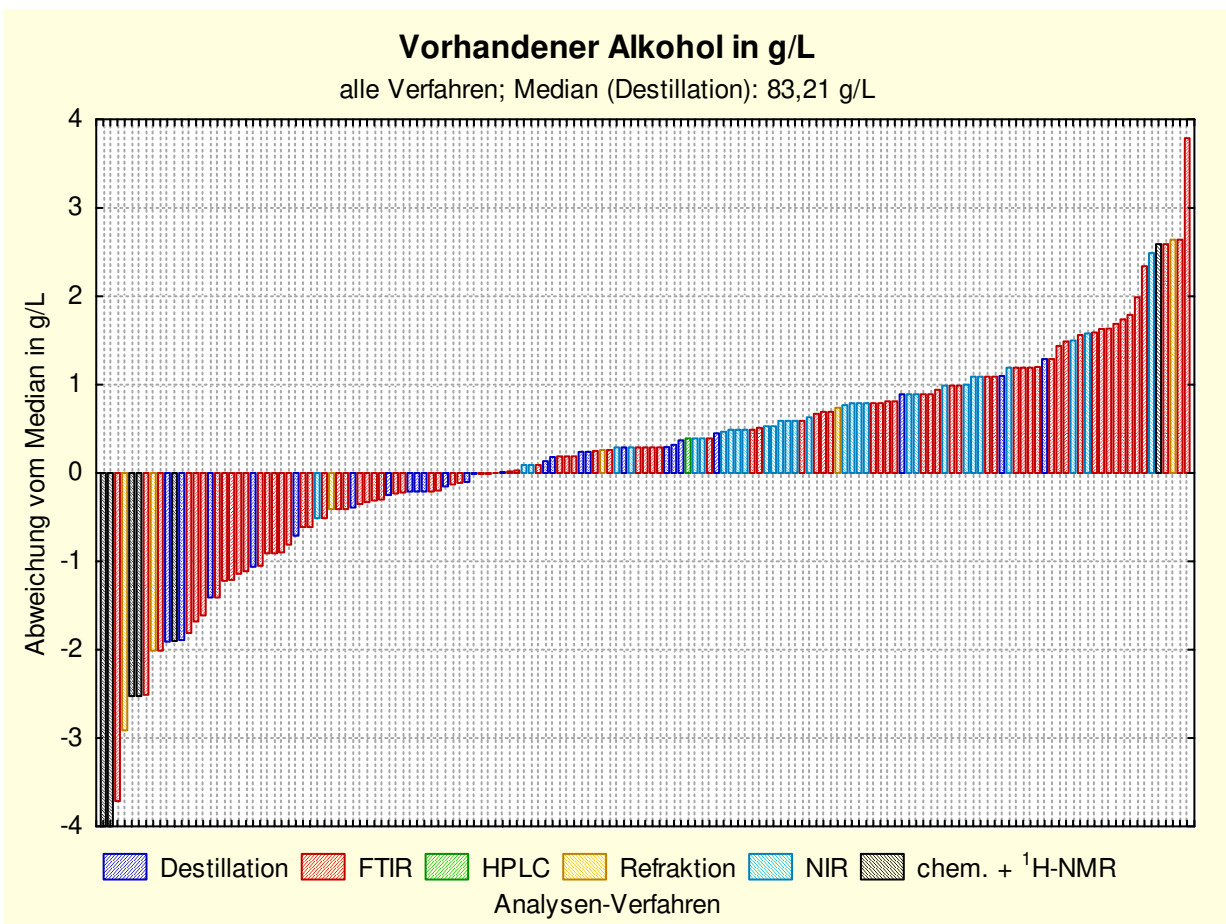
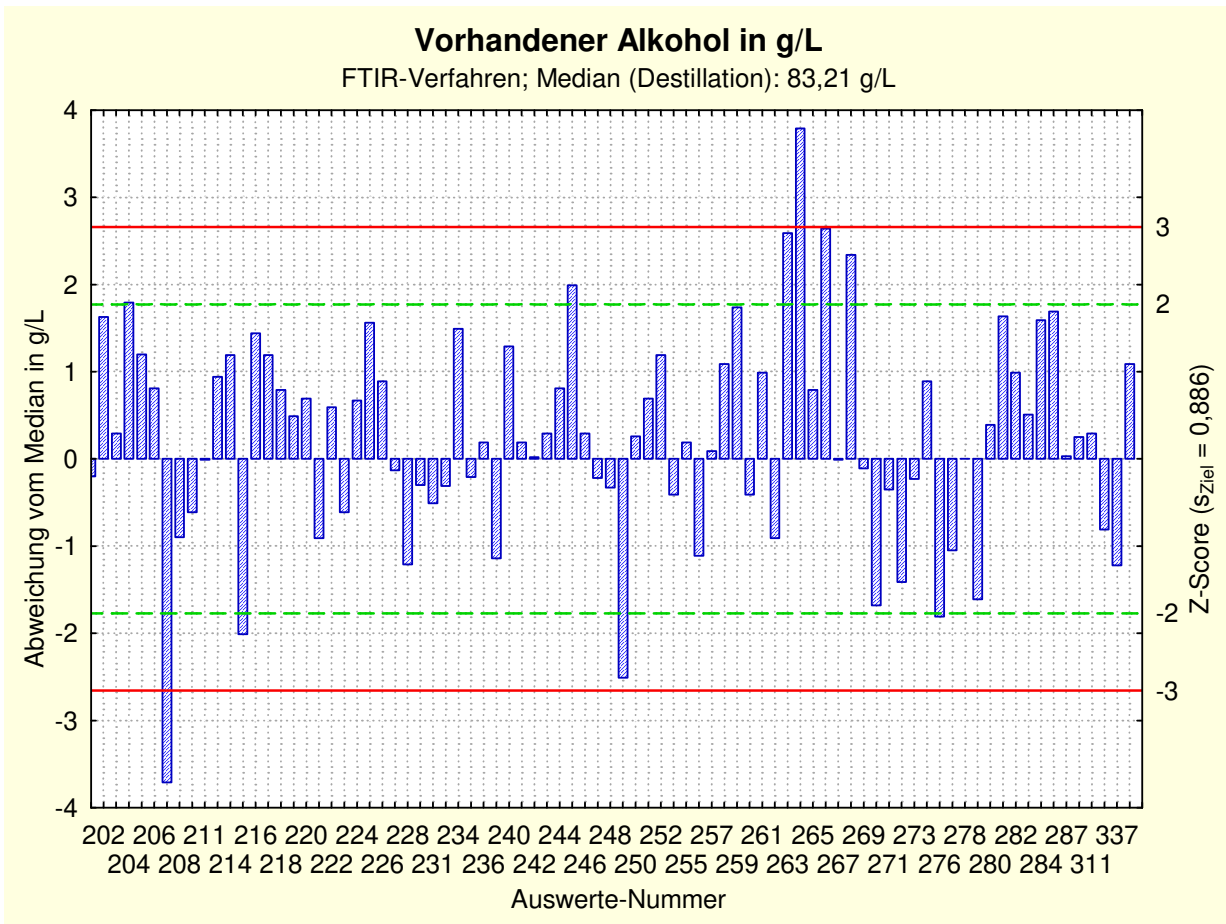
**6.2.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	26
Minimalwert	81,30
Mittelwert	83,106
Median	83,210
Maximalwert	84,50
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,784
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,154
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	2,420
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,886
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,32
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,47
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,89
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,06
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,17

**6.2.4 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	15	83,282	0,739
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	11	83,052	0,604
	Destillationsverfahren	26	83,175	0,641
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	85,800	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	82,928	2,256
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	1	83,600	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	83,485	1,139
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	31	83,886	0,391
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	79,507	2,210





### 6.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.3	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
02	LwK 3.3	50,8	0,00	0,00	0,00	
03	LwK 3.3	51,4	0,60	0,38	1,01	
05	LwK 3.3	50,2	-0,64	-0,40	-1,08	
06	LwK 3.3	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
08	LwK 3.1	50,3	-0,50	-0,31	-0,84	
09	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
12	LwK 3.3	50,8	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 3.3	51,5	0,70	0,44	1,18	
15	LwK 3.3	51,0	0,20	0,13	0,34	
17	LwK 3.3	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
18	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
19	LwK 3.3	51,9	1,10	0,69	1,85	
20	LwK 3.3	51,2	0,40	0,25	0,67	
21	LwK 3.3	30,0	-20,80	-13,07	-35,02	(**)
22	LwK 3.3	51,1	0,30	0,19	0,51	
23	LwK 3.3	49,7	-1,10	-0,69	-1,85	
24	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
25	LwK 3.3	50,8	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 3.3	50,3	-0,53	-0,33	-0,90	
27	LwK 3.3	49,8	-1,00	-0,63	-1,68	
28	LwK 3.1	50,0	-0,80	-0,50	-1,35	
29	LwK 3.2	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
31	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
38	LwK 3.3	38,3	-12,50	-7,86	-21,04	(**)
39	LwK 3.3	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
40	LwK 3.3	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
41	LwK 3.3	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
42	LwK 3.3	50,8	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 3.3	51,0	0,20	0,13	0,34	
44	LwK 3.3	50,3	-0,50	-0,31	-0,84	
45	LwK 3.3	50,3	-0,50	-0,31	-0,84	
47	LwK 3.3	51,0	0,20	0,13	0,34	
48	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
50	LwK 3.3	51,3	0,50	0,31	0,84	
52	LwK 3.3	51,0	0,20	0,13	0,34	
53	LwK 3.3	51,7	0,90	0,57	1,52	
55	LwK 3.3	50,5	-0,30	-0,19	-0,51	
56	LwK 3.3	50,5	-0,30	-0,19	-0,51	
58	LwK 3.3	50,8	0,00	0,00	0,00	
60	LwK 3.2	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
61	LwK 3.3	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
62	LwK 3.2	23,8	-27,00	-16,97	-45,45	(*)
64	LwK 3.2	50,1	-0,70	-0,44	-1,18	
68	LwK 3.2	51,7	0,90	0,57	1,52	
75	LwK 3.3	50,9	0,10	0,06	0,17	
82	LwK 3.2	50,8	0,00	0,00	0,00	
83	LwK 3.3	52,2	1,40	0,88	2,36	
86	LwK 3.3	51,0	0,20	0,13	0,34	
108	LwK 3.3	52,0	1,20	0,75	2,02	

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

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

**6.3.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	49,3	-1,50	-0,94	-2,53	
202	FTIR (gemessen)	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
203	FTIR (gemessen)	51,1	0,30	0,19	0,51	
205	FTIR (gemessen)	48,7	-2,14	-1,35	-3,60	
208	FTIR (gemessen)	42,7	-8,10	-5,09	-13,64	(***)
210	FTIR (gemessen)	50,8	0,00	0,00	0,00	
214	k. A.	50,9	0,10	0,06	0,17	
215	FTIR (gemessen)	48,9	-1,90	-1,19	-3,20	
216	FTIR (gemessen)	50,2	-0,59	-0,37	-0,99	
217	FTIR (gemessen)	49,8	-1,00	-0,63	-1,68	
218	FTIR (gemessen)	50,5	-0,34	-0,21	-0,57	
220	FTIR (gemessen)	49,6	-1,20	-0,75	-2,02	
221	FTIR (gemessen)	52,9	2,10	1,32	3,54	
223	LwK 3.3 (herk.)	49,5	-1,30	-0,82	-2,19	
227	FTIR (gemessen)	50,3	-0,52	-0,33	-0,88	
229	FTIR (gemessen)	50,7	-0,11	-0,07	-0,19	
232	k. A.	49,9	-0,88	-0,55	-1,48	
236	LwK 3.3 (herk.)	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
237	FTIR (gemessen)	50,1	-0,69	-0,43	-1,16	
240	FTIR (gemessen)	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
244	FTIR (gemessen)	50,7	-0,12	-0,08	-0,20	
247	FTIR (gemessen)	50,1	-0,73	-0,46	-1,23	
251	FTIR (gemessen)	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
252	dens/FTIR	51,7	0,90	0,57	1,52	
254	FTIR (gemessen)	50,7	-0,10	-0,06	-0,17	
255	FTIR (gemessen)	51,2	0,40	0,25	0,67	
258	LwK 3.3 (herk.)	50,9	0,10	0,06	0,17	
259	LwK 3.3 (herk.)	47,6	-3,20	-2,01	-5,39	(***)
260	FTIR-Basis	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
262	FTIR (gemessen)	50,3	-0,50	-0,31	-0,84	
263	FTIR (gemessen)	50,6	-0,20	-0,13	-0,34	
264	FTIR (gemessen)	49,7	-1,10	-0,69	-1,85	
265	FTIR (gemessen)	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
268	FTIR (gemessen)	50,1	-0,71	-0,45	-1,20	
269	FTIR (gemessen)	51,1	0,30	0,19	0,51	
270	FTIR (gemessen)	47,0	-3,80	-2,39	-6,40	(***)
271	FTIR (gemessen)	48,4	-2,44	-1,53	-4,11	
272	FTIR (gemessen)	49,6	-1,20	-0,75	-2,02	
273	k. A.	49,9	-0,90	-0,57	-1,52	
275	FTIR (gemessen)	50,9	0,10	0,06	0,17	
279	FTIR (gemessen)	49,7	-1,10	-0,69	-1,85	
280	k. A.	51,0	0,20	0,13	0,34	
282	FTIR (gemessen)	49,7	-1,10	-0,69	-1,85	
283	FTIR (gemessen)	46,9	-3,90	-2,45	-6,57	(***)
284	FTIR (gemessen)	50,4	-0,40	-0,25	-0,67	
285	FTIR (gemessen)	51,1	0,30	0,19	0,51	
287	FTIR (gemessen)	51,0	0,20	0,13	0,34	
288	k. A.	54,3	3,50	2,20	5,89	(***)
320	FTIR (gemessen)	49,5	-1,30	-0,82	-2,19	
337	FTIR (gemessen)	50,2	-0,56	-0,35	-0,94	
338	FTIR (gemessen)	27,1	0,96	1,06	1,62	

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

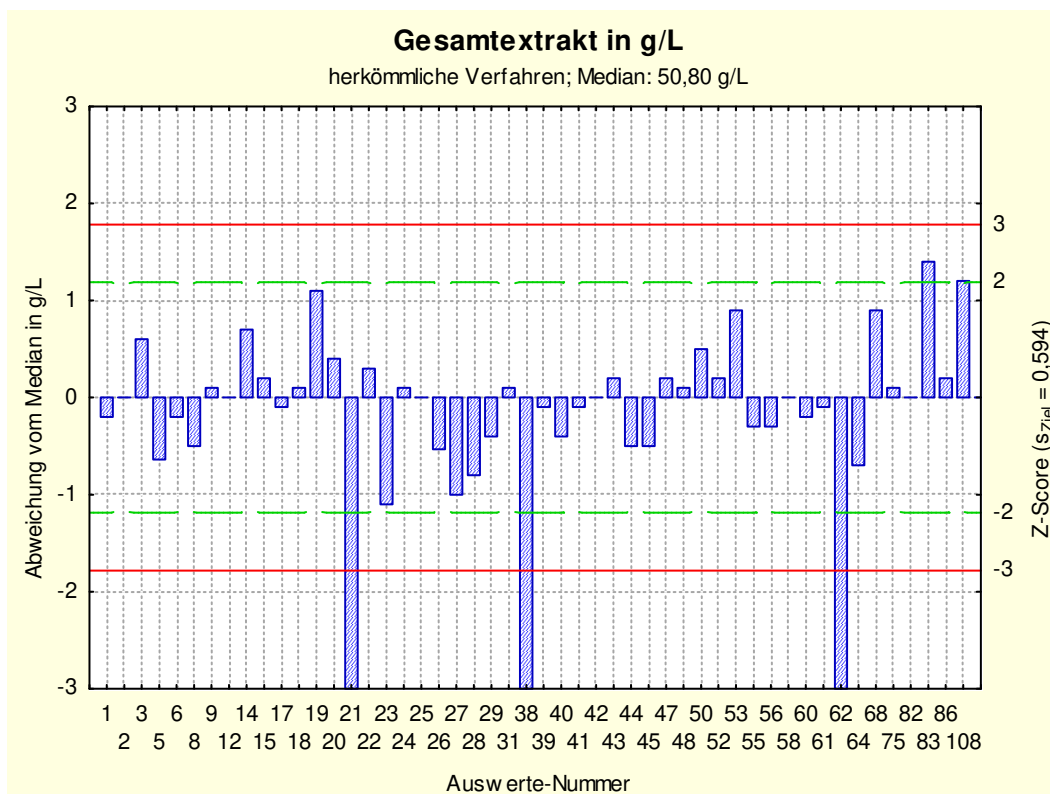
### 6.3.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	49	47
Minimalwert	30,0	49,7
Mittelwert	50,14	50,82
Median	50,80	50,80
Maximalwert	52,2	52,2
Standardabweichung ( $s_L$ )	3,478	0,537
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,497	0,078
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,591	1,591
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,19	0,34
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	5,86	0,90
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(6,16)	(0,95)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,31	0,05
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,84	0,13
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,88)	(0,14)

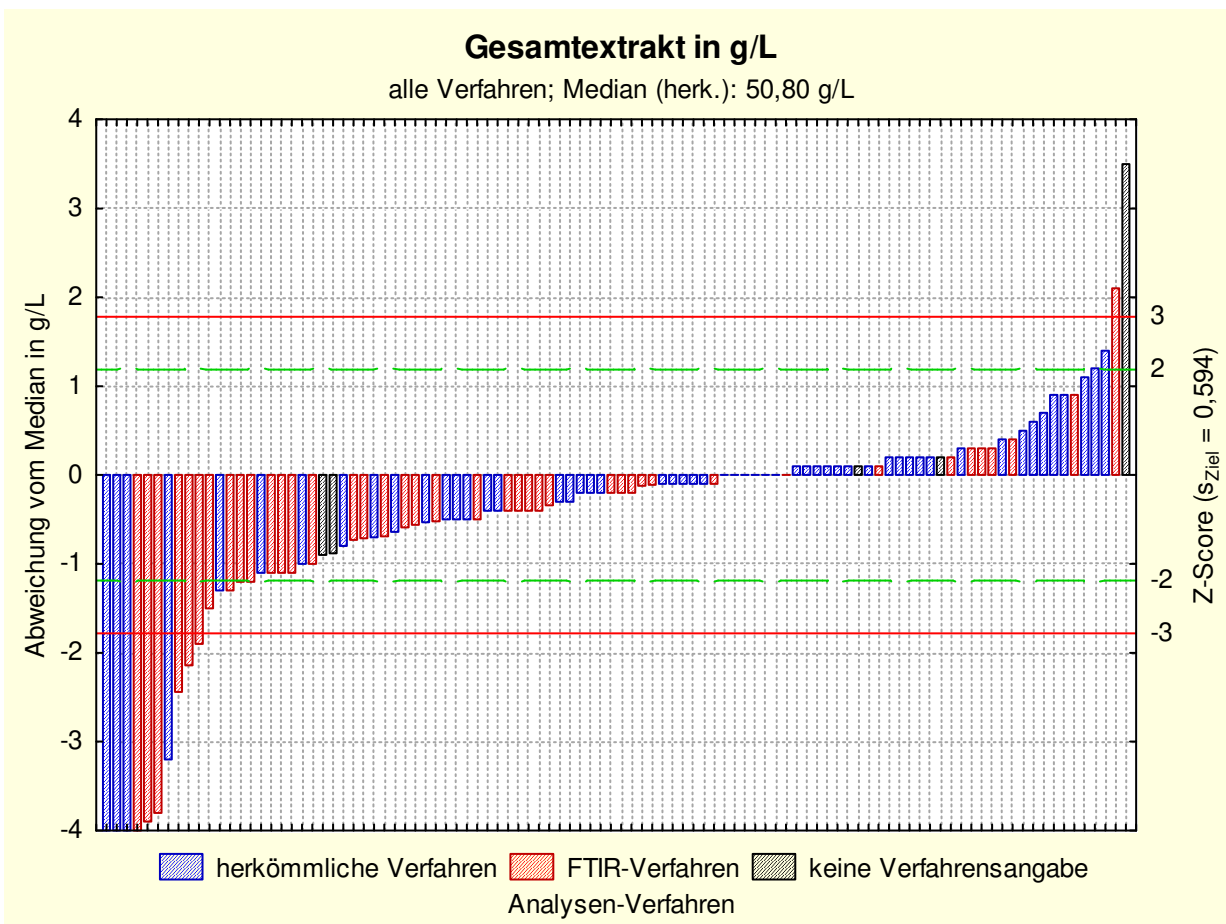
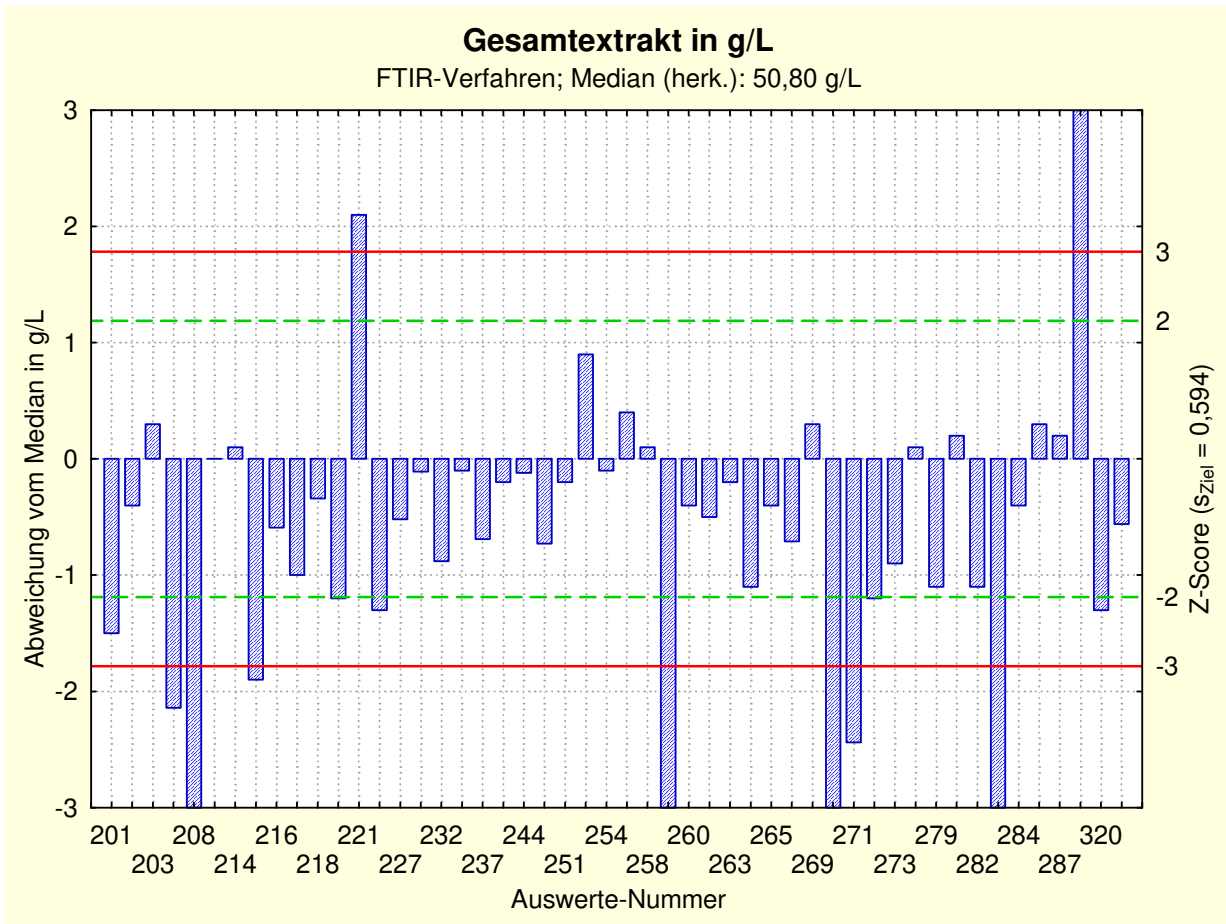
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.

### 6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	50,150	0,241
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	6	50,388	1,104
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	42	50,805	0,469
		50	50,739	0,541
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	39	50,145	0,843
dens/FTIR	Berechnung nach Tabarie auf der Basis densitometr. Dichte + FTIR-Alkohol	1	51,700	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	1	50,400	1
k. A.	Keine Verfahrensangabe	5	51,137	1,887









## 6.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 4.5	21,48	0,300	0,40	0,49	
02	LwK 4.5	20,55	-0,630	-0,83	-1,02	
05	LwK 4.5	21,94	0,760	1,00	1,24	
06	LwK 4.5	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
08	LwK 4.5	20,90	-0,280	-0,37	-0,46	
09	LwK 4.7	21,52	0,340	0,45	0,55	
12	LwK 4.5	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
14	LwK 4.5	21,30	0,120	0,16	0,20	
15	LwK 4.5	21,30	0,120	0,16	0,20	
18	LwK 4.5	21,20	0,020	0,03	0,03	
19	LwK 4.4	21,60	0,420	0,56	0,68	
20	LwK 4.7	21,29	0,110	0,15	0,18	
21	LwK 4.7	21,06	-0,120	-0,16	-0,20	
22	LwK 4.7	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
23	LwK 4.4	20,40	-0,780	-1,03	-1,27	
24	LwK 4.4	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
25	LwK 4.5	21,55	0,365	0,48	0,59	
26	LwK 4.7	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
27	LwK 4.4	21,25	0,070	0,09	0,11	
28	LwK 4.4	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
29	LwK 4.5	21,47	0,290	0,38	0,47	
31	LwK 4.5	21,30	0,120	0,16	0,20	
38	LwK 4.5	21,24	0,060	0,08	0,10	
39	LwK 4.7	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
40	LwK 4.5	21,43	0,248	0,33	0,40	
41	LwK 4.5	21,03	-0,150	-0,20	-0,24	
42	LwK 4.5	21,16	-0,020	-0,03	-0,03	
43	LwK 4.4	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
44	LwK 4.5	21,40	0,220	0,29	0,36	
45	LwK 4.5	19,30	-1,880	-2,48	-3,06	
47	LwK 4.5	20,69	-0,490	-0,65	-0,80	
48	LwK 4.5	21,29	0,110	0,15	0,18	
50	LwK 4.5	21,65	0,470	0,62	0,76	
52	LwK 4.5	21,96	0,780	1,03	1,27	
53	LwK 4.5	21,20	0,020	0,03	0,03	
55	LwK 4.5	20,81	-0,370	-0,49	-0,60	
56	LwK 4.5	21,03	-0,150	-0,20	-0,24	
58	LwK 4.4	21,60	0,420	0,56	0,68	
60	LwK 4.4	21,70	0,520	0,69	0,85	
61	LwK 4.5	20,40	-0,780	-1,03	-1,27	
62	LwK 4.4	21,80	0,620	0,82	1,01	
64	LwK 4.5	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
65	LwK 4.4	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
68	LwK 4.4	19,60	-1,580	-2,09	-2,57	
70	LwK 4.5	20,88	-0,300	-0,40	-0,49	
74	LwK 4.4	23,10	1,920	2,54	3,12	
75	LwK 4.4	21,40	0,220	0,29	0,36	
78	LwK 4.4	22,40	1,220	1,61	1,98	
80	LwK 4.4	21,20	0,020	0,03	0,03	
82	LwK 4.5	21,51	0,330	0,44	0,54	
83	LwK 4.3	21,56	0,380	0,50	0,62	
86	LwK 4.4	23,50	2,320	3,07	3,77	
97	LwK 4.7	21,05	-0,130	-0,17	-0,21	
106	LwK 4.4	21,20	0,020	0,03	0,03	
108	LwK 4.4	21,50	0,320	0,42	0,52	
111	NMR	20,83	-0,352	-0,47	-0,57	
112	NMR	21,52	0,341	0,45	0,56	
113	NMR	22,36	1,180	1,56	1,92	
114	NMR	22,10	0,924	1,22	1,50	
115	NMR	20,74	-0,440	-0,58	-0,72	
116	NMR	22,03	0,854	1,13	1,39	

**6.4.2 FTIR-Laboregebnisse ( wie mitgeteilt)**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	21,40	0,220	0,29	0,36	
205	LwK 4.8	19,92	-1,260	-1,67	-2,05	
206	LwK 4.8	20,87	-0,310	-0,41	-0,50	
207	LwK 4.8	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
208	LwK 4.8	20,50	-0,680	-0,90	-1,11	
210	LwK 4.8	18,90	-2,280	-3,01	-3,71	
211	LwK 4.8	21,49	0,310	0,41	0,50	
212	LwK 4.8	21,39	0,210	0,28	0,34	
214	LwK 4.8	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
215	LwK 4.8	19,50	-1,680	-2,22	-2,73	
216	LwK 4.8	19,99	-1,190	-1,57	-1,94	
217	LwK 4.8	18,99	-2,190	-2,89	-3,56	
219	LwK 4.8	22,20	1,020	1,35	1,66	
220	LwK 4.8	22,50	1,320	1,74	2,15	
222	LwK 4.8	20,00	-1,180	-1,56	-1,92	
223	LwK 4.8	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
224	LwK 4.8	20,41	-0,770	-1,02	-1,25	
225	LwK 4.8	21,39	0,210	0,28	0,34	
226	LwK 4.8	19,80	-1,380	-1,82	-2,24	
227	LwK 4.8	21,79	0,610	0,81	0,99	
228	LwK 4.8	20,85	-0,330	-0,44	-0,54	
229	LwK 4.8	20,93	-0,250	-0,33	-0,41	
231	LwK 4.8	23,10	1,920	2,54	3,12	
232	LwK 4.8	19,23	-1,950	-2,58	-3,17	
234	LwK 4.8	22,18	1,000	1,32	1,63	
235	LwK 4.8	16,60	-4,580	-6,05	-7,45	(***)
236	LwK 4.8	20,60	-0,580	-0,77	-0,94	
237	LwK 4.8	21,11	-0,070	-0,09	-0,11	
240	LwK 4.8	21,88	0,700	0,93	1,14	
241	LwK 4.8	17,40	-3,780	-5,00	-6,15	(***)
242	LwK 4.8	21,41	0,230	0,30	0,37	
243	LwK 4.8	20,60	-0,580	-0,77	-0,94	
244	LwK 4.8	20,90	-0,280	-0,37	-0,46	
245	LwK 4.8	21,39	0,210	0,28	0,34	
246	LwK 4.8	20,10	-1,080	-1,43	-1,76	
247	LwK 4.8	20,35	-0,830	-1,10	-1,35	
248	LwK 4.8	20,91	-0,270	-0,36	-0,44	
249	LwK 4.8	21,40	0,220	0,29	0,36	
250	LwK 4.8	21,23	0,050	0,07	0,08	
251	LwK 4.8	19,18	-2,000	-2,64	-3,25	
252	LwK 4.8	22,38	1,200	1,59	1,95	
254	LwK 4.8	22,30	1,120	1,48	1,82	
255	LwK 4.8	21,20	0,020	0,03	0,03	
256	LwK 4.8	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
257	LwK 4.8	22,00	0,820	1,08	1,33	
258	LwK 4.8	20,52	-0,660	-0,87	-1,07	
259	LwK 4.8	23,90	2,720	3,59	4,42	
260	LwK 4.8	20,40	-0,780	-1,03	-1,27	
261	LwK 4.8	20,30	-0,880	-1,16	-1,43	
262	LwK 4.8	22,20	1,020	1,35	1,66	
263	LwK 4.8	20,16	-1,020	-1,35	-1,66	
264	LwK 4.8	19,50	-1,680	-2,22	-2,73	
265	LwK 4.8	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
266	LwK 4.8	21,54	0,360	0,48	0,59	
267	LwK 4.8	18,70	-2,480	-3,28	-4,03	
268	LwK 4.8	20,93	-0,250	-0,33	-0,41	
269	LwK 4.8	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
270	LwK 4.8	19,96	-1,220	-1,61	-1,98	
271	LwK 4.8	19,81	-1,370	-1,81	-2,23	
272	LwK 4.8	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
273	LwK 4.8	21,06	-0,120	-0,16	-0,20	
275	LwK 4.8	21,70	0,520	0,69	0,85	
276	LwK 4.8	21,20	0,020	0,03	0,03	
277	LwK 4.8	20,64	-0,540	-0,71	-0,88	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
279	LwK 4.8	20,50	-0,680	-0,90	-1,11	
280	LwK 4.8	19,92	-1,260	-1,67	-2,05	
281	LwK 4.8	20,40	-0,780	-1,03	-1,27	
282	LwK 4.8	21,80	0,620	0,82	1,01	
283	LwK 4.8	19,80	-1,380	-1,82	-2,24	
284	LwK 4.8	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
285	LwK 4.8	20,98	-0,200	-0,26	-0,33	
320	LwK 4.8	20,50	-0,680	-0,90	-1,11	
337	LwK 4.8	21,11	-0,070	-0,09	-0,11	
365	LwK 4.8	21,40	0,220	0,29	0,36	

**6.4.3 FTIR-Laboregebnisse (nachberechnet)****(Summe aus FTIR-Glucose und FTIR-Fructose, vom Auswerter berechnet)**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	20,98	-0,200	-0,26	-0,33	
202	LwK 4.8	21,37	0,190	0,25	0,31	
203	LwK 4.8	21,55	0,370	0,49	0,60	
204	LwK 4.8	21,34	0,160	0,21	0,26	
205	LwK 4.8	19,92	-1,260	-1,67	-2,05	
207	LwK 4.8	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
208	LwK 4.8	20,55	-0,630	-0,83	-1,02	
210	LwK 4.8	21,20	0,020	0,03	0,03	
211	LwK 4.8	20,91	-0,270	-0,36	-0,44	
212	LwK 4.8	21,96	0,780	1,03	1,27	
214	LwK 4.8	20,40	-0,780	-1,03	-1,27	
215	LwK 4.8	19,80	-1,380	-1,82	-2,24	
216	LwK 4.8	18,13	-3,050	-4,03	-4,96	
217	LwK 4.8	19,18	-2,000	-2,64	-3,25	
218	LwK 4.8	20,48	-0,700	-0,93	-1,14	
219	LwK 4.8	20,30	-0,880	-1,16	-1,43	
220	LwK 4.8	20,31	-0,870	-1,15	-1,42	
221	LwK 4.8	23,33	2,150	2,84	3,50	
222	LwK 4.8	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
223	LwK 4.8	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
224	LwK 4.8	21,59	0,410	0,54	0,67	
225	LwK 4.8	21,39	0,210	0,28	0,34	
226	LwK 4.8	21,50	0,320	0,42	0,52	
227	LwK 4.8	20,36	-0,820	-1,08	-1,33	
228	LwK 4.8	20,63	-0,550	-0,73	-0,89	
229	LwK 4.8	20,08	-1,100	-1,45	-1,79	
231	LwK 4.8	20,60	-0,580	-0,77	-0,94	
232	LwK 4.8	19,23	-1,950	-2,58	-3,17	
234	LwK 4.8	20,66	-0,520	-0,69	-0,85	
235	LwK 4.8	16,60	-4,580	-6,05	-7,45	(***)
236	LwK 4.8	21,00	-0,180	-0,24	-0,29	
237	LwK 4.8	20,93	-0,250	-0,33	-0,41	
240	LwK 4.8	20,48	-0,700	-0,93	-1,14	
241	LwK 4.8	19,72	-1,460	-1,93	-2,37	
242	LwK 4.8	20,30	-0,880	-1,16	-1,43	
243	LwK 4.8	20,94	-0,240	-0,32	-0,39	
244	LwK 4.8	20,77	-0,410	-0,54	-0,67	
245	LwK 4.8	19,01	-2,170	-2,87	-3,53	
246	LwK 4.8	20,10	-1,080	-1,43	-1,76	
247	LwK 4.8	20,44	-0,740	-0,98	-1,20	
249	LwK 4.8	21,40	0,220	0,29	0,36	
250	LwK 4.8	20,97	-0,210	-0,28	-0,34	
251	LwK 4.8	19,18	-2,000	-2,64	-3,25	
252	LwK 4.8	22,38	1,200	1,59	1,95	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
254	LwK 4.8	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
256	LwK 4.8	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
257	LwK 4.8	20,91	-0,270	-0,36	-0,44	
258	LwK 4.8	21,09	-0,090	-0,12	-0,15	
259	LwK 4.8	23,20	2,020	2,67	3,29	
260	LwK 4.8	19,80	-1,380	-1,82	-2,24	
261	LwK 4.8	22,50	1,320	1,74	2,15	
262	LwK 4.8	20,80	-0,380	-0,50	-0,62	
263	LwK 4.8	20,84	-0,340	-0,45	-0,55	
264	LwK 4.8	19,50	-1,680	-2,22	-2,73	
265	LwK 4.8	20,90	-0,280	-0,37	-0,46	
266	LwK 4.8	21,54	0,360	0,48	0,59	
267	LwK 4.8	21,10	-0,080	-0,11	-0,13	
268	LwK 4.8	20,65	-0,530	-0,70	-0,86	
269	LwK 4.8	20,90	-0,280	-0,37	-0,46	
271	LwK 4.8	20,21	-0,970	-1,28	-1,58	
272	LwK 4.8	22,98	1,800	2,38	2,93	
273	LwK 4.8	21,45	0,270	0,36	0,44	
275	LwK 4.8	20,56	-0,620	-0,82	-1,01	
276	LwK 4.8	19,40	-1,780	-2,35	-2,90	
277	LwK 4.8	20,64	-0,540	-0,71	-0,88	
278	LwK 4.8	21,09	-0,090	-0,12	-0,15	
279	LwK 4.8	21,40	0,220	0,29	0,36	
280	LwK 4.8	20,36	-0,820	-1,08	-1,33	
281	LwK 4.8	24,87	3,690	4,88	6,00	(***)
282	LwK 4.8	21,80	0,620	0,82	1,01	
284	LwK 4.8	20,70	-0,480	-0,63	-0,78	
285	LwK 4.8	23,12	1,940	2,56	3,16	
287	LwK 4.8	24,08	2,900	3,83	4,72	
288	LwK 4.8	24,93	3,750	4,96	6,10	(***)
311	LwK 4.8	19,61	-1,570	-2,07	-2,55	
320	LwK 4.8	21,23	0,050	0,07	0,08	
337	LwK 4.8	21,98	0,800	1,06	1,30	
365	LwK 4.8	20,50	-0,680	-0,90	-1,11	

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

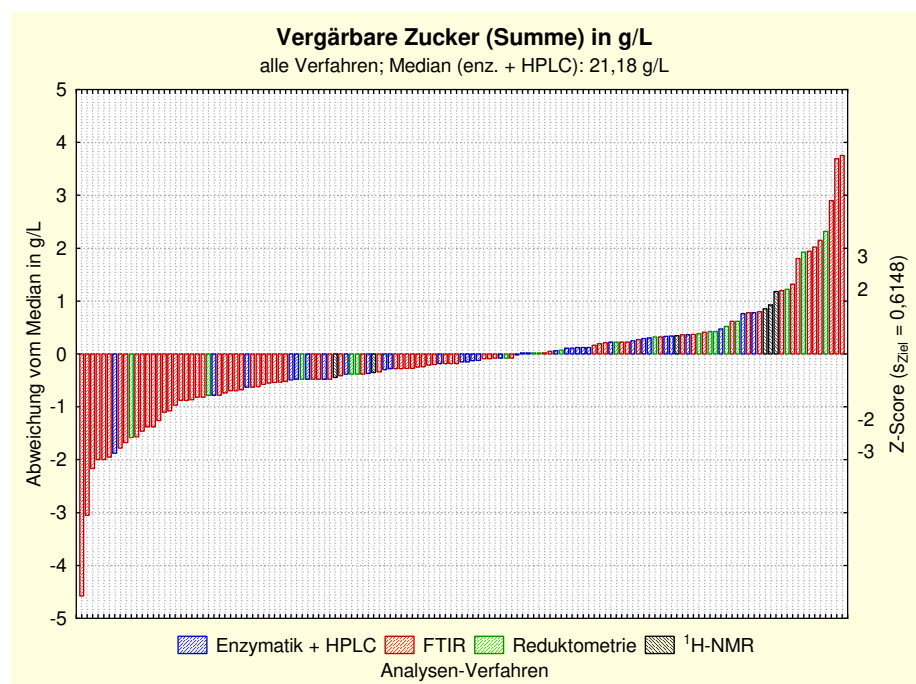
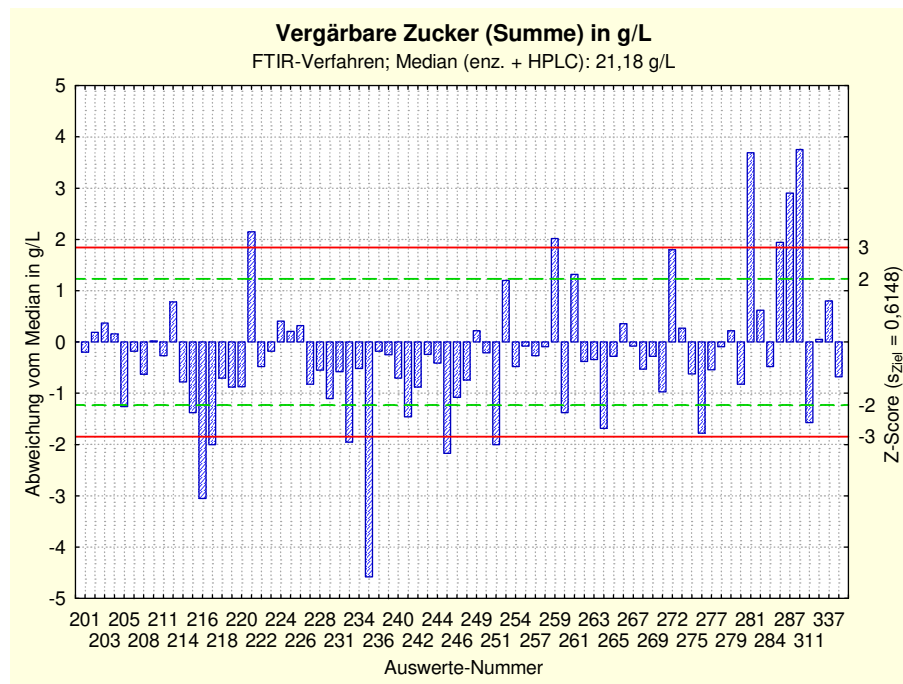
**6.4.4 Deskriptive Ergebnisse**

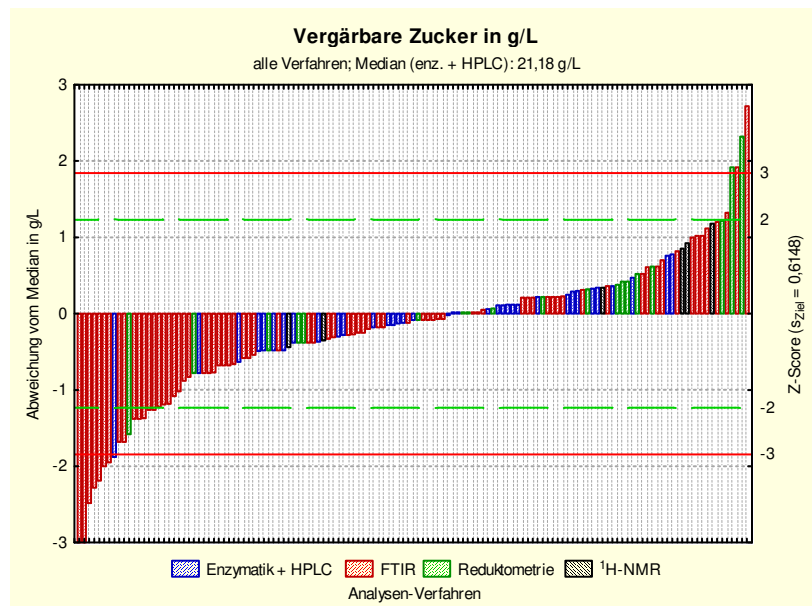
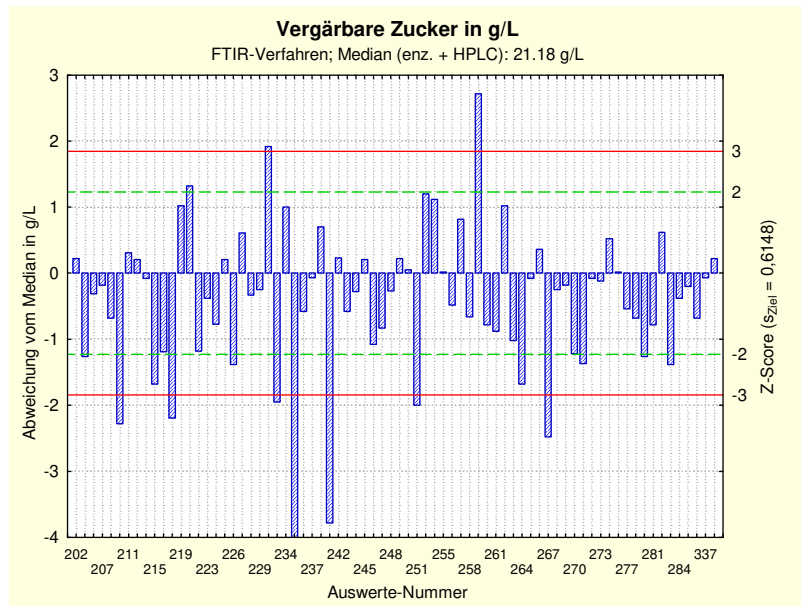
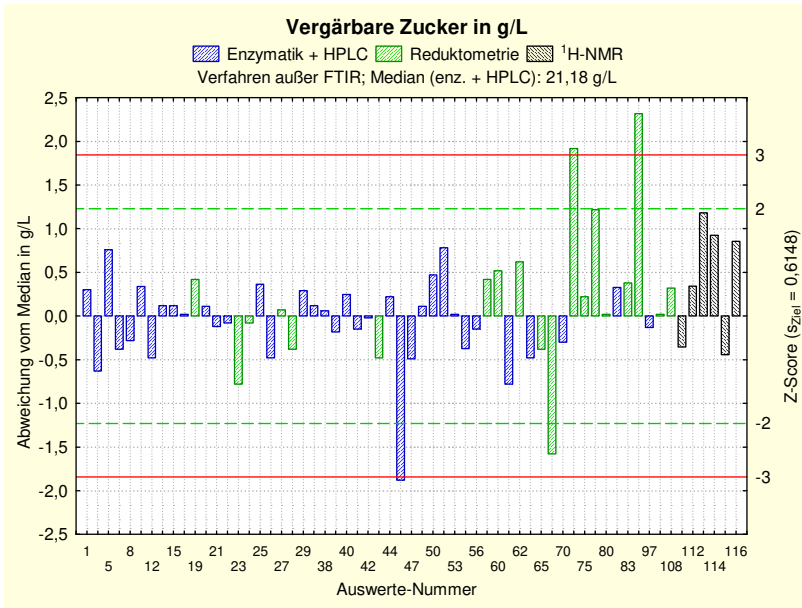
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	19,30
Mittelwert	21,108
Median	21,180
Maximalwert	21,96
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,477
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,080
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,757
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,615
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,584)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,63
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,78
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,82)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,11
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.

**6.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	21,560	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	18	21,368	0,743
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	29	21,143	0,430
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	7	21,095	0,275
	enzymatische und HPLC-Verfahren	36	21,134	0,389
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie Basis: Vergärbare Zucker (mitgeteiltes Ergebnis) Basis: Vergärbare Zucker (Summe aus FTIR-Glucose und FTIR-Fructose, berechnet)	74	20,820	0,960
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	21,602	0,772







## 6.5 Glucose [g/L]

### 6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,25	-0,030	-0,13	-0,16	
02	enzymat., autom.	5,30	0,020	0,09	0,11	
03	enzymat., autom.	5,39	0,110	0,47	0,59	
04	enzymat., autom.	5,47	0,190	0,82	1,02	
05	enzymat., autom.	5,48	0,200	0,86	1,08	
08	enzymat. Hand	5,25	-0,030	-0,13	-0,16	
09	HPLC	5,72	0,440	1,89	2,37	
10	enzymat., autom.	5,13	-0,150	-0,65	-0,81	
12	enzymat., autom.	5,20	-0,080	-0,34	-0,43	
14	enzymat., autom.	5,22	-0,060	-0,26	-0,32	
15	enzymat., autom.	5,40	0,120	0,52	0,65	
18	enzymat., autom.	5,23	-0,050	-0,22	-0,27	
20	HPLC	5,16	-0,120	-0,52	-0,65	
21	HPLC	5,04	-0,240	-1,03	-1,29	
22	HPLC	5,10	-0,180	-0,77	-0,97	
25	enzymat., autom.	5,33	0,050	0,22	0,27	
26	HPLC	5,40	0,120	0,52	0,65	
29	enzymat., autom.	5,29	0,010	0,04	0,05	
31	enzymat., autom.	5,15	-0,128	-0,55	-0,69	
38	enzymat., autom.	5,31	0,030	0,13	0,16	
39	HPLC	5,10	-0,180	-0,77	-0,97	
40	enzymat., autom.	5,28	-0,001	-0,00	-0,01	
41	enzymat., autom.	5,13	-0,150	-0,65	-0,81	
42	enzymat., autom.	5,31	0,029	0,12	0,16	
44	enzymat., autom.	5,20	-0,080	-0,34	-0,43	
45	enzymat., autom.	5,30	0,020	0,09	0,11	
47	enzymat., autom.	5,12	-0,160	-0,69	-0,86	
48	enzymat., autom.	5,21	-0,067	-0,29	-0,36	
50	enzymat., autom.	5,46	0,180	0,77	0,97	
52	enzymat., autom.	5,49	0,210	0,90	1,13	
53	enzymat., autom.	5,32	0,040	0,17	0,22	
56	enzymat., autom.	5,31	0,030	0,13	0,16	
58	enzymat., autom.	5,19	-0,090	-0,39	-0,49	
61	HPLC	5,23	-0,050	-0,22	-0,27	
64	enzymat., autom.	5,44	0,160	0,69	0,86	
70	enzymat., autom.	5,28	0,000	0,00	0,00	
82	enzymat. Hand	5,35	0,070	0,30	0,38	
89	HPLC	5,28	0,000	0,00	0,00	
97	HPLC	5,04	-0,240	-1,03	-1,29	
111	NMR	5,66	0,380	1,63	2,05	
112	NMR	5,94	0,656	2,82	3,54	
113	NMR	6,05	0,772	3,32	4,16	
114	NMR	6,20	0,919	3,95	4,96	
115	NMR	5,16	-0,120	-0,52	-0,65	
116	NMR	6,18	0,903	3,88	4,87	

### 6.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,88	-0,400	-1,72	-0,98	
202	FTIR	5,67	0,390	1,68	0,96	
203	FTIR	5,73	0,450	1,94	1,10	
204	FTIR	4,69	-0,590	-2,54	-1,45	
205	FTIR	5,65	0,370	1,59	0,91	
207	FTIR	5,20	-0,080	-0,34	-0,20	
208	FTIR	6,25	0,970	4,17	2,38	
210	FTIR	4,60	-0,680	-2,92	-1,67	
211	FTIR	5,06	-0,220	-0,95	-0,54	
212	FTIR	5,88	0,600	2,58	1,47	
214	FTIR	5,10	-0,180	-0,77	-0,44	
215	FTIR	4,60	-0,680	-2,92	-1,67	
216	FTIR	3,88	-1,400	-6,02	-3,43	
217	FTIR	4,42	-0,860	-3,70	-2,11	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	4,06	-1,220	-5,25	-2,99	
219	FTIR	4,90	-0,380	-1,63	-0,93	
220	FTIR	4,24	-1,040	-4,47	-2,55	
221	FTIR	5,55	0,270	1,16	0,66	
222	FTIR	5,20	-0,080	-0,34	-0,20	
223	FTIR	4,90	-0,380	-1,63	-0,93	
224	FTIR	5,54	0,260	1,12	0,64	
225	FTIR	5,00	-0,280	-1,20	-0,69	
226	FTIR	5,50	0,220	0,95	0,54	
227	FTIR	5,04	-0,240	-1,03	-0,59	
228	FTIR	4,93	-0,350	-1,51	-0,86	
229	FTIR	4,37	-0,910	-3,91	-2,23	
231	FTIR	5,00	-0,280	-1,20	-0,69	
232	FTIR	3,91	-1,370	-5,89	-3,36	
234	FTIR	4,86	-0,420	-1,81	-1,03	
235	FTIR	4,50	-0,780	-3,35	-1,91	
236	FTIR	5,20	-0,080	-0,34	-0,20	
237	FTIR	6,50	1,220	5,25	2,99	
240	FTIR	4,71	-0,570	-2,45	-1,40	
241	FTIR	4,06	-1,220	-5,25	-2,99	
242	FTIR	4,50	-0,780	-3,35	-1,91	
243	FTIR	5,01	-0,270	-1,16	-0,66	
244	FTIR	5,13	-0,150	-0,65	-0,37	
245	FTIR	5,41	0,130	0,56	0,32	
246	FTIR	4,20	-1,080	-4,64	-2,65	
247	FTIR	5,12	-0,160	-0,69	-0,39	
249	FTIR	5,40	0,120	0,52	0,29	
250	FTIR	5,14	-0,140	-0,60	-0,34	
251	FTIR	5,09	-0,190	-0,82	-0,47	
252	FTIR	5,74	0,460	1,98	1,13	
254	FTIR	5,20	-0,080	-0,34	-0,20	
256	FTIR	4,60	-0,680	-2,92	-1,67	
257	FTIR	4,60	-0,680	-2,92	-1,67	
258	FTIR	4,96	-0,320	-1,38	-0,78	
259	FTIR	8,20	2,920	12,56	7,16	(*)
260	FTIR	4,90	-0,380	-1,63	-0,93	
261	FTIR	6,30	1,020	4,39	2,50	
262	FTIR	5,80	0,520	2,24	1,27	
263	FTIR	5,56	0,280	1,20	0,69	
264	FTIR	5,50	0,220	0,95	0,54	
265	FTIR	4,90	-0,380	-1,63	-0,93	
266	FTIR	5,76	0,480	2,06	1,18	
267	FTIR	4,70	-0,580	-2,49	-1,42	
268	FTIR	4,60	-0,680	-2,92	-1,67	
269	FTIR	4,70	-0,580	-2,49	-1,42	
271	FTIR	5,06	-0,220	-0,95	-0,54	
272	FTIR	5,01	-0,270	-1,16	-0,66	
273	FTIR	4,77	-0,510	-2,19	-1,25	
275	FTIR	4,32	-0,960	-4,13	-2,35	
276	FTIR	4,50	-0,780	-3,35	-1,91	
277	FTIR	5,55	0,270	1,16	0,66	
278	FTIR	4,95	-0,330	-1,42	-0,81	
279	FTIR	5,40	0,120	0,52	0,29	
280	FTIR	5,24	-0,040	-0,17	-0,10	
281	FTIR	9,18	3,900	16,77	9,56	(*)
282	FTIR	6,10	0,820	3,53	2,01	
284	FTIR	4,10	-1,180	-5,08	-2,89	
285	FTIR	6,90	1,620	6,97	3,97	
287	FTIR	5,98	0,700	3,01	1,72	
288	FTIR	6,60	1,320	5,68	3,24	
311	FTIR	3,82	-1,460	-6,28	-3,58	
320	FTIR	5,77	0,490	2,11	1,20	
337	FTIR	5,38	0,100	0,43	0,25	
365	FTIR	4,20	-1,080	-4,64	-2,65	

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

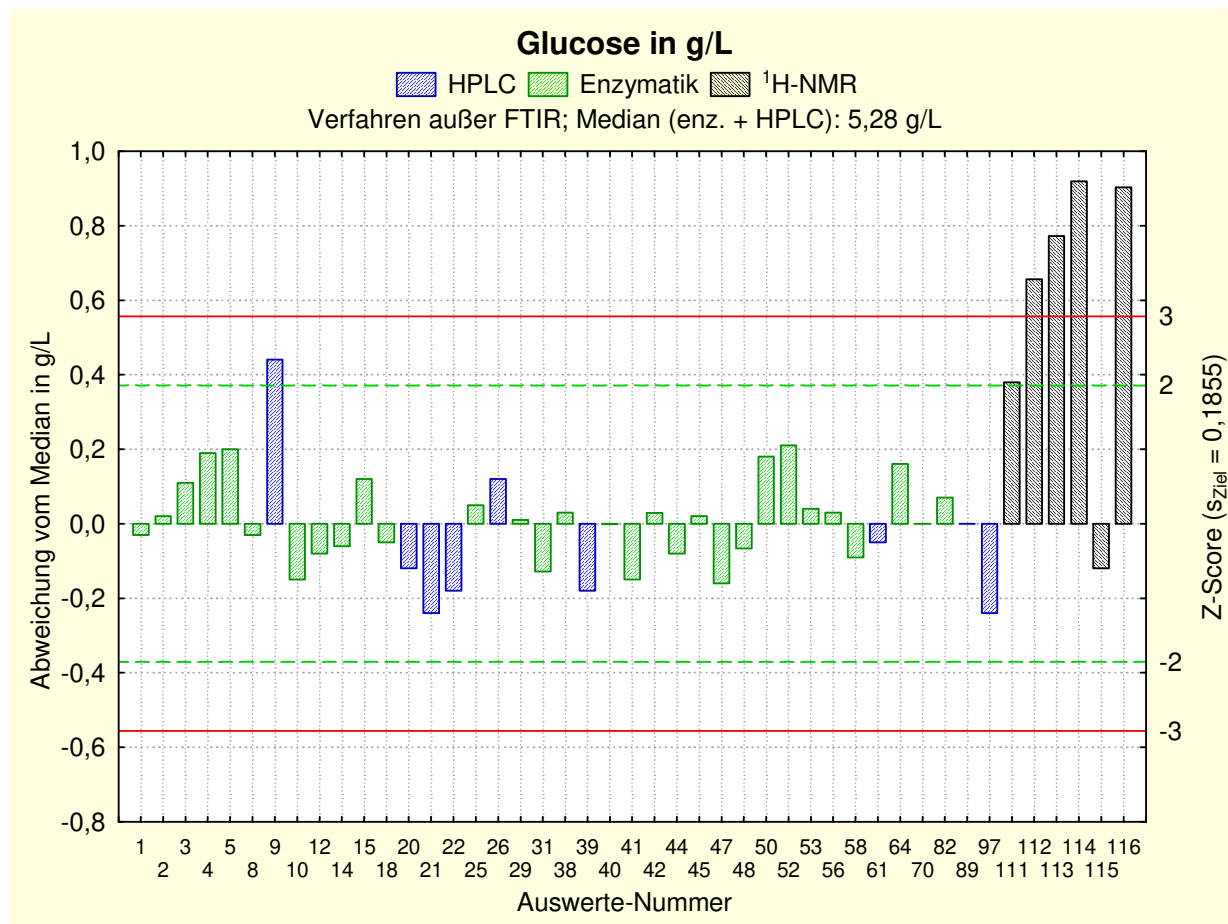


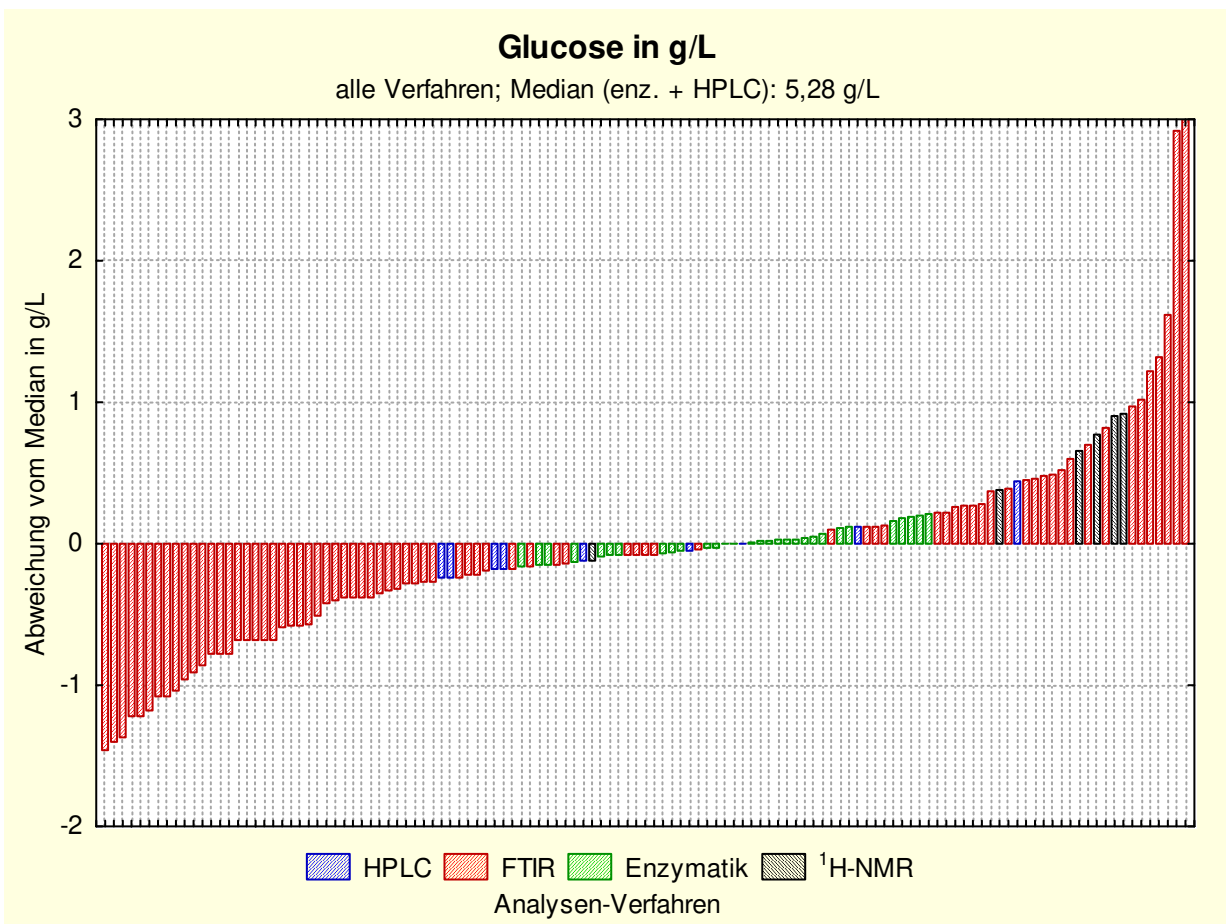
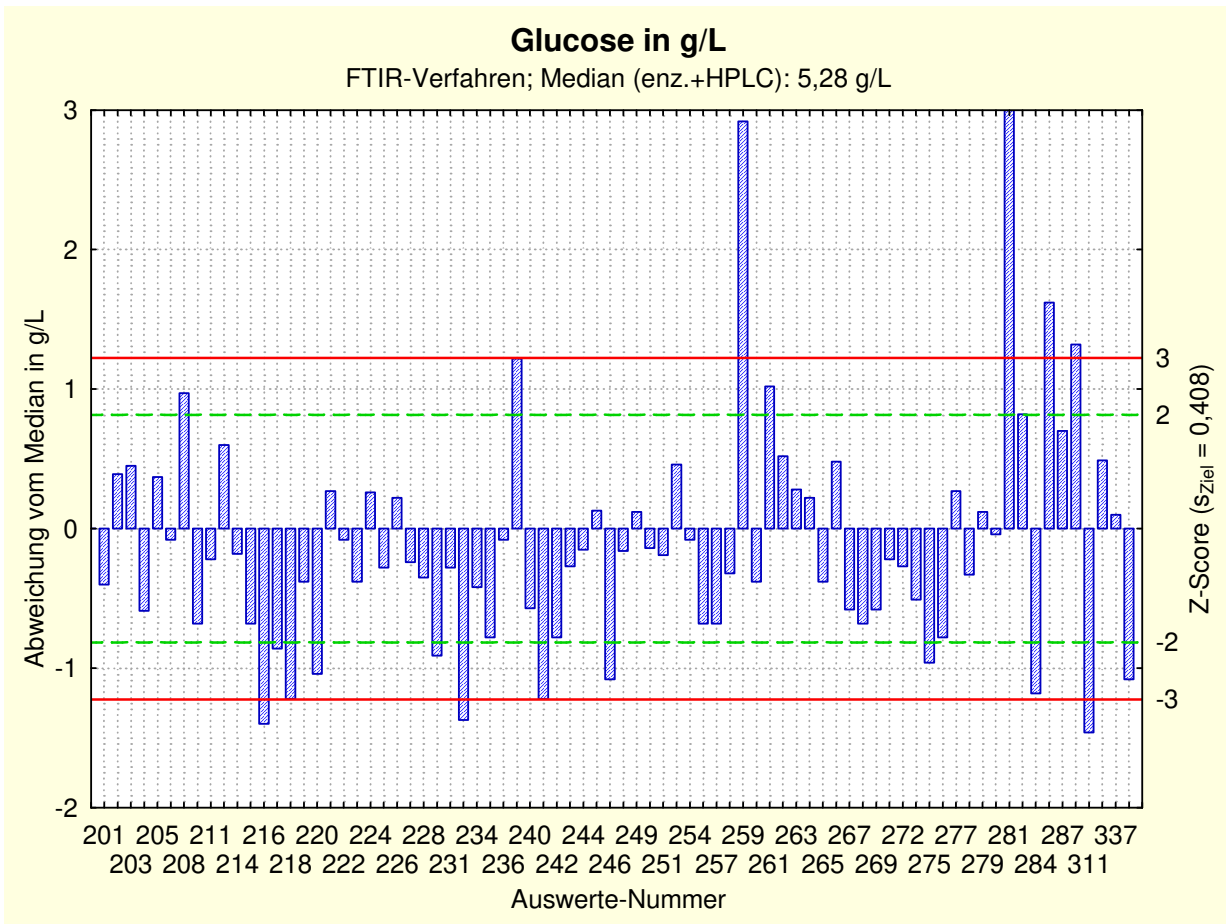
### 6.5.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	39
Minimalwert	5,04
Mittelwert	5,279
Median	5,280
Maximalwert	5,72
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,140
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,022
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,233
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,185
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,408
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,60
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,75
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,34
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,05

### 6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	5,201	0,174
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiert	27	5,294	0,126
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, manuell	3	5,283	0,064
	herkömmliche Verfahren	39	5,273	0,137
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	5,088	0,677
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,885	0,405





## 6.6 Fructose [g/L]

### 6.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	16,23	0,230	0,39	0,48	
02	enzymat., autom.	15,25	-0,750	-1,26	-1,58	
03	enzymat., autom.	16,03	0,030	0,05	0,06	
04	enzymat., autom.	16,26	0,260	0,44	0,55	
05	enzymat., autom.	16,50	0,500	0,84	1,05	
08	enzymat. Hand	15,60	-0,400	-0,67	-0,84	
09	HPLC	15,79	-0,210	-0,35	-0,44	
10	enzymat., autom.	15,85	-0,150	-0,25	-0,32	
12	enzymat., autom.	15,60	-0,400	-0,67	-0,84	
14	enzymat., autom.	16,08	0,080	0,13	0,17	
15	enzymat., autom.	16,00	0,000	0,00	0,00	
18	enzymat., autom.	15,97	-0,030	-0,05	-0,06	
20	HPLC	16,13	0,130	0,22	0,27	
21	HPLC	16,02	0,020	0,03	0,04	
22	HPLC	16,00	0,000	0,00	0,00	
25	enzymat., autom.	16,22	0,215	0,36	0,45	
26	HPLC	16,20	0,200	0,34	0,42	
29	enzymat., autom.	16,06	0,060	0,10	0,13	
31	enzymat., autom.	16,14	0,136	0,23	0,29	
38	enzymat., autom.	15,93	-0,070	-0,12	-0,15	
39	HPLC	15,90	-0,100	-0,17	-0,21	
40	enzymat., autom.	16,15	0,149	0,25	0,31	
41	enzymat., autom.	15,90	-0,100	-0,17	-0,21	
42	enzymat., autom.	15,85	-0,149	-0,25	-0,31	
44	enzymat., autom.	16,20	0,200	0,34	0,42	
45	enzymat., autom.	13,90	-2,100	-3,52	-4,42	
47	enzymat., autom.	15,57	-0,430	-0,72	-0,91	
48	enzymat., autom.	16,08	0,080	0,13	0,17	
50	enzymat., autom.	16,19	0,190	0,32	0,40	
52	enzymat., autom.	16,47	0,470	0,79	0,99	
53	enzymat., autom.	15,76	-0,240	-0,40	-0,51	
56	enzymat., autom.	15,72	-0,280	-0,47	-0,59	
58	enzymat., autom.	16,20	0,200	0,34	0,42	
61	HPLC	15,87	-0,130	-0,22	-0,27	
64	enzymat., autom.	15,26	-0,740	-1,24	-1,56	
70	enzymat., autom.	15,60	-0,400	-0,67	-0,84	
82	enzymat. Hand	16,16	0,160	0,27	0,34	
89	HPLC	15,81	-0,190	-0,32	-0,40	
97	HPLC	16,01	0,010	0,02	0,02	
111	NMR	15,17	-0,832	-1,40	-1,75	
112	NMR	15,59	-0,415	-0,70	-0,87	
113	NMR	16,31	0,308	0,52	0,65	
114	NMR	15,91	-0,095	-0,16	-0,20	
115	NMR	15,58	-0,420	-0,70	-0,88	
116	NMR	15,85	-0,149	-0,25	-0,31	

### 6.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	16,10	0,100	0,17	0,21	
202	FTIR	15,70	-0,300	-0,50	-0,63	
203	FTIR	15,82	-0,180	-0,30	-0,38	
204	FTIR	16,65	0,650	1,09	1,37	
205	FTIR	14,27	-1,730	-2,90	-3,64	
207	FTIR	15,80	-0,200	-0,34	-0,42	
208	FTIR	14,30	-1,700	-2,85	-3,58	
210	FTIR	16,60	0,600	1,01	1,26	
211	FTIR	15,85	-0,150	-0,25	-0,32	
212	FTIR	16,08	0,080	0,13	0,17	
214	FTIR	15,30	-0,700	-1,17	-1,47	
215	FTIR	15,20	-0,800	-1,34	-1,68	
216	FTIR	14,25	-1,750	-2,93	-3,68	
217	FTIR	14,76	-1,240	-2,08	-2,61	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	16,42	0,420	0,70	0,88	
219	FTIR	15,40	-0,600	-1,01	-1,26	
220	FTIR	16,07	0,070	0,12	0,15	
221	FTIR	17,78	1,780	2,99	3,75	
222	FTIR	15,50	-0,500	-0,84	-1,05	
223	FTIR	16,10	0,100	0,17	0,21	
224	FTIR	16,05	0,050	0,08	0,11	
225	FTIR	16,39	0,390	0,65	0,82	
226	FTIR	16,00	0,000	0,00	0,00	
227	FTIR	15,32	-0,680	-1,14	-1,43	
228	FTIR	15,70	-0,300	-0,50	-0,63	
229	FTIR	15,71	-0,290	-0,49	-0,61	
231	FTIR	15,60	-0,400	-0,67	-0,84	
232	FTIR	15,32	-0,680	-1,14	-1,43	
234	FTIR	15,80	-0,200	-0,34	-0,42	
235	FTIR	12,10	-3,900	-6,54	-8,21	(***)
236	FTIR	15,80	-0,200	-0,34	-0,42	
237	FTIR	14,43	-1,570	-2,63	-3,31	
240	FTIR	15,77	-0,230	-0,39	-0,48	
241	FTIR	15,66	-0,340	-0,57	-0,72	
242	FTIR	15,80	-0,200	-0,34	-0,42	
243	FTIR	15,93	-0,070	-0,12	-0,15	
244	FTIR	15,64	-0,360	-0,60	-0,76	
245	FTIR	13,60	-2,400	-4,02	-5,05	(***)
246	FTIR	15,90	-0,100	-0,17	-0,21	
247	FTIR	15,32	-0,680	-1,14	-1,43	
249	FTIR	16,00	0,000	0,00	0,00	
250	FTIR	15,83	-0,170	-0,29	-0,36	
251	FTIR	14,09	-1,910	-3,20	-4,02	
252	FTIR	16,64	0,640	1,07	1,35	
254	FTIR	15,50	-0,500	-0,84	-1,05	
256	FTIR	16,50	0,500	0,84	1,05	
257	FTIR	16,31	0,310	0,52	0,65	
258	FTIR	16,13	0,130	0,22	0,27	
259	FTIR	15,00	-1,000	-1,68	-2,11	
260	FTIR	14,90	-1,100	-1,84	-2,32	
261	FTIR	16,20	0,200	0,34	0,42	
262	FTIR	15,00	-1,000	-1,68	-2,11	
263	FTIR	15,28	-0,720	-1,21	-1,52	
264	FTIR	14,00	-2,000	-3,35	-4,21	
265	FTIR	16,00	0,000	0,00	0,00	
266	FTIR	15,78	-0,220	-0,37	-0,46	
267	FTIR	16,40	0,400	0,67	0,84	
268	FTIR	16,05	0,050	0,08	0,11	
269	FTIR	16,20	0,200	0,34	0,42	
271	FTIR	15,15	-0,850	-1,43	-1,79	
272	FTIR	17,97	1,970	3,30	4,15	
273	FTIR	16,68	0,680	1,14	1,43	
275	FTIR	16,24	0,240	0,40	0,51	
276	FTIR	14,90	-1,100	-1,84	-2,32	
277	FTIR	15,09	-0,910	-1,53	-1,92	
278	FTIR	16,14	0,140	0,23	0,29	
279	FTIR	16,00	0,000	0,00	0,00	
280	FTIR	15,12	-0,880	-1,48	-1,85	
281	FTIR	15,69	-0,310	-0,52	-0,65	
282	FTIR	15,70	-0,300	-0,50	-0,63	
284	FTIR	16,60	0,600	1,01	1,26	
285	FTIR	16,22	0,220	0,37	0,46	
287	FTIR	18,10	2,100	3,52	4,42	
288	FTIR	18,33	2,330	3,91	4,91	
311	FTIR	15,79	-0,210	-0,35	-0,44	
320	FTIR	15,46	-0,540	-0,91	-1,14	
337	FTIR	16,60	0,600	1,01	1,26	
365	FTIR	16,30	0,300	0,50	0,63	

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

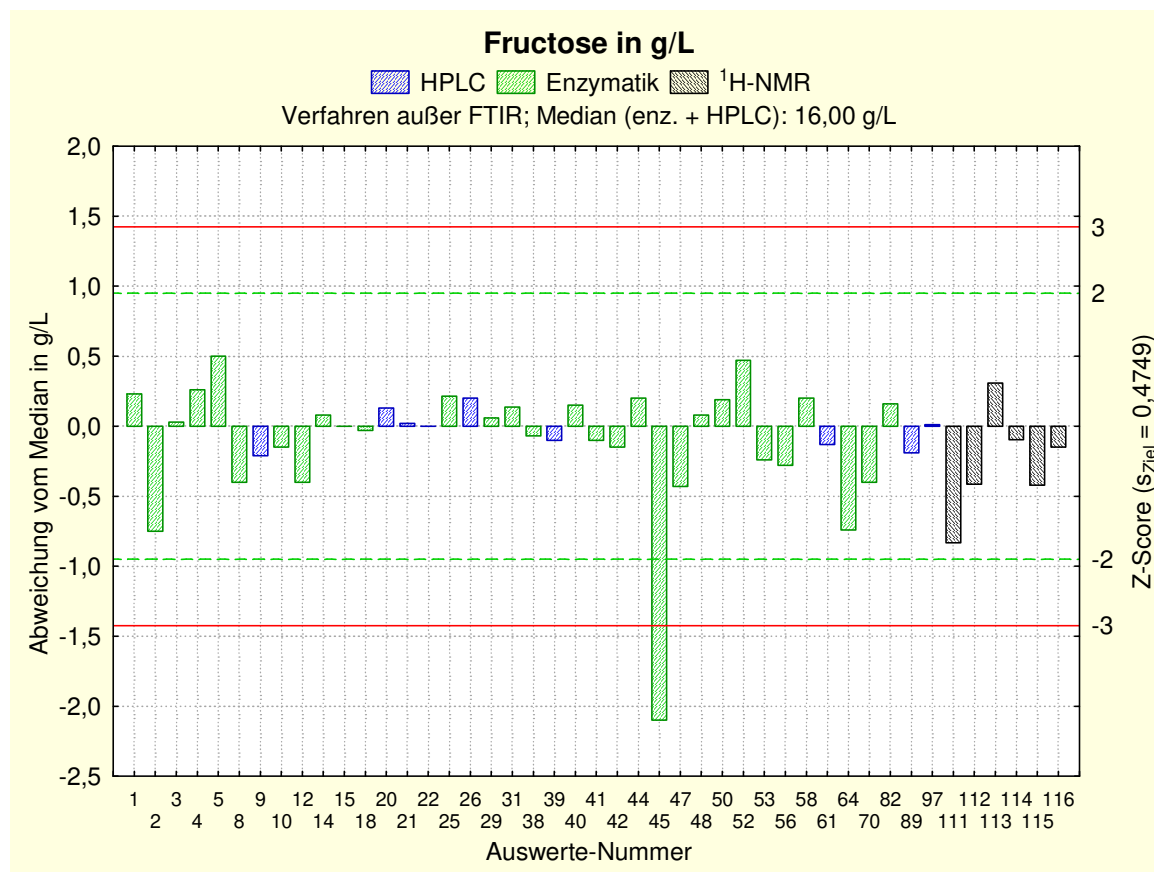
### 6.6.3 Deskriptive Ergebnisse

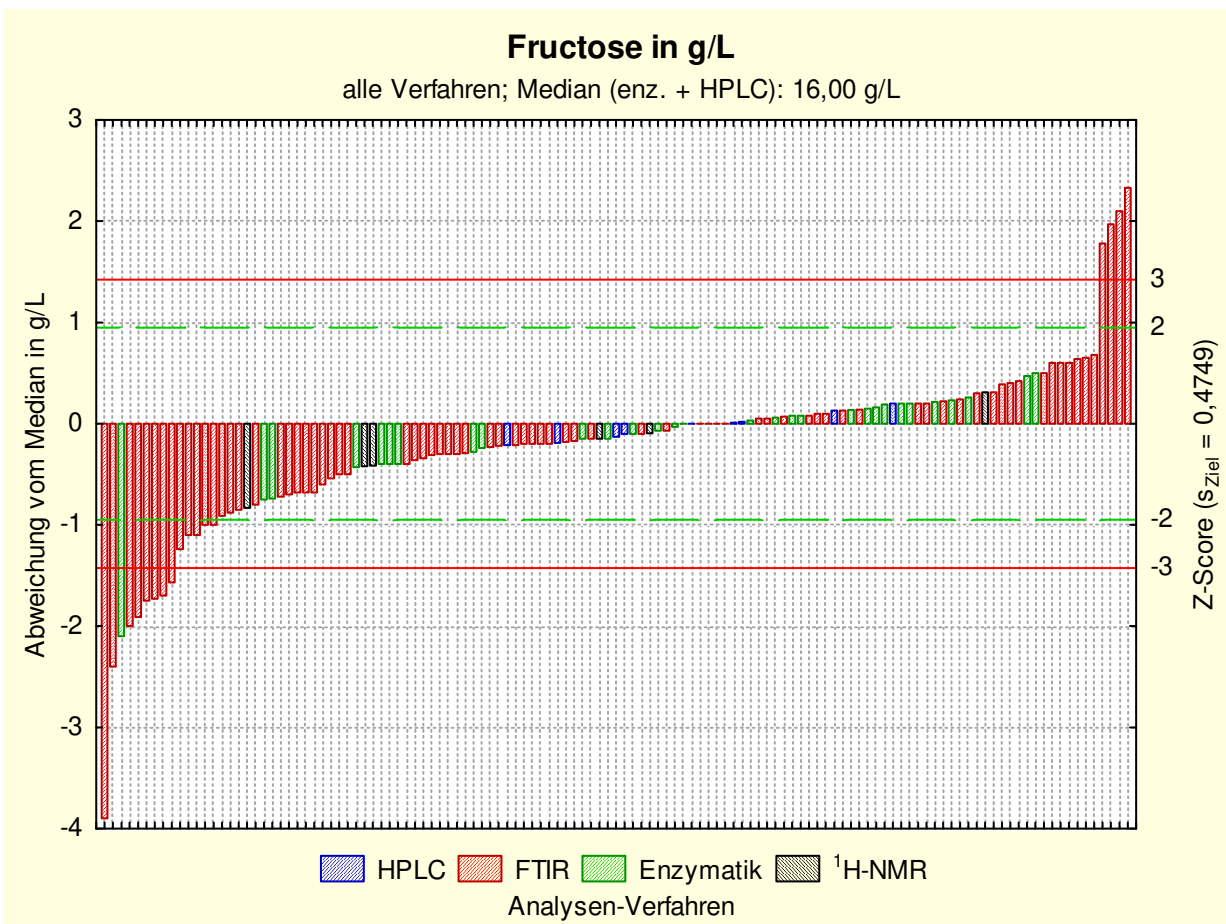
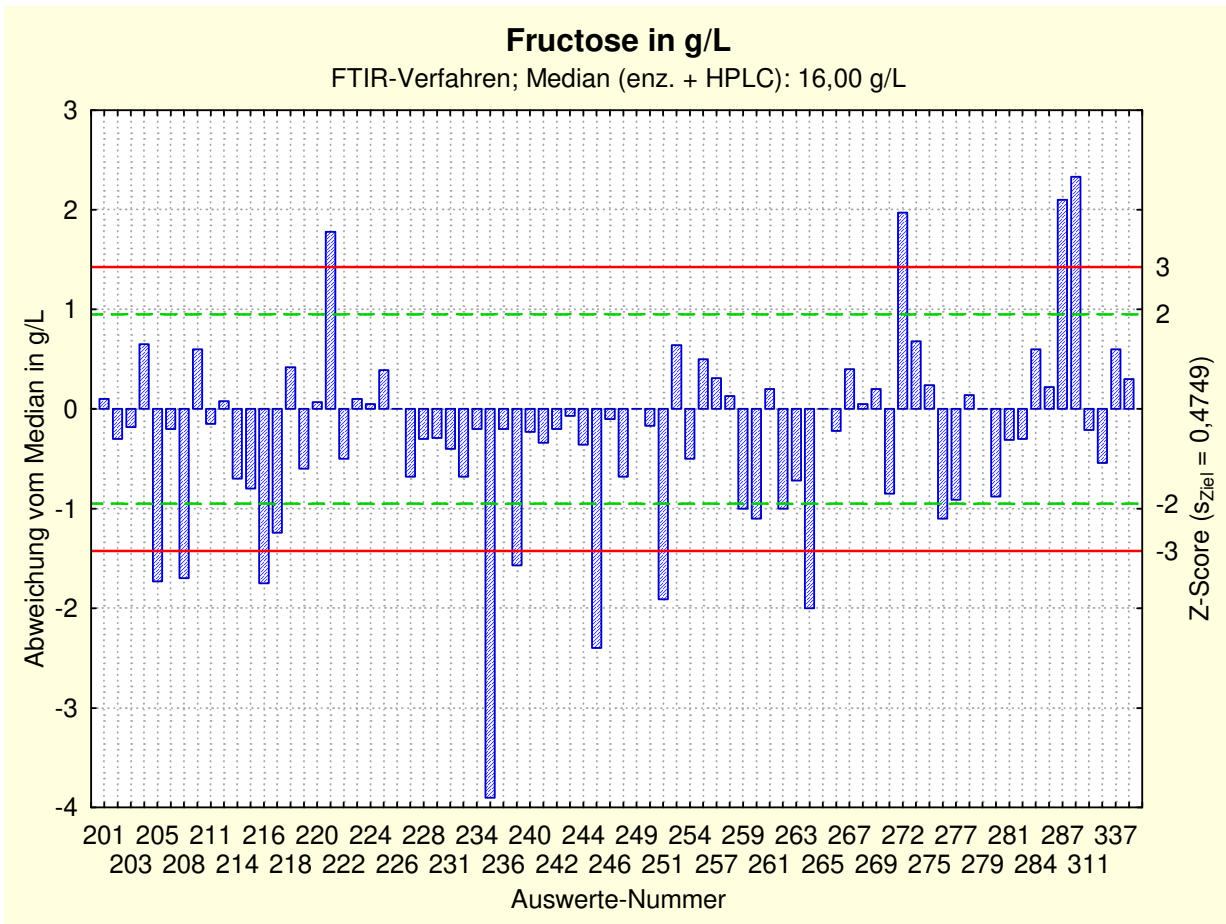
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	39
Minimalwert	13,90
Mittelwert	15,909
Median	16,000
Maximalwert	16,50
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,431
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,069
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,596
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,475
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,330)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,72
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,91
Quotient ( $s_L/s_{exp\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(1,31)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,15
Quotient ( $u_M/s_{FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,21)

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

### 6.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	15,970	0,159
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, automatisiert	27	15,948	0,330
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	3	16,040	0,306
	herkömmliche Verfahren	39	15,961	0,273
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	15,763	0,686
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	15,730	0,412





## 6.7 Glycerin [g/L]

### 6.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,59	0,010	0,04	
02	enzymat. Hand	6,39	-0,190	-0,68	
03	HPLC	6,41	-0,170	-0,61	
04	enzymat. autom.	6,62	0,040	0,14	
05	enzymat. autom.	6,58	0,000	0,00	
09	enzymat. autom.	7,08	0,500	1,78	
14	enzymat. autom.	6,46	-0,120	-0,43	
21	HPLC	6,52	-0,060	-0,21	
22	HPLC	6,70	0,120	0,43	
26	HPLC	6,90	0,320	1,14	
39	HPLC	6,72	0,140	0,50	
56	enzymat. autom.	6,52	-0,060	-0,21	
58	enzymat. autom.	6,48	-0,100	-0,36	
61	HPLC	6,72	0,140	0,50	
82	enzymat. Hand	6,48	-0,100	-0,36	
92	enzymat. Hand	6,56	-0,020	-0,07	
97	HPLC	6,98	0,400	1,43	
111	NMR	6,86	0,279	1,00	
112	NMR	6,42	-0,155	-0,55	
113	NMR	6,84	0,260	0,93	
114	NMR	6,85	0,271	0,97	
115	NMR	6,62	0,040	0,14	
116	NMR	6,59	0,010	0,04	

### 6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,40	-0,180	-0,64	-0,52	
202	FTIR	5,56	-1,020	-3,64	-2,93	
203	FTIR	5,77	-0,810	-2,89	-2,33	
205	FTIR	6,34	-0,240	-0,86	-0,69	
206	FTIR	6,38	-0,200	-0,71	-0,57	
207	FTIR	5,40	-1,180	-4,21	-3,39	
208	FTIR	7,40	0,820	2,93	2,36	
210	FTIR	6,03	-0,550	-1,96	-1,58	
211	FTIR	6,32	-0,260	-0,93	-0,75	
212	FTIR	5,58	-1,000	-3,57	-2,87	
214	FTIR	6,20	-0,380	-1,36	-1,09	
215	FTIR	7,00	0,420	1,50	1,21	
216	FTIR	7,25	0,670	2,39	1,93	
217	FTIR	5,16	-1,420	-5,07	-4,08	
218	FTIR	6,40	-0,180	-0,64	-0,52	
220	FTIR	6,76	0,180	0,64	0,52	
221	FTIR	6,33	-0,250	-0,89	-0,72	
223	FTIR	5,80	-0,780	-2,78	-2,24	
224	FTIR	5,65	-0,930	-3,32	-2,67	
226	FTIR	6,10	-0,480	-1,71	-1,38	
227	FTIR	6,37	-0,210	-0,75	-0,60	
228	FTIR	6,57	-0,010	-0,04	-0,03	
229	FTIR	6,43	-0,150	-0,54	-0,43	
231	FTIR	5,56	-1,020	-3,64	-2,93	
232	FTIR	5,72	-0,860	-3,07	-2,47	
234	FTIR	6,58	0,000	0,00	0,00	
236	FTIR	5,20	-1,380	-4,92	-3,97	
237	FTIR	7,59	1,010	3,60	2,90	
240	FTIR	6,30	-0,280	-1,00	-0,80	
241	FTIR	6,70	0,120	0,43	0,34	
242	FTIR	5,40	-1,180	-4,21	-3,39	



**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
243	FTIR	5,60	-0,980	-3,50	-2,82	
244	FTIR	5,60	-0,980	-3,50	-2,82	
245	FTIR	6,24	-0,340	-1,21	-0,98	
249	FTIR	5,50	-1,080	-3,85	-3,10	
250	FTIR	5,90	-0,680	-2,43	-1,95	
252	FTIR	5,66	-0,920	-3,28	-2,64	
254	FTIR	6,50	-0,080	-0,29	-0,23	
256	FTIR	7,08	0,500	1,78	1,44	
257	FTIR	5,93	-0,650	-2,32	-1,87	
258	FTIR	7,30	0,720	2,57	2,07	
259	FTIR	6,10	-0,480	-1,71	-1,38	
260	FTIR	5,70	-0,880	-3,14	-2,53	
261	FTIR	7,80	1,220	4,35	3,51	
262	FTIR	7,60	1,020	3,64	2,93	
264	FTIR	6,50	-0,080	-0,29	-0,23	
268	FTIR	5,48	-1,100	-3,92	-3,16	
269	FTIR	6,60	0,020	0,07	0,06	
271	FTIR	6,50	-0,080	-0,29	-0,23	
272	FTIR	5,39	-1,190	-4,25	-3,42	
275	FTIR	5,96	-0,620	-2,21	-1,78	
276	FTIR	6,10	-0,480	-1,71	-1,38	
279	FTIR	5,70	-0,880	-3,14	-2,53	
280	FTIR	6,19	-0,390	-1,39	-1,12	
282	FTIR	5,60	-0,980	-3,50	-2,82	
283	FTIR	6,70	0,120	0,43	0,34	
284	FTIR	7,20	0,620	2,21	1,78	
285	FTIR	8,04	1,460	5,21	4,20	
287	FTIR	7,23	0,650	2,32	1,87	
288	FTIR	7,30	0,720	2,57	2,07	
320	FTIR	7,16	0,580	2,07	1,67	
337	FTIR	5,68	-0,900	-3,21	-2,59	

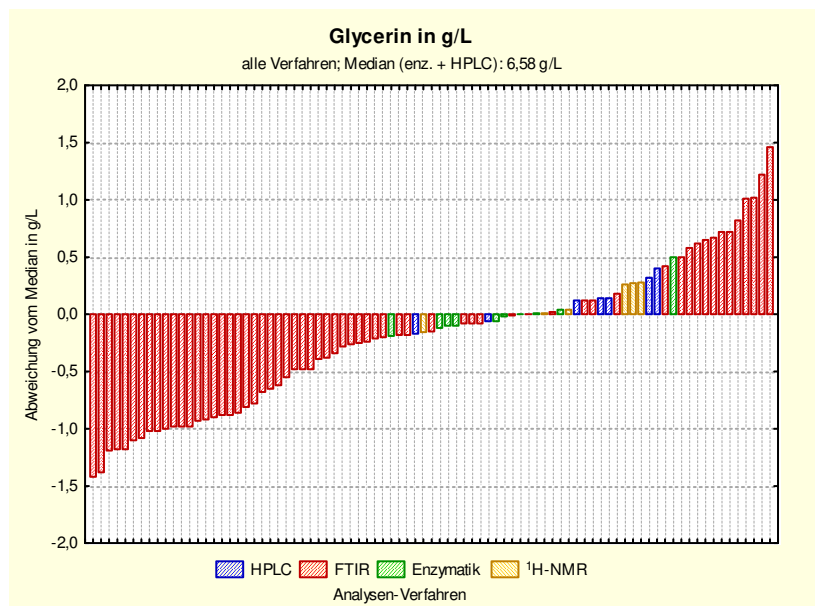
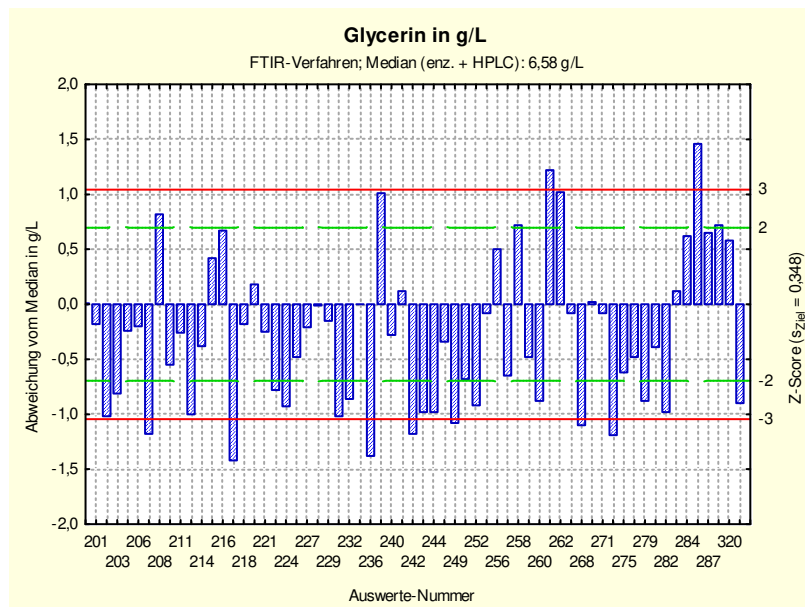
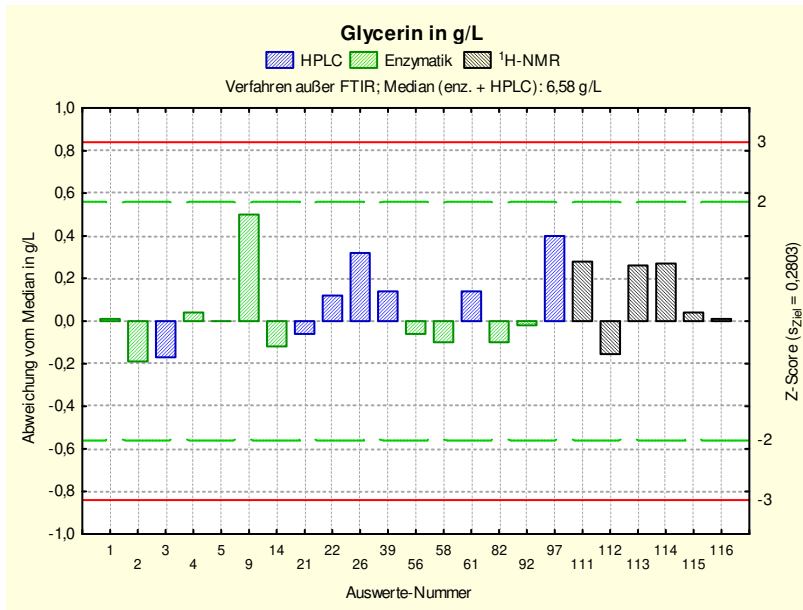
**6.7.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	17
Minimalwert	6,39
Mittelwert	6,630
Median	6,580
Maximalwert	7,08
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,199
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,048
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,280
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,71
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,57
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,17
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,14

**6.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	6,707	0,225
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	6,569	0,123
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	6,507	0,098
	herkömmliche Verfahren	17	6,614	0,189
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	62	6,267	0,738
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	6,702	0,195





## 6.8 pH-Wert

### 6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,78	0,020	0,42	
02	potentiometr.	3,72	-0,040	-0,84	
03	potentiometr.	3,67	-0,090	-1,89	
04	potentiometr.	3,80	0,040	0,84	
05	potentiometr.	3,70	-0,060	-1,26	
06	potentiometr.	3,74	-0,020	-0,42	
08	potentiometr.	3,74	-0,020	-0,42	
09	potentiometr.	3,81	0,050	1,05	
12	potentiometr.	3,71	-0,050	-1,05	
14	potentiometr.	3,80	0,040	0,84	
15	potentiometr.	3,75	-0,010	-0,21	
18	potentiometr.	3,80	0,042	0,88	
20	potentiometr.	3,80	0,040	0,84	
21	potentiometr.	3,73	-0,030	-0,63	
22	potentiometr.	3,74	-0,020	-0,42	
24	potentiometr.	3,70	-0,060	-1,26	
25	potentiometr.	3,85	0,090	1,89	
26	potentiometr.	3,80	0,040	0,84	
27	potentiometr.	3,78	0,020	0,42	
28	potentiometr.	3,75	-0,010	-0,21	
29	potentiometr.	3,71	-0,050	-1,05	
31	potentiometr.	3,81	0,050	1,05	
38	potentiometr.	3,73	-0,030	-0,63	
39	potentiometr.	3,77	0,010	0,21	
40	potentiometr.	3,74	-0,020	-0,42	
41	potentiometr.	3,77	0,010	0,21	
42	potentiometr.	3,83	0,070	1,47	
43	potentiometr.	3,71	-0,050	-1,05	
44	potentiometr.	3,77	0,010	0,21	
45	potentiometr.	3,89	0,130	2,73	
47	potentiometr.	3,68	-0,080	-1,68	
50	potentiometr.	3,76	0,000	0,00	
53	potentiometr.	3,76	0,000	0,00	
56	potentiometr.	3,75	-0,010	-0,21	
58	potentiometr.	3,77	0,010	0,21	
60	potentiometr.	3,85	0,090	1,89	
61	potentiometr.	3,60	-0,160	-3,36	
62	potentiometr.	3,83	0,070	1,47	
64	potentiometr.	3,91	0,150	3,15	
65	potentiometr.	3,66	-0,100	-2,10	
68	potentiometr.	3,70	-0,060	-1,26	
70	potentiometr.	3,82	0,060	1,26	
74	potentiometr.	3,60	-0,160	-3,36	
75	potentiometr.	3,62	-0,140	-2,94	
77	potentiometr.	3,77	0,010	0,21	
78	potentiometr.	3,79	0,030	0,63	
82	potentiometr.	3,83	0,070	1,47	
83	potentiometr.	3,74	-0,020	-0,42	
86	potentiometr.	3,94	0,180	3,78	
106	potentiometr.	3,58	-0,180	-3,78	

### 6.8.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,72	-0,040	-0,81	
202	FTIR	3,72	-0,040	-0,81	
203	FTIR	3,66	-0,100	-2,03	
204	FTIR	3,86	0,100	2,03	
205	FTIR	3,87	0,110	2,23	
206	FTIR	3,79	0,030	0,61	
207	FTIR	3,69	-0,070	-1,42	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
208	FTIR	3,80	0,040	0,81	
210	FTIR	3,65	-0,110	-2,23	
211	FTIR	3,79	0,030	0,61	
212	FTIR	3,66	-0,100	-2,03	
214	FTIR	3,76	0,000	0,00	
215	FTIR	3,67	-0,090	-1,83	
216	FTIR	3,55	-0,210	-4,26	
217	FTIR	3,81	0,050	1,01	
218	FTIR	3,74	-0,020	-0,41	
219	FTIR	3,86	0,100	2,03	
220	FTIR	3,80	0,040	0,81	
221	FTIR	3,64	-0,120	-2,43	
222	FTIR	4,06	0,300	6,09	
223	FTIR	3,64	-0,120	-2,43	
224	FTIR	3,70	-0,060	-1,22	
225	FTIR	3,76	0,000	0,00	
226	FTIR	3,77	0,010	0,20	
227	FTIR	3,76	0,000	0,00	
228	FTIR	3,72	-0,040	-0,81	
229	FTIR	3,85	0,090	1,83	
231	FTIR	3,81	0,050	1,01	
232	FTIR	3,73	-0,030	-0,61	
234	FTIR	3,77	0,010	0,20	
235	FTIR	3,89	0,130	2,64	
236	FTIR	3,69	-0,070	-1,42	
237	FTIR	3,83	0,070	1,42	
240	FTIR	3,77	0,010	0,20	
241	FTIR	3,71	-0,050	-1,01	
242	FTIR	3,66	-0,100	-2,03	
243	FTIR	3,84	0,080	1,62	
244	FTIR	3,71	-0,050	-1,01	
245	FTIR	3,80	0,040	0,81	
247	FTIR	3,69	-0,070	-1,42	
249	FTIR	3,80	0,040	0,81	
250	FTIR	3,74	-0,020	-0,41	
251	FTIR	3,98	0,220	4,46	
252	FTIR	3,70	-0,060	-1,22	
254	FTIR	3,75	-0,010	-0,20	
255	FTIR	3,76	0,000	0,00	
256	FTIR	3,74	-0,020	-0,41	
257	FTIR	3,55	-0,210	-4,26	
258	FTIR	3,65	-0,110	-2,23	
259	FTIR	3,66	-0,100	-2,03	
260	FTIR	3,99	0,230	4,67	
261	FTIR	3,73	-0,030	-0,61	
262	FTIR	3,84	0,080	1,62	
264	FTIR	3,98	0,220	4,46	
265	FTIR	3,71	-0,050	-1,01	
266	FTIR	3,73	-0,030	-0,61	
267	FTIR	3,65	-0,110	-2,23	
268	FTIR	3,67	-0,090	-1,83	
269	FTIR	3,69	-0,070	-1,42	
270	FTIR	4,03	0,270	5,48	(***)
271	FTIR	3,68	-0,080	-1,62	
272	FTIR	3,72	-0,040	-0,81	
273	FTIR	3,65	-0,110	-2,23	
275	FTIR	3,72	-0,040	-0,81	
276	FTIR	3,91	0,150	3,04	
277	FTIR	3,78	0,020	0,41	
278	FTIR	3,64	-0,120	-2,43	
279	FTIR	3,86	0,100	2,03	
280	FTIR	3,70	-0,060	-1,22	
281	FTIR	3,78	0,020	0,41	
282	FTIR	3,76	0,000	0,00	
283	FTIR	3,73	-0,030	-0,61	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

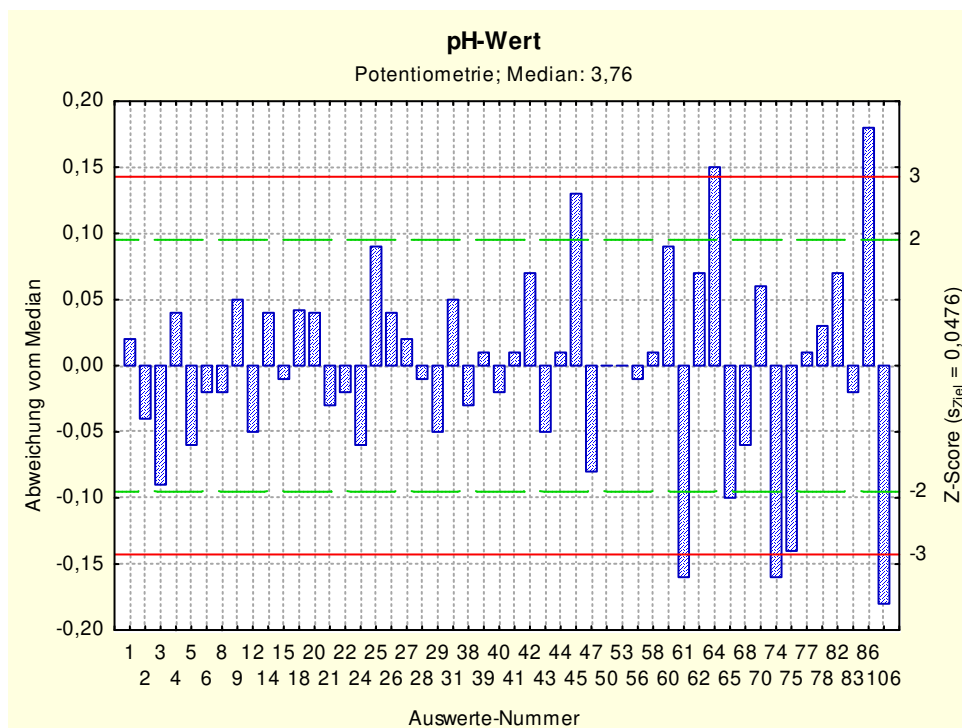
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
284	FTIR	3,63	-0,130	-2,64	
285	FTIR	3,75	-0,010	-0,20	
287	FTIR	3,59	-0,170	-3,45	
288	FTIR	3,53	-0,230	-4,67	
320	FTIR	3,82	0,060	1,22	
337	FTIR	3,79	0,030	0,61	
365	FTIR	3,69	-0,070	-1,42	

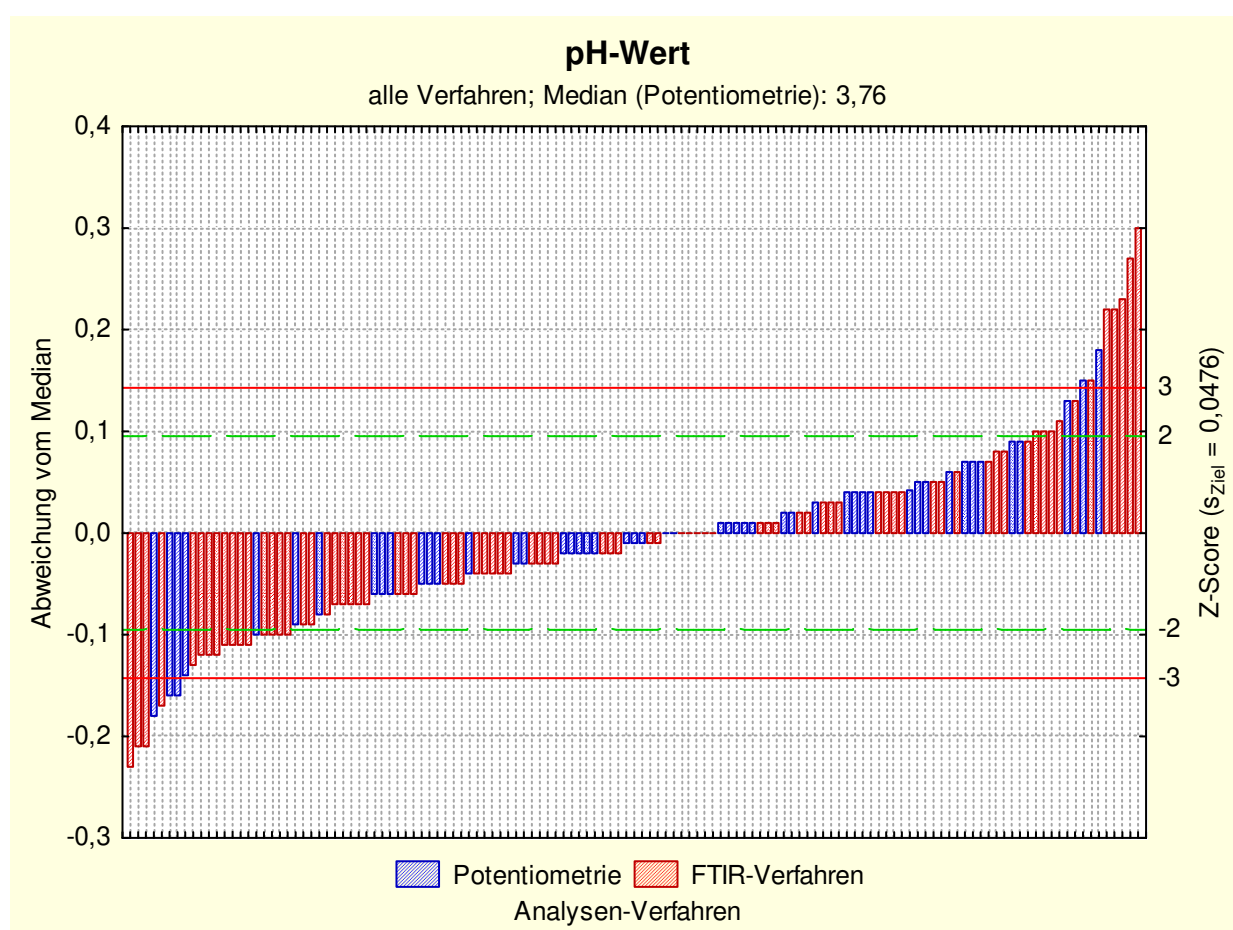
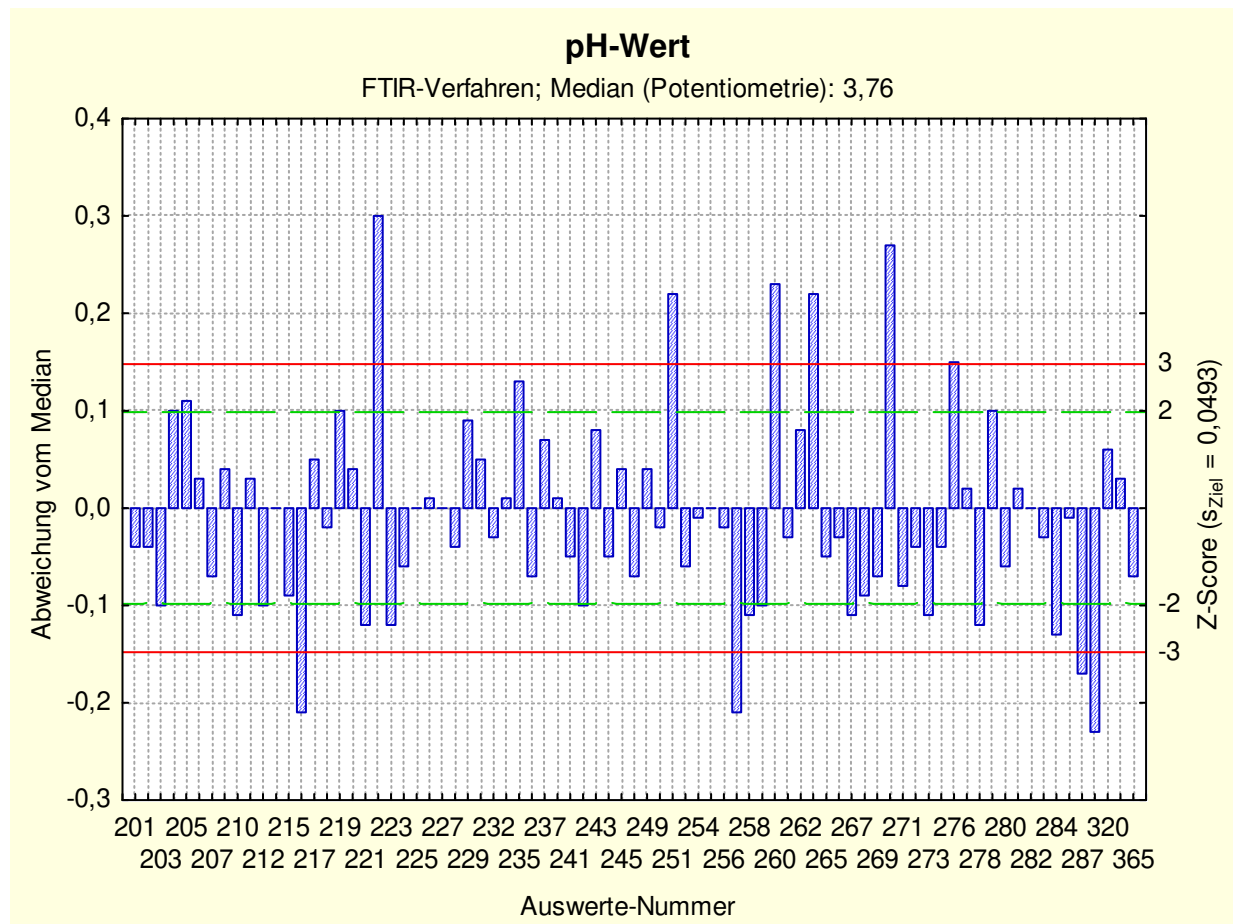
**6.8.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	50
Minimalwert	3,58
Mittelwert	3,757
Median	3,760
Maximalwert	3,94
Standardabweichung (S <sub>L</sub> )	0,0746
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0106
Zielstandardabweichung n. Horwitz (S <sub>H</sub> )	
Zielstandardabweichung, experimentell (S <sub>exp herk.</sub> )	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (S <sub>FTIR</sub> )	0,0493
Horvat-Wert (S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub> )	
Quotient (S <sub>L</sub> /S <sub>exp herk.</sub> )	1,57
Quotient (S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub> )	1,51
Quotient (u <sub>M</sub> /S <sub>H</sub> )	
Quotient (u <sub>M</sub> /S <sub>exp herk.</sub> )	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub> )	0,21

**6.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	50	3,759	0,066
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	3,744	0,089





**6.9 Gesamtsäure [g/L]****6.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	6,51	-0,095	-0,34	-0,89	
02	LwK 5.2.1	6,52	-0,085	-0,30	-0,79	
04	LwK 5.2.1	6,75	0,145	0,52	1,35	
05	LwK 5.1	6,59	-0,015	-0,05	-0,14	
06	LwK 5.2.1	6,57	-0,035	-0,12	-0,33	
07	LwK 5.2.1	6,68	0,075	0,27	0,70	
08	LwK 5.2.1	6,62	0,015	0,05	0,14	
09	LwK 5.2.1	6,57	-0,035	-0,12	-0,33	
12	LwK 5.1	6,80	0,195	0,69	1,82	
14	LwK 5.1	6,97	0,365	1,30	3,41	
15	LwK 5.2.1	6,55	-0,055	-0,20	-0,51	
18	LwK 5.2.1	6,79	0,185	0,66	1,73	
19	LwK 5.1	6,45	-0,155	-0,55	-1,45	
20	LwK 5.1	6,49	-0,115	-0,41	-1,07	
21	LwK 5.1	6,47	-0,135	-0,48	-1,26	
22	LwK 5.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
23	LwK 5.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
24	LwK 5.1	6,76	0,155	0,55	1,45	
25	LwK 5.1	6,63	0,025	0,09	0,23	
26	LwK 5.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
27	LwK 5.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
28	LwK 5.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
29	LwK 5.2.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
31	LwK 5.1	6,50	-0,105	-0,37	-0,98	
38	LwK 5.1	6,54	-0,069	-0,25	-0,64	
39	LwK 5.2.1	6,58	-0,025	-0,09	-0,23	
40	LwK 5.1	6,66	0,055	0,20	0,51	
41	LwK 5.1	6,75	0,145	0,52	1,35	
42	LwK 5.1	6,48	-0,125	-0,44	-1,17	
43	LwK 5.1	6,80	0,195	0,69	1,82	
44	LwK 5.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
45	LwK 5.1	6,50	-0,105	-0,37	-0,98	
47	LwK 5.2.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
48	LwK 5.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
50	LwK 5.1	6,50	-0,105	-0,37	-0,98	
52	LwK 5.2.1	6,75	0,145	0,52	1,35	
53	LwK 5.2.1	6,70	0,095	0,34	0,89	
55	LwK 5.2.1	7,10	0,495	1,76	4,62	
56	LwK 5.2.1	6,63	0,025	0,09	0,23	
58	LwK 5.1	6,65	0,045	0,16	0,42	
60	LwK 5.2.1	6,69	0,085	0,30	0,79	
61	LwK 5.1	6,40	-0,205	-0,73	-1,91	
62	LwK 5.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
64	LwK 5.2.1	7,25	0,645	2,29	6,02	(**)
65	LwK 5.1	6,74	0,135	0,48	1,26	
68	LwK 5.1	6,80	0,195	0,69	1,82	
70	LwK 5.1	6,79	0,185	0,66	1,73	
74	LwK 5.1	6,16	-0,445	-1,58	-4,15	
75	LwK 5.1	6,30	-0,305	-1,08	-2,85	
77	LwK 5.2.2	6,50	-0,105	-0,37	-0,98	
78	LwK 5.2.2	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	
82	LwK 5.1	6,53	-0,075	-0,27	-0,70	
83	LwK 5.2.2	6,70	0,095	0,34	0,89	
86	LwK 5.1	7,70	1,095	3,89	10,22	(**)
90	LwK 5.2.1	6,61	0,005	0,02	0,05	
106	LwK 5.1	6,60	-0,005	-0,02	-0,05	

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

**6.9.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,58	-0,030	-0,11	-0,21	
202	LwK 5.3	6,79	0,180	0,64	1,24	
203	LwK 5.3	6,62	0,010	0,04	0,07	
204	LwK 5.3	6,88	0,270	0,96	1,86	
205	LwK 5.3	6,74	0,130	0,46	0,90	
206	LwK 5.3	6,74	0,130	0,46	0,90	
207	LwK 5.3	6,50	-0,110	-0,39	-0,76	
208	LwK 5.3	6,89	0,280	1,00	1,93	
210	LwK 5.3	6,36	-0,250	-0,89	-1,72	
211	LwK 5.3	6,75	0,140	0,50	0,97	
212	LwK 5.3	6,74	0,130	0,46	0,90	
214	LwK 5.3	6,90	0,290	1,03	2,00	
215	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
216	LwK 5.3	7,07	0,460	1,63	3,17	
217	LwK 5.3	6,57	-0,040	-0,14	-0,28	
218	LwK 5.3	6,74	0,130	0,46	0,90	
219	LwK 5.3	7,10	0,490	1,74	3,38	
220	LwK 5.3	6,55	-0,060	-0,21	-0,41	
221	LwK 5.3	6,47	-0,140	-0,50	-0,97	
223	LwK 5.3	6,60	-0,010	-0,04	-0,07	
224	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
225	LwK 5.3	6,73	0,120	0,43	0,83	
226	LwK 5.3	6,42	-0,190	-0,68	-1,31	
227	LwK 5.3	6,75	0,140	0,50	0,97	
228	LwK 5.3	6,36	-0,250	-0,89	-1,72	
229	LwK 5.3	6,67	0,060	0,21	0,41	
231	LwK 5.3	6,45	-0,160	-0,57	-1,10	
232	LwK 5.3	6,75	0,140	0,50	0,97	
234	LwK 5.3	6,61	0,000	0,00	0,00	
235	LwK 5.3	6,30	-0,310	-1,10	-2,14	
236	LwK 5.3	6,60	-0,010	-0,04	-0,07	
237	LwK 5.3	6,71	0,100	0,36	0,69	
240	LwK 5.3	6,80	0,190	0,68	1,31	
241	LwK 5.3	6,90	0,290	1,03	2,00	
242	LwK 5.3	6,67	0,060	0,21	0,41	
243	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
244	LwK 5.3	6,75	0,140	0,50	0,97	
245	LwK 5.3	7,14	0,530	1,88	3,66	
246	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
247	LwK 5.3	6,68	0,070	0,25	0,48	
248	LwK 5.3	6,69	0,080	0,28	0,55	
249	LwK 5.3	6,80	0,190	0,68	1,31	
250	LwK 5.3	6,76	0,150	0,53	1,03	
251	LwK 5.3	7,04	0,430	1,53	2,97	
252	LwK 5.3	6,75	0,140	0,50	0,97	
254	LwK 5.3	6,90	0,290	1,03	2,00	
255	LwK 5.3	6,90	0,290	1,03	2,00	
256	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
257	LwK 5.3	6,93	0,320	1,14	2,21	
258	LwK 5.3	7,00	0,390	1,39	2,69	
259	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
260	LwK 5.3	6,40	-0,210	-0,75	-1,45	
261	LwK 5.3	6,60	-0,010	-0,04	-0,07	
262	LwK 5.3	6,40	-0,210	-0,75	-1,45	
263	LwK 5.3	6,65	0,040	0,14	0,28	
264	LwK 5.3	7,20	0,590	2,10	4,07	
265	LwK 5.3	6,60	-0,010	-0,04	-0,07	
266	LwK 5.3	6,41	-0,200	-0,71	-1,38	
267	LwK 5.3	6,50	-0,110	-0,39	-0,76	
268	LwK 5.3	7,12	0,510	1,81	3,52	
269	LwK 5.3	6,42	-0,190	-0,68	-1,31	
270	LwK 5.3	6,45	-0,160	-0,57	-1,10	
271	LwK 5.3	6,42	-0,190	-0,68	-1,31	
272	LwK 5.3	6,51	-0,100	-0,36	-0,69	
273	LwK 5.3	6,42	-0,190	-0,68	-1,31	
275	LwK 5.3	6,82	0,210	0,75	1,45	
276	LwK 5.3	6,50	-0,110	-0,39	-0,76	



**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	LwK 5.3	6,51	-0,100	-0,36	-0,69	
278	LwK 5.3	6,76	0,150	0,53	1,03	
279	LwK 5.3	6,00	-0,610	-2,17	-4,21	
280	LwK 5.3	6,76	0,150	0,53	1,03	
281	LwK 5.3	6,80	0,190	0,68	1,31	
282	LwK 5.3	6,40	-0,210	-0,75	-1,45	
283	LwK 5.3	6,90	0,290	1,03	2,00	
284	LwK 5.3	6,60	-0,010	-0,04	-0,07	
285	LwK 5.3	6,76	0,150	0,53	1,03	
287	LwK 5.3	6,69	0,080	0,28	0,55	
288	LwK 5.3	6,83	0,220	0,78	1,52	
311	LwK 5.3	6,49	-0,120	-0,43	-0,83	
320	LwK 5.3	6,44	-0,170	-0,60	-1,17	
337	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	
365	LwK 5.3	6,70	0,090	0,32	0,62	

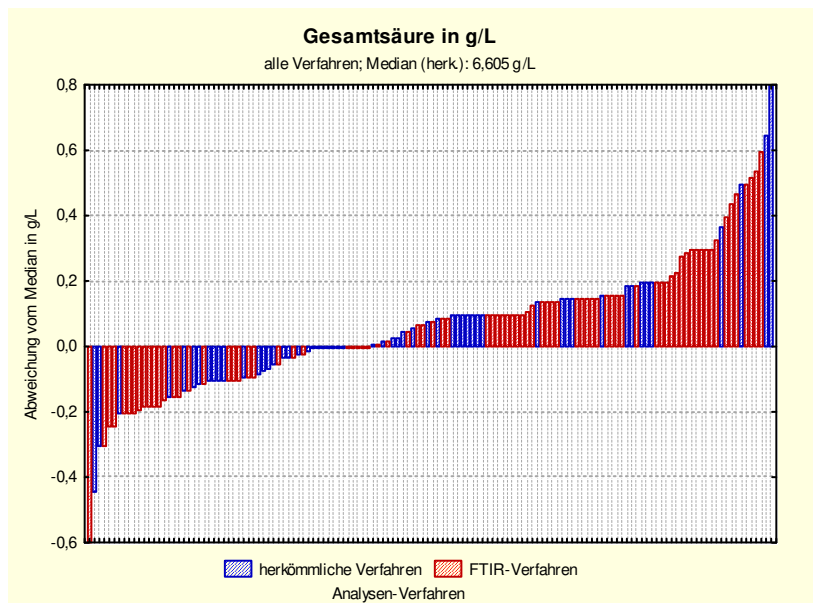
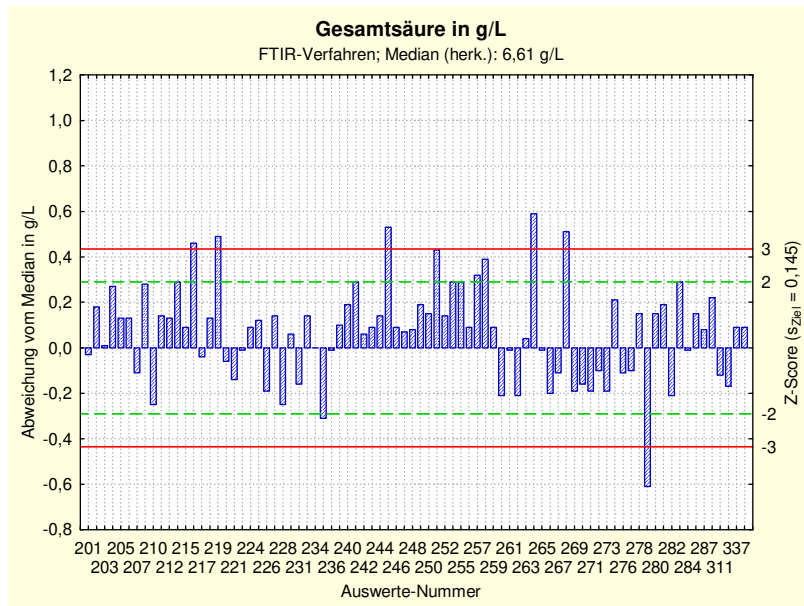
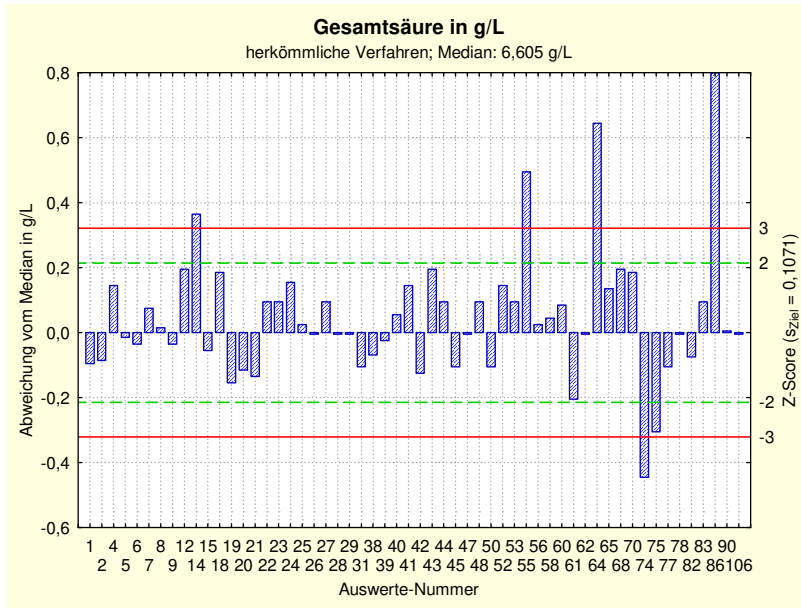
**6.9.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	56	54
Minimalwert	6,16	6,16
Mittelwert	6,656	6,625
Median	6,615	6,605
Maximalwert	7,70	7,10
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,222	0,151
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,030	0,021
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,282	0,281
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,145	0,145
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,79	0,54
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,07	1,41
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	1,53	1,04
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,11	0,07
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,28	0,19
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,20	0,14

**6.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	34	6,624	0,157
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01, - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	19	6,649	0,109
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	3	6,600	0,113
	herkömmliche Verfahren	56	6,634	0,135
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	6,676	0,199





**6.10 Weinsäure [g/L]****6.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,45	-0,040	-0,50	
02	HPLC	1,35	-0,140	-1,76	
04	photometr.	1,49	0,000	0,00	
05	HPLC	1,45	-0,040	-0,50	
07	HPLC	1,50	0,010	0,13	
08	HPLC	1,45	-0,040	-0,50	
09	photometr., autom.	1,14	-0,350	-4,41	
12	photometr., autom.	1,50	0,010	0,13	
15	photometr., autom.	1,50	0,010	0,13	
18	IC	1,40	-0,090	-1,13	
20	HPLC	1,46	-0,030	-0,38	
21	HPLC	5,11	3,620	45,61	(*)
22	HPLC	1,57	0,080	1,01	
24	HPLC	1,59	0,100	1,26	
26	HPLC	1,65	0,160	2,02	
29	photometr., autom.	1,56	0,070	0,88	
31	photometr., autom.	1,39	-0,100	-1,26	
38	photometr., autom.	1,63	0,140	1,76	
40	photometr., autom.	1,44	-0,050	-0,63	
45	photometr., autom.	1,50	0,010	0,13	
47	photometr.	1,26	-0,230	-2,90	
48	photometr., autom.	1,93	0,440	5,54	(**)
50	photometr., autom.	1,40	-0,090	-1,13	
53	photometr., autom.	1,50	0,010	0,13	
56	photometr., autom.	1,73	0,240	3,02	
58	photometr., autom.	1,30	-0,190	-2,39	
61	photometr., autom.	1,80	0,310	3,91	
64	HPLC	1,70	0,210	2,65	
82	photometr.	2,06	0,570	7,18	(**)
90	HPLC	1,74	0,250	3,15	
92	HPLC	1,40	-0,093	-1,17	
95	photometr., autom.	1,24	-0,250	-3,15	
111	NMR	1,42	-0,070	-0,88	
112	NMR	1,51	0,021	0,26	
113	NMR	1,49	0,003	0,04	
114	NMR	1,57	0,084	1,06	
115	NMR	1,39	-0,100	-1,26	
116	NMR	1,67	0,178	2,24	

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

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

**6.10.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,68	0,180	2,25	0,79	
202	FTIR	1,31	-0,190	-2,38	-0,84	
203	FTIR	1,23	-0,270	-3,38	-1,19	
204	FTIR	1,07	-0,430	-5,39	-1,89	
205	FTIR	1,80	0,300	3,76	1,32	
207	FTIR	1,50	0,000	0,00	0,00	
208	FTIR	1,48	-0,020	-0,25	-0,09	
210	FTIR	1,49	-0,010	-0,13	-0,04	
211	FTIR	1,56	0,060	0,75	0,26	
212	FTIR	1,46	-0,040	-0,50	-0,18	
214	FTIR	0,80	-0,700	-8,77	-3,08	
215	FTIR	1,80	0,300	3,76	1,32	
216	FTIR	1,40	-0,100	-1,25	-0,44	
217	FTIR	1,83	0,330	4,13	1,45	
218	FTIR	1,71	0,210	2,63	0,93	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	1,90	0,400	5,01	1,76	
220	FTIR	1,61	0,110	1,38	0,48	
221	FTIR	1,70	0,200	2,51	0,88	
222	FTIR	1,49	-0,010	-0,13	-0,04	
223	FTIR	1,60	0,100	1,25	0,44	
224	FTIR	1,49	-0,010	-0,13	-0,04	
226	FTIR	1,20	-0,300	-3,76	-1,32	
227	FTIR	1,84	0,340	4,26	1,50	
228	FTIR	1,39	-0,110	-1,38	-0,48	
229	FTIR	1,81	0,310	3,88	1,37	
231	FTIR	1,39	-0,110	-1,38	-0,48	
232	FTIR	1,62	0,120	1,50	0,53	
234	FTIR	1,75	0,250	3,13	1,10	
235	FTIR	1,00	-0,500	-6,26	-2,20	
236	FTIR	1,20	-0,300	-3,76	-1,32	
237	FTIR	1,72	0,220	2,76	0,97	
240	FTIR	1,63	0,130	1,63	0,57	
241	FTIR	1,21	-0,290	-3,63	-1,28	
242	FTIR	1,30	-0,200	-2,51	-0,88	
243	FTIR	1,24	-0,260	-3,26	-1,15	
244	FTIR	1,48	-0,020	-0,25	-0,09	
245	FTIR	1,63	0,130	1,63	0,57	
247	FTIR	0,74	-0,760	-9,52	-3,35	
249	FTIR	1,90	0,400	5,01	1,76	
250	FTIR	1,64	0,140	1,75	0,62	
252	FTIR	1,47	-0,030	-0,38	-0,13	
254	FTIR	1,60	0,100	1,25	0,44	
256	FTIR	2,09	0,590	7,39	2,60	
257	FTIR	1,58	0,080	1,00	0,35	
258	FTIR	1,90	0,400	5,01	1,76	
259	FTIR	1,90	0,400	5,01	1,76	
260	FTIR	2,00	0,500	6,26	2,20	
261	FTIR	1,90	0,400	5,01	1,76	
262	FTIR	1,80	0,300	3,76	1,32	
265	FTIR	2,00	0,500	6,26	2,20	
266	FTIR	1,19	-0,310	-3,88	-1,37	
267	FTIR	1,50	0,000	0,00	0,00	
268	FTIR	1,98	0,480	6,01	2,11	
269	FTIR	1,66	0,160	2,00	0,70	
270	FTIR	3,12	1,620	20,29	7,14	(*)
271	FTIR	1,59	0,090	1,13	0,40	
272	FTIR	1,45	-0,050	-0,63	-0,22	
273	FTIR	1,58	0,080	1,00	0,35	
275	FTIR	1,53	0,030	0,38	0,13	
276	FTIR	1,60	0,100	1,25	0,44	
277	FTIR	1,75	0,250	3,13	1,10	
278	FTIR	1,40	-0,100	-1,25	-0,44	
279	FTIR	1,40	-0,100	-1,25	-0,44	
280	FTIR	1,79	0,290	3,63	1,28	
281	FTIR	1,58	0,080	1,00	0,35	
282	FTIR	1,20	-0,300	-3,76	-1,32	
284	FTIR	1,80	0,300	3,76	1,32	
285	FTIR	1,74	0,240	3,01	1,06	
287	FTIR	0,81	-0,690	-8,64	-3,04	
288	FTIR	0,54	-0,960	-12,03	-4,23	
320	FTIR	1,45	-0,050	-0,63	-0,22	
337	FTIR	0,85	-0,650	-8,14	-2,86	
365	FTIR	2,20	0,700	8,77	3,08	

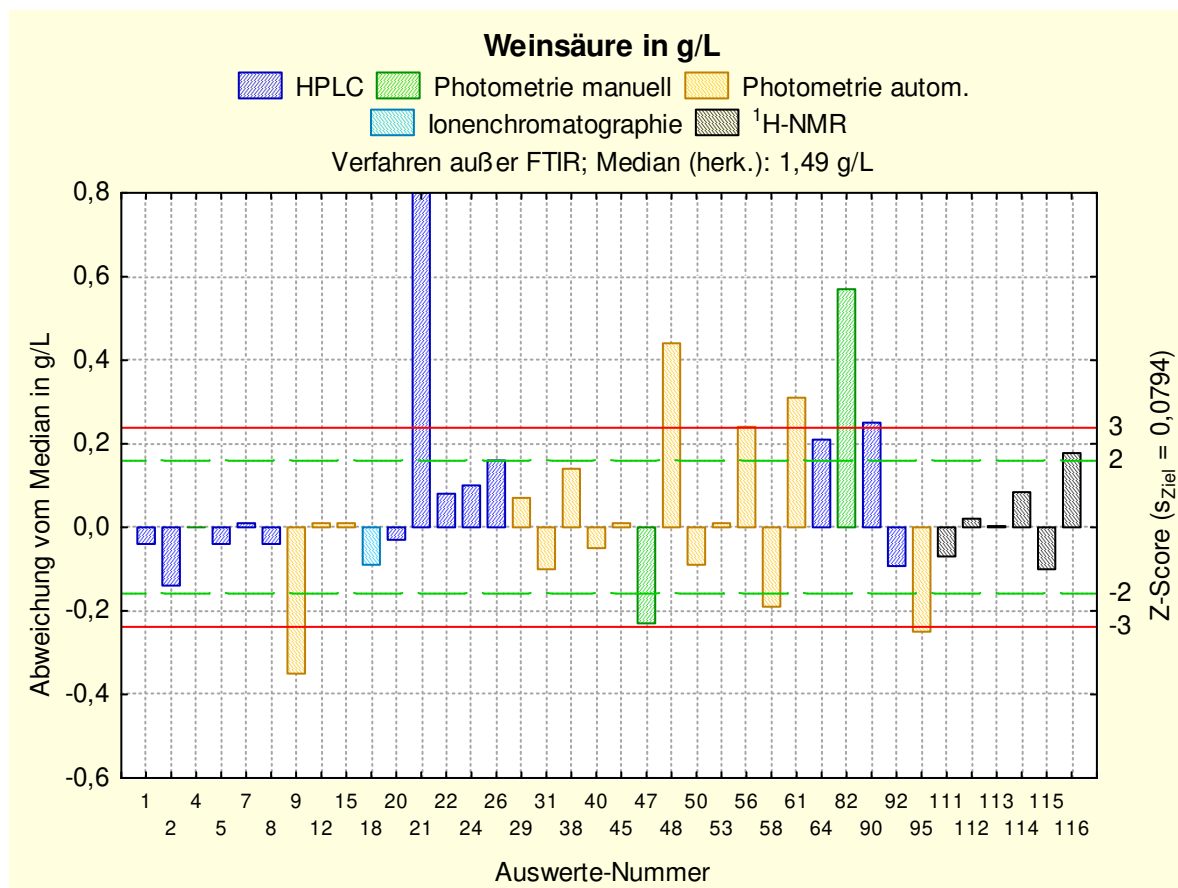
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

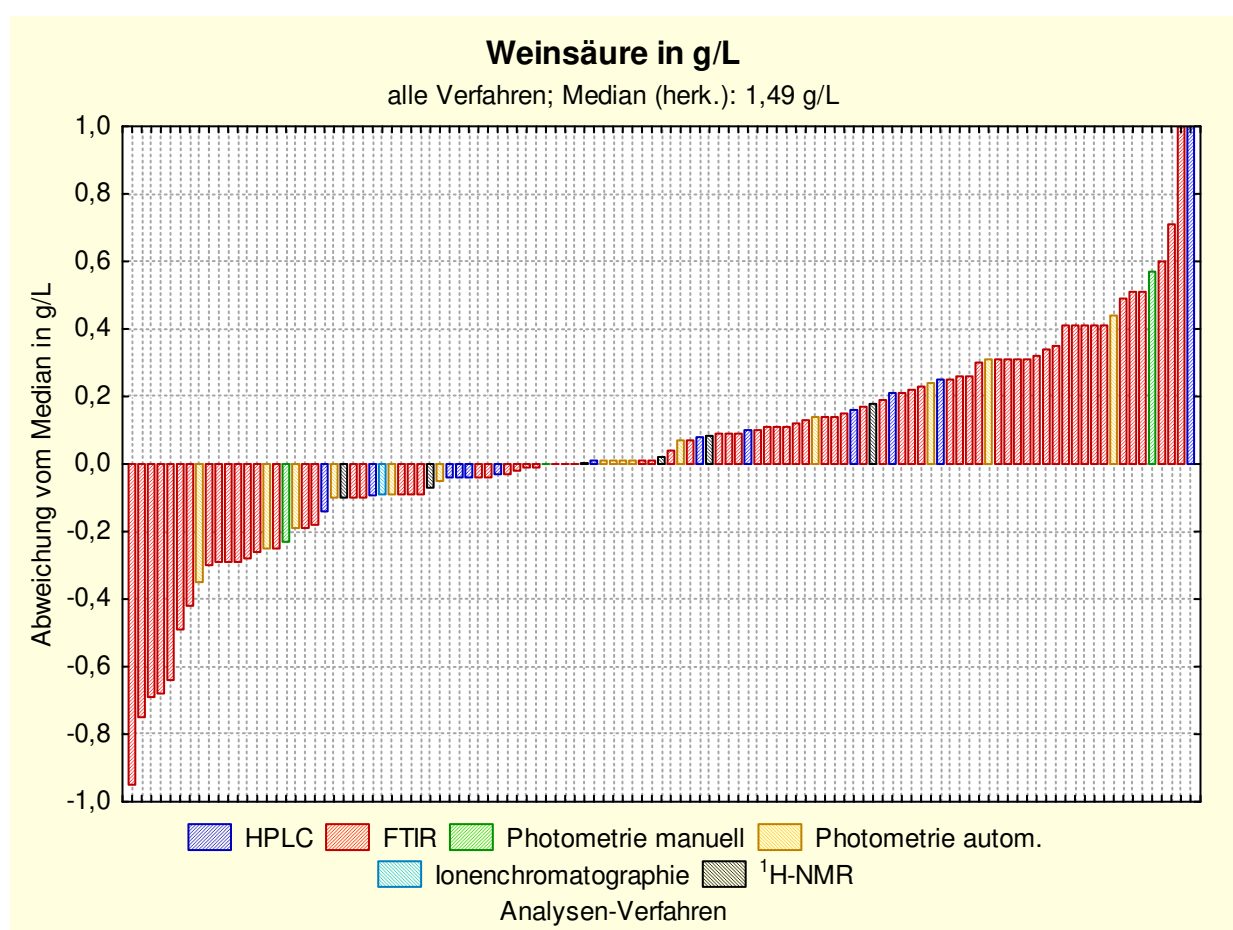
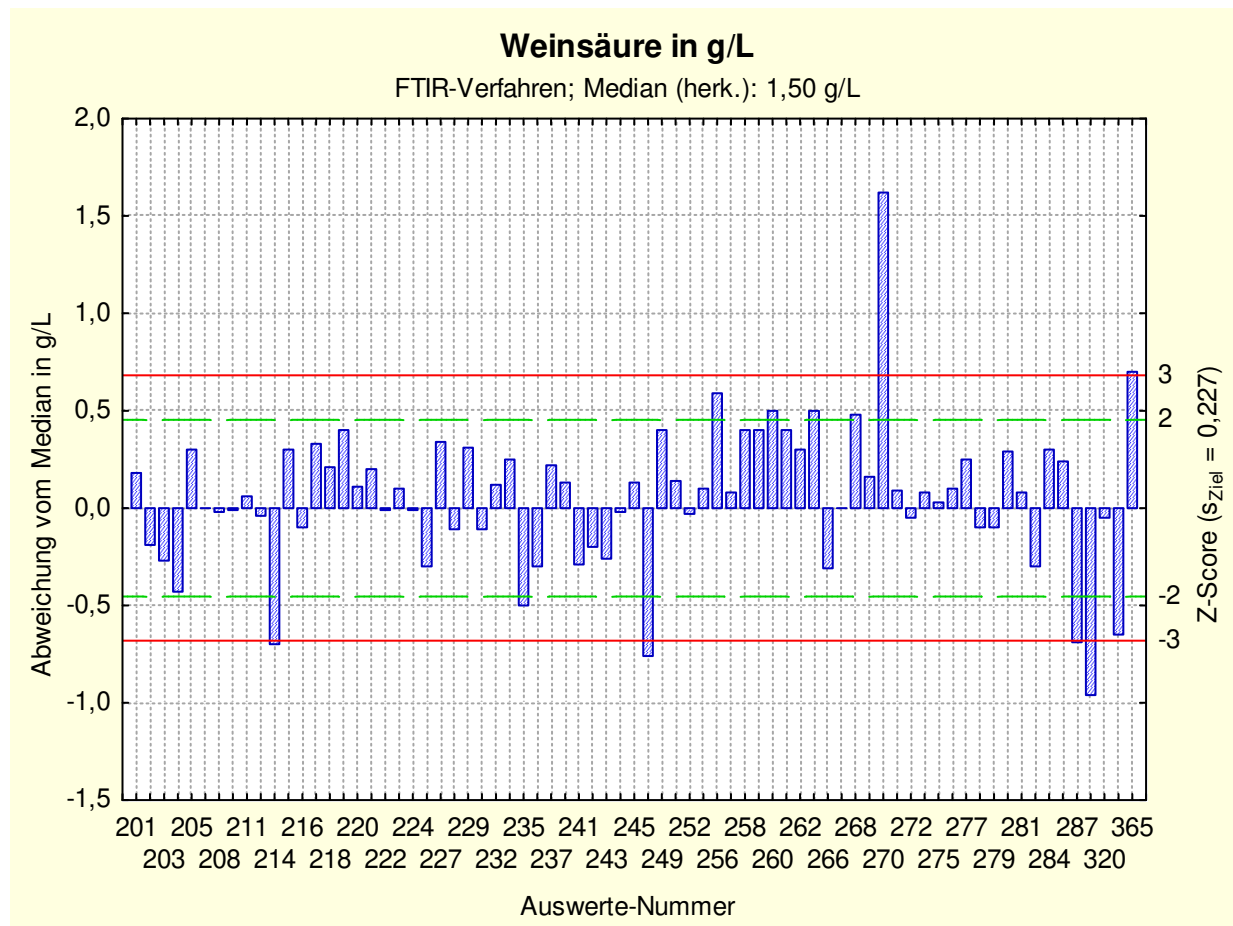
### 6.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC	herk. Verfahren	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	13	31	29
Minimalwert	1,35	1,14	1,14
Mittelwert	1,516	1,519	1,486
Median	1,460	1,500	1,490
Maximalwert	1,74	2,06	1,80
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,123	0,196	0,154
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,034	0,035	0,029
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,078	0,080	0,079
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )			
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,227	0,227	0,227
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,58	2,46	1,94
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,54	0,87	0,68
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,44	0,44	0,36
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,15	0,16	0,13

### 6.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	13	1,541	0,148
IC	Ionenchromatographie	1	1,400	
	HPLC + IC	14	1,531	0,149
photometr.	photometrisch n. Rebelein	3	1,584	0,430
phot. autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	15	1,500	0,212
	alle herkömmlichen Verfahren	32	1,518	0,189
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	1,564	0,302
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,509	0,115





## 6.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 6.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,530	0,1250	4,76	4,38	
02	OIV SO2-korr.	0,285	-0,1200	-4,57	-4,20	
04	OIV SO2-korr.	0,460	0,0550	2,10	1,92	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,378	-0,0270	-1,03	-0,95	
07	OIV o. SO2-korr.	0,450	0,0450	1,71	1,57	
08	OIV SO2-korr.	0,372	-0,0330	-1,26	-1,16	
09	OIV SO2-korr.	0,353	-0,0520	-1,98	-1,82	
18	IC	1,250	0,8450	32,19	29,57	(*)
21	Halbmikro SO2 unber.	0,490	0,0850	3,24	2,97	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,350	-0,0550	-2,10	-1,93	
27	Halbmikro SO2 unber.	0,496	0,0910	3,47	3,18	
28	Wädenswil SO2 korr.	0,410	0,0050	0,19	0,17	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0450	1,71	1,57	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,526	0,1210	4,61	4,24	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,388	-0,0170	-0,65	-0,60	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,435	0,0300	1,14	1,05	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,430	0,0250	0,95	0,87	
43	Gerhardt SO2 korr.	0,300	-0,1050	-4,00	-3,68	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,400	-0,0050	-0,19	-0,18	
45	Gerhardt SO2 korr.	0,600	0,1950	7,43	6,82	(**)
47	Gerhardt SO2 korr.	0,460	0,0550	2,10	1,92	
53	Gerhardt SO2 korr.	0,650	0,2450	9,33	8,58	(*)
55	Gerhardt SO2 korr.	0,550	0,1450	5,52	5,08	
56	Rentschler mod. korr.	0,356	-0,0490	-1,87	-1,72	
58	OIV SO2-korr.	0,420	0,0150	0,57	0,52	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,370	-0,0350	-1,33	-1,23	
64	OIV SO2-korr.	0,500	0,0950	3,62	3,32	
65	Halbmikro SO2 unber.	0,640	0,2350	8,95	8,23	(*)
68	Halbmikro SO2 unber.	0,570	0,1650	6,29	5,77	(**)
69	Wädenswil SO2 unber.	0,500	0,0950	3,62	3,32	
70	Gerhardt SO2 korr.	0,520	0,1150	4,38	4,03	
74	Wädensw. SO2 ausg.	0,410	0,0050	0,19	0,17	
82	Halbmikro SO2 korr.	0,290	-0,1150	-4,38	-4,03	
83	Halbmikro SO2 unber.	0,460	0,0550	2,10	1,92	
86	Wasserdampfdest.	0,580	0,1750	6,67	6,12	(**)
90	OIV SO2-korr.	0,410	0,0054	0,21	0,19	
98	Halbmikro SO2 ausg.	0,361	-0,0440	-1,68	-1,54	
106	Halbmikro SO2 unber.	0,700	0,2950	11,24	10,32	(*)

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

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

### 6.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,510	0,1000	3,77	1,12	
202	FTIR	0,474	0,0640	2,41	0,72	
204	FTIR	0,420	0,0100	0,38	0,11	
205	FTIR	0,600	0,1900	7,16	2,13	
207	FTIR	0,440	0,0300	1,13	0,34	
208	FTIR	0,332	-0,0780	-2,94	-0,88	
210	FTIR	0,500	0,0900	3,39	1,01	
212	FTIR	0,320	-0,0900	-3,39	-1,01	
214	FTIR	0,550	0,1400	5,28	1,57	
215	FTIR	0,390	-0,0200	-0,75	-0,22	
216	FTIR	0,440	0,0300	1,13	0,34	
217	FTIR	0,510	0,1000	3,77	1,12	
218	FTIR	0,490	0,0800	3,02	0,90	
219	FTIR	0,260	-0,1500	-5,66	-1,68	



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	0,470	0,0600	2,26	0,67	
221	FTIR	0,560	0,1500	5,66	1,68	
223	FTIR	0,580	0,1700	6,41	1,91	
224	FTIR	0,300	-0,1100	-4,15	-1,23	
225	FTIR	0,545	0,1350	5,09	1,52	
226	FTIR	0,320	-0,0900	-3,39	-1,01	
227	FTIR	0,690	0,2800	10,56	3,14	
228	FTIR	0,370	-0,0400	-1,51	-0,45	
229	FTIR	0,406	-0,0040	-0,15	-0,04	
231	FTIR	0,440	0,0300	1,13	0,34	
232	FTIR	0,450	0,0400	1,51	0,45	
234	FTIR	0,450	0,0400	1,51	0,45	
235	FTIR	0,550	0,1400	5,28	1,57	
236	FTIR	0,400	-0,0100	-0,38	-0,11	
237	FTIR	0,650	0,2400	9,05	2,69	
240	FTIR	0,590	0,1800	6,79	2,02	
241	FTIR	0,610	0,2000	7,54	2,24	
242	FTIR	0,540	0,1300	4,90	1,46	
243	FTIR	0,500	0,0900	3,39	1,01	
244	FTIR	0,330	-0,0800	-3,02	-0,90	
245	FTIR	0,720	0,3100	11,69	3,48	
246	FTIR	0,590	0,1800	6,79	2,02	
247	FTIR	0,410	0,0000	0,00	0,00	
249	FTIR	0,370	-0,0400	-1,51	-0,45	
250	FTIR	0,530	0,1200	4,52	1,35	
251	FTIR	0,620	0,2100	7,92	2,36	
252	FTIR	0,360	-0,0500	-1,89	-0,56	
254	FTIR	0,540	0,1300	4,90	1,46	
255	FTIR	0,570	0,1600	6,03	1,80	
256	FTIR	0,360	-0,0500	-1,89	-0,56	
257	FTIR	0,620	0,2100	7,92	2,36	
258	FTIR	0,440	0,0300	1,13	0,34	
260	FTIR	0,300	-0,1100	-4,15	-1,23	
261	FTIR	0,650	0,2400	9,05	2,69	
262	FTIR	0,370	-0,0400	-1,51	-0,45	
264	FTIR	0,630	0,2200	8,29	2,47	
265	FTIR	0,490	0,0800	3,02	0,90	
266	FTIR	0,460	0,0500	1,89	0,56	
267	FTIR	0,540	0,1300	4,90	1,46	
268	FTIR	0,350	-0,0600	-2,26	-0,67	
269	FTIR	0,450	0,0400	1,51	0,45	
270	FTIR	0,430	0,0200	0,75	0,22	
271	FTIR	0,530	0,1200	4,52	1,35	
272	FTIR	0,460	0,0500	1,89	0,56	
273	FTIR	0,480	0,0700	2,64	0,79	
275	FTIR	0,350	-0,0600	-2,26	-0,67	
276	FTIR	0,340	-0,0700	-2,64	-0,79	
277	FTIR	0,430	0,0200	0,75	0,22	
278	FTIR	0,180	-0,2300	-8,67	-2,58	
279	FTIR	0,300	-0,1100	-4,15	-1,23	
280	FTIR	0,570	0,1600	6,03	1,80	
281	FTIR	0,290	-0,1200	-4,52	-1,35	
282	FTIR	0,390	-0,0200	-0,75	-0,22	
283	FTIR	0,350	-0,0600	-2,26	-0,67	
284	FTIR	0,710	0,3000	11,31	3,37	
285	FTIR	0,520	0,1100	4,15	1,23	
287	FTIR	0,650	0,2400	9,05	2,69	
288	FTIR	0,570	0,1600	6,03	1,80	
320	FTIR	0,660	0,2500	9,43	2,81	
337	FTIR	0,360	-0,0500	-1,89	-0,56	
365	FTIR	0,540	0,1300	4,90	1,46	

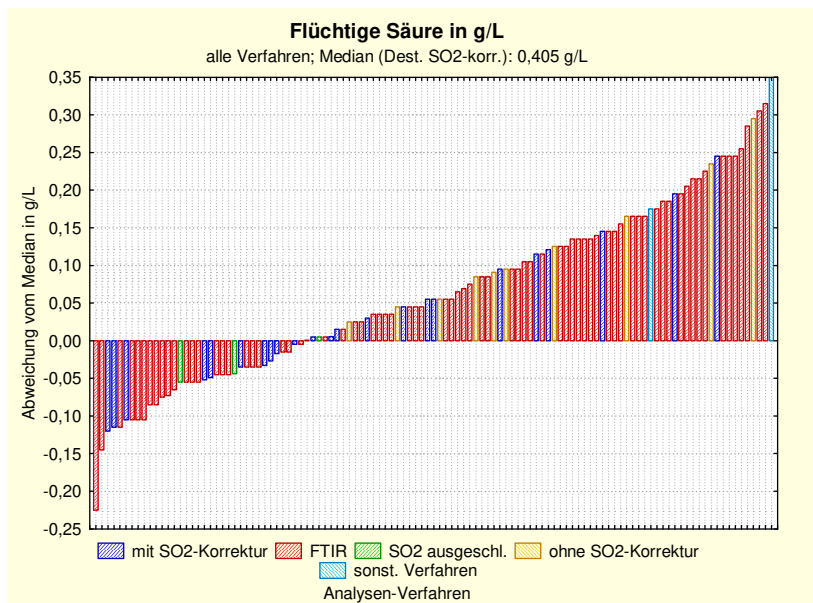
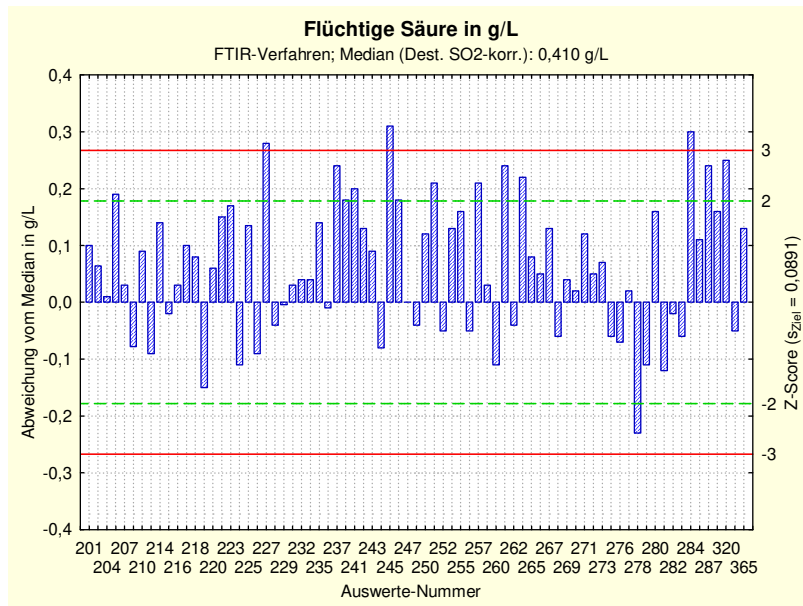
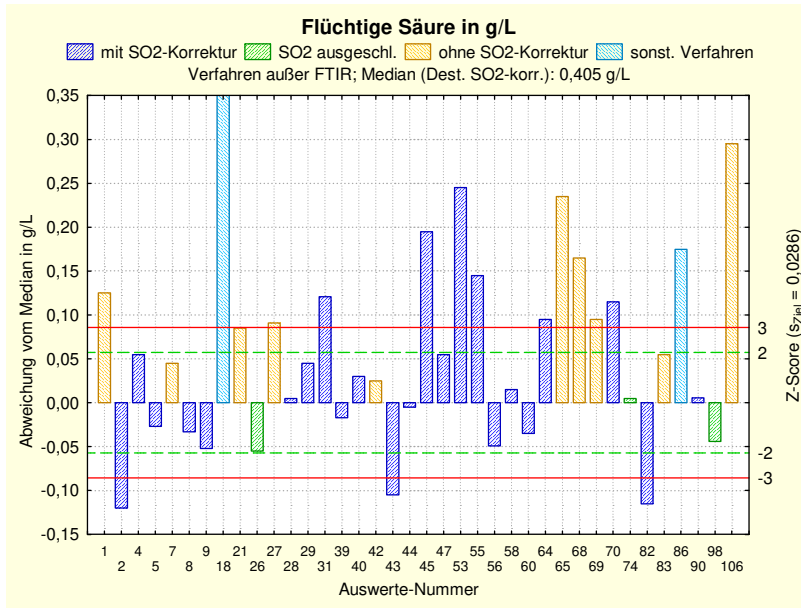
**6.11.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	25	24
Minimalwert	0,285	0,285
Mittelwert	0,4142	0,4064
Median	0,4100	0,4050
Maximalwert	0,600	0,550
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,080	0,072
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,016	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,027	0,026
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	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> )	3,03	2,74
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,81	2,52
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,90	0,81
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,61	0,56
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,56	0,51
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,18	0,17

**6.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	8	0,537	0,100
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,408	0,189
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,361	
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,500	
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,390	0,032
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,410	
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,350	
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	11	0,466	0,116
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO <sub>2</sub> korr.	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	7	0,400	0,080
SO <sub>2</sub> nicht korr.	ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,450	
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO <sub>2</sub> -korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,356	
IC	Ionenchromatographie (fehlerhafte Zuordnung)	1	1,250	
Wasserdampfdestillation	Wasserdampfdestillation ohne nähere Angaben	1	0,580	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	26	0,418	0,090
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,473	0,126





## 6.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 6.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,344	-0,026	-1,07	
10	enzymat. autom.	0,410	0,040	1,65	
12	enzymat. autom.	0,430	0,060	2,47	
14	enzymat. autom.	0,450	0,080	3,29	
15	enzymat. autom.	0,300	-0,070	-2,88	
29	enzymat. autom.	0,350	-0,020	-0,82	
38	enzymat. autom.	0,361	-0,009	-0,37	
42	enzymat. autom.	0,360	-0,010	-0,41	
44	enzymat. autom.	0,420	0,050	2,06	
45	enzymat. autom.	0,450	0,080	3,29	
47	enzymat. autom.	0,422	0,052	2,14	
48	enzymat. autom.	0,360	-0,010	-0,41	
50	enzymat. autom.	0,428	0,058	2,39	
53	enzymat. autom.	0,430	0,060	2,47	
56	enzymat. autom.	0,288	-0,082	-3,37	
58	enzymat. autom.	0,330	-0,040	-1,65	
61	enzymat. autom.	0,410	0,040	1,65	
70	enzymat. autom.	0,370	0,000	0,00	
92	enzymat. autom.	0,330	-0,040	-1,65	
95	enzymat. autom.	0,370	0,000	0,00	
105	enzymat. autom.	0,305	-0,066	-2,69	

### 6.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,310	0,010	0,49	
02	HPLC	0,360	0,060	2,95	
06	HPLC	0,436	0,136	6,69	(**)
20	HPLC	0,300	0,000	0,00	
22	HPLC	0,247	-0,053	-2,61	
24	HPLC	0,347	0,047	2,31	
64	HPLC	0,230	-0,070	-3,44	
90	HPLC	0,315	0,015	0,74	
111	NMR	0,278	-0,022	-1,08	
112	NMR	0,293	-0,007	-0,36	
113	NMR	0,310	0,010	0,50	
114	NMR	0,309	0,009	0,45	
115	NMR	0,270	-0,030	-1,47	
116	NMR	0,292	-0,008	-0,37	
208	FTIR	0,410	0,110	5,41	(***)
211	FTIR	0,430	0,130	6,39	(***)
222	FTIR	0,640	0,340	16,71	(*)
241	FTIR	0,280	-0,020	-0,98	
259	FTIR	0,460	0,160	7,87	(*)
260	FTIR	0,510	0,210	10,32	(*)

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

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

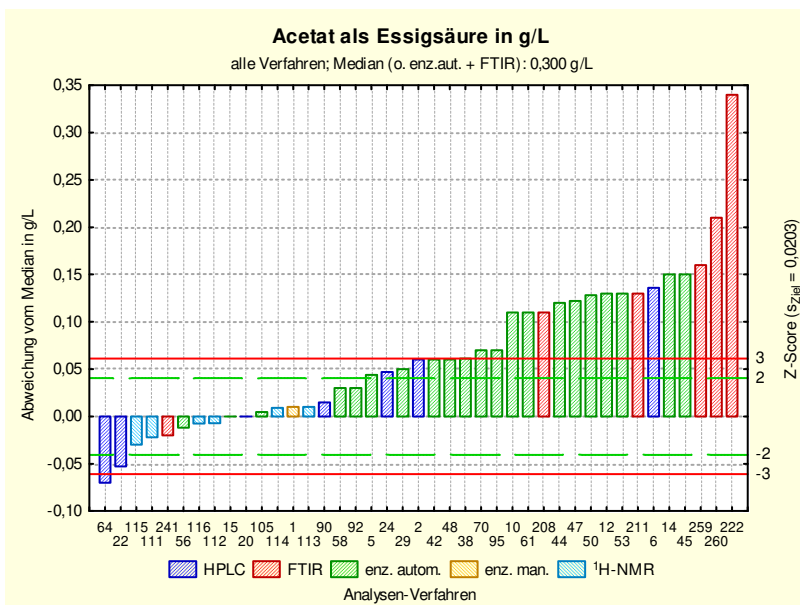
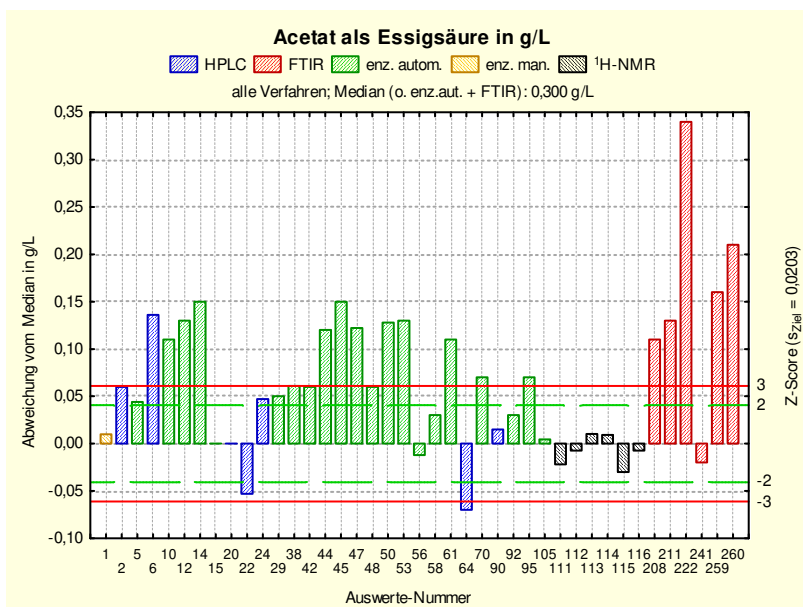
(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

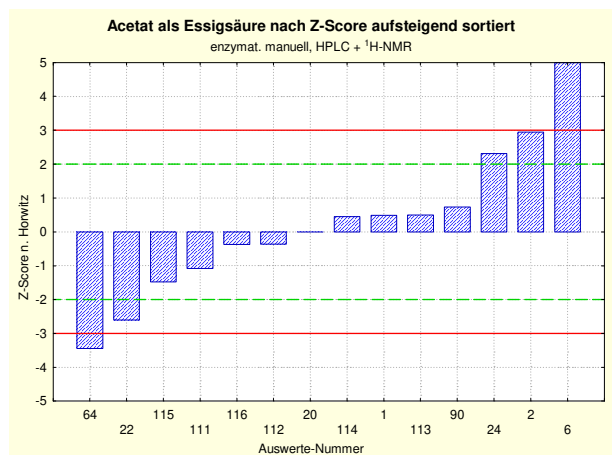
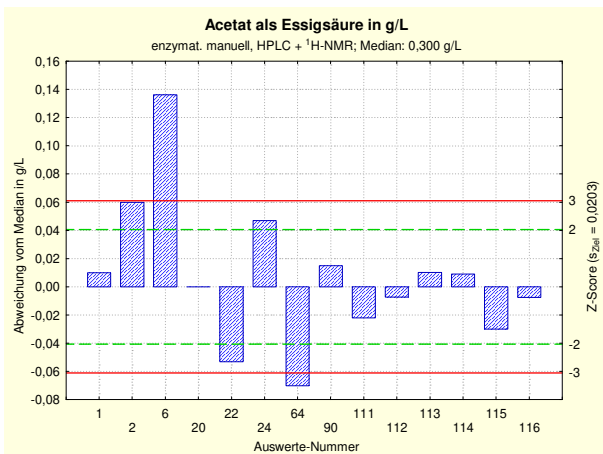
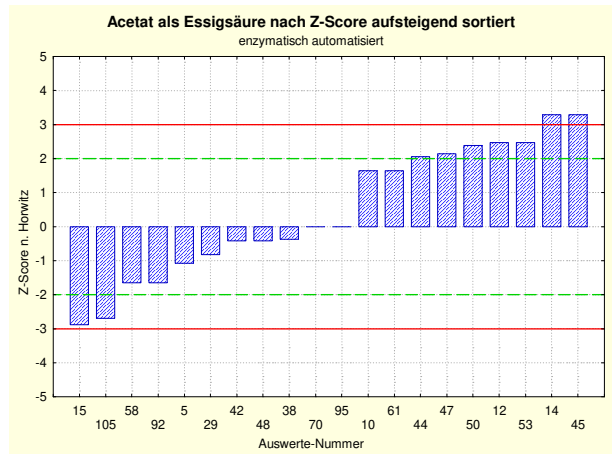
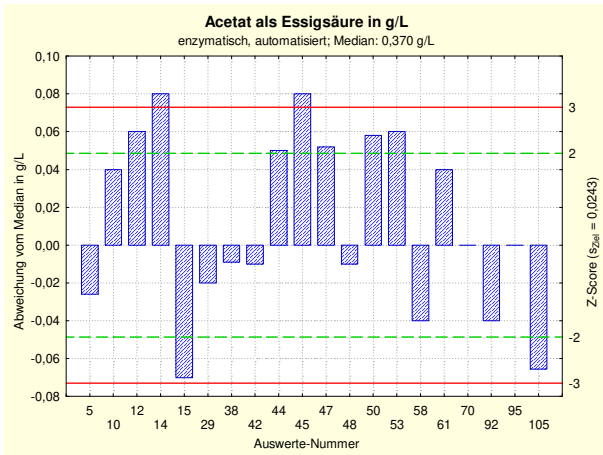
### 6.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	21	0,377	0,057
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	0,319	0,079
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,310	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	6	0,292	0,018
	HPLC, enzymatisch manuell + <sup>1</sup> H-NMR	14	0,303	0,042
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,456	0,124

### 6.12.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	HPLC, enz.man., <sup>1</sup> H-NMR	
		alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	20	14	13
Minimalwert	0,300	0,230	0,230
Mittelwert	0,381	0,307	0,297
Median	0,370	0,305	0,300
Maximalwert	0,450	0,436	0,360
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,048	0,051	0,036
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,011	0,014	0,010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,024	0,021	0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)			
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,95	2,46	1,76
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,44	0,66	0,49
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)			





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

### 6.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	4,88	-0,234	-1,03	-1,58	
02	HPLC	5,36	0,250	1,11	1,69	
05	HPLC	5,37	0,260	1,15	1,76	
07	HPLC	5,05	-0,060	-0,27	-0,41	
08	HPLC	5,19	0,080	0,35	0,54	
18	IC	6,21	1,100	4,86	7,45	(**)
20	HPLC	5,09	-0,020	-0,09	-0,14	
21	HPLC	5,11	0,000	0,00	0,00	
22	HPLC	5,65	0,540	2,39	3,66	
24	HPLC	4,91	-0,200	-0,88	-1,35	
26	HPLC	5,10	-0,010	-0,04	-0,07	
64	HPLC	3,41	-1,700	-7,52	-11,51	(**)
90	HPLC	4,96	-0,150	-0,66	-1,02	
92	HPLC	5,21	0,100	0,44	0,68	
101	IC	5,19	0,080	0,35	0,54	
111	NMR	4,95	-0,162	-0,72	-1,10	
112	NMR	5,17	0,063	0,28	0,42	
113	NMR	5,31	0,197	0,87	1,33	
114	NMR	5,25	0,142	0,63	0,96	
115	NMR	4,98	-0,130	-0,57	-0,88	
116	NMR	5,28	0,171	0,76	1,16	

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

### 6.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	4,88	-0,404	-1,74	-2,65	
04	enz.(L-), autom.	5,47	0,190	0,82	1,25	
05	enz.(L-), autom.	5,39	0,110	0,47	0,72	
09	enz.(L-), autom.	4,97	-0,310	-1,33	-2,04	
10	enz.(L-), autom.	10,54	5,260	22,62	34,60	(*)
12	enz.(L-), autom.	5,20	-0,080	-0,34	-0,53	
14	enz.(L-), autom.	5,87	0,590	2,54	3,88	
15	enz.(L-), autom.	5,40	0,120	0,52	0,79	
29	enz.(L-), autom.	5,40	0,115	0,49	0,76	
31	enz.(L-), autom.	5,20	-0,080	-0,34	-0,53	
38	enz.(L-), autom.	5,53	0,254	1,09	1,67	
40	enz.(L-), autom.	4,92	-0,360	-1,55	-2,37	
41	enz.(L-), autom.	5,49	0,210	0,90	1,38	
42	enz.(L-), autom.	5,25	-0,030	-0,13	-0,20	
44	enz.(L-), autom.	5,14	-0,140	-0,60	-0,92	
45	enz.(L-), autom.	5,32	0,040	0,17	0,26	
47	enz.(L-), autom.	5,20	-0,080	-0,34	-0,53	
48	enz.(L-), autom.	5,82	0,540	2,32	3,55	
50	enz.(L-), autom.	5,43	0,150	0,65	0,99	
53	enz.(L-), autom.	5,28	0,000	0,00	0,00	
55	enz.(L-), autom.	5,59	0,310	1,33	2,04	
56	enz.(L-), autom.	5,32	0,040	0,17	0,26	
58	enz.(L-), autom.	5,34	0,060	0,26	0,39	
61	enz.(L-), autom.	5,00	-0,280	-1,20	-1,84	
65	enz.(L-) Hand	5,03	-0,250	-1,07	-1,64	
70	enz.(L-), autom.	5,54	0,260	1,12	1,71	
82	enz.(L-) Hand	5,04	-0,240	-1,03	-1,58	
90	enz.(L-), autom.	5,15	-0,130	-0,56	-0,86	
92	enz.(L-), autom.	5,11	-0,170	-0,73	-1,12	
95	enz.(L-), autom.	5,53	0,250	1,08	1,64	
105	enz.(L-), autom.	4,86	-0,416	-1,79	-2,74	
106	enz.(L-) Hand	4,92	-0,360	-1,55	-2,37	

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

**6.13.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,59	-0,520	-2,30	-2,39	
202	FTIR	5,20	0,090	0,40	0,41	
203	FTIR	4,95	-0,160	-0,71	-0,73	
204	FTIR	5,12	0,010	0,04	0,05	
205	FTIR	5,20	0,090	0,40	0,41	
207	FTIR	4,80	-0,310	-1,37	-1,42	
208	FTIR	5,29	0,180	0,80	0,83	
210	FTIR	5,12	0,010	0,04	0,05	
211	FTIR	4,59	-0,520	-2,30	-2,39	
212	FTIR	4,74	-0,370	-1,64	-1,70	
214	FTIR	6,80	1,690	7,47	7,75	(***)
215	FTIR	4,20	-0,910	-4,02	-4,17	
216	FTIR	5,18	0,070	0,31	0,32	
217	FTIR	4,51	-0,600	-2,65	-2,75	
218	FTIR	4,66	-0,450	-1,99	-2,06	
219	FTIR	5,40	0,290	1,28	1,33	
220	FTIR	4,61	-0,500	-2,21	-2,29	
221	FTIR	4,25	-0,860	-3,80	-3,94	
222	FTIR	4,60	-0,510	-2,26	-2,34	
223	FTIR	4,80	-0,310	-1,37	-1,42	
225	FTIR	4,75	-0,360	-1,59	-1,65	
226	FTIR	4,70	-0,410	-1,81	-1,88	
227	FTIR	4,48	-0,630	-2,79	-2,89	
228	FTIR	6,37	1,260	5,57	5,78	(***)
229	FTIR	4,28	-0,830	-3,67	-3,81	
231	FTIR	5,05	-0,060	-0,27	-0,28	
234	FTIR	4,69	-0,420	-1,86	-1,93	
236	FTIR	5,30	0,190	0,84	0,87	
237	FTIR	4,85	-0,260	-1,15	-1,19	
240	FTIR	4,85	-0,260	-1,15	-1,19	
241	FTIR	4,47	-0,640	-2,83	-2,94	
242	FTIR	6,08	0,970	4,29	4,45	
243	FTIR	4,84	-0,270	-1,19	-1,24	
244	FTIR	4,71	-0,400	-1,77	-1,83	
245	FTIR	5,84	0,730	3,23	3,35	
247	FTIR	4,98	-0,130	-0,57	-0,60	
249	FTIR	4,30	-0,810	-3,58	-3,72	
250	FTIR	3,15	-1,960	-8,67	-8,99	(***)
252	FTIR	4,75	-0,360	-1,59	-1,65	
254	FTIR	4,70	-0,410	-1,81	-1,88	
255	FTIR	4,70	-0,410	-1,81	-1,88	
256	FTIR	5,37	0,260	1,15	1,19	
257	FTIR	4,29	-0,820	-3,63	-3,76	
258	FTIR	4,93	-0,180	-0,80	-0,83	
259	FTIR	5,60	0,490	2,17	2,25	
260	FTIR	5,30	0,190	0,84	0,87	
261	FTIR	4,40	-0,710	-3,14	-3,26	
262	FTIR	4,80	-0,310	-1,37	-1,42	
265	FTIR	4,40	-0,710	-3,14	-3,26	
266	FTIR	6,02	0,910	4,02	4,17	
267	FTIR	5,10	-0,010	-0,04	-0,05	
268	FTIR	4,82	-0,290	-1,28	-1,33	
269	FTIR	4,51	-0,600	-2,65	-2,75	
270	FTIR	4,33	-0,780	-3,45	-3,58	
271	FTIR	4,32	-0,790	-3,49	-3,62	
272	FTIR	4,94	-0,170	-0,75	-0,78	
273	FTIR	4,38	-0,730	-3,23	-3,35	
275	FTIR	4,93	-0,180	-0,80	-0,83	
276	FTIR	4,90	-0,210	-0,93	-0,96	
277	FTIR	4,46	-0,650	-2,87	-2,98	
278	FTIR	3,26	-1,850	-8,18	-8,49	(***)
279	FTIR	4,90	-0,210	-0,93	-0,96	
280	FTIR	5,13	0,020	0,09	0,09	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	4,93	-0,180	-0,80	-0,83	
282	FTIR	4,80	-0,310	-1,37	-1,42	
284	FTIR	4,50	-0,610	-2,70	-2,80	
285	FTIR	4,98	-0,130	-0,57	-0,60	
287	FTIR	3,95	-1,160	-5,13	-5,32	(***)
288	FTIR	3,62	-1,490	-6,59	-6,83	(***)
320	FTIR	4,62	-0,490	-2,17	-2,25	
337	FTIR	4,80	-0,310	-1,37	-1,42	
365	FTIR	3,60	-1,510	-6,68	-6,93	(***)

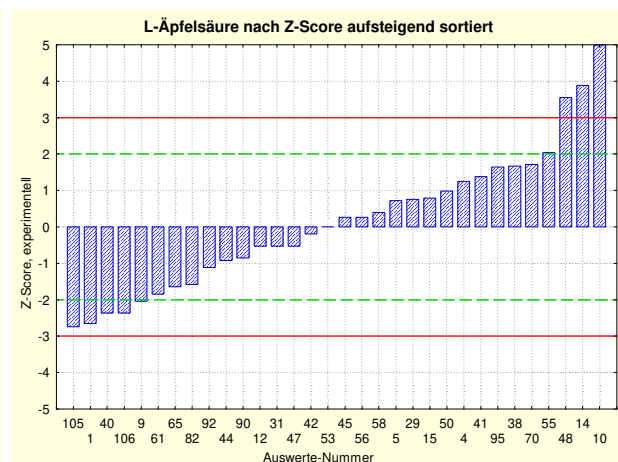
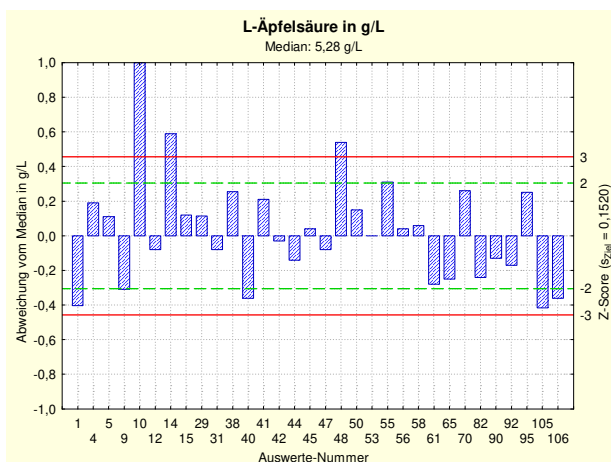
(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**6.13.4 Deskriptive Ergebnisse**

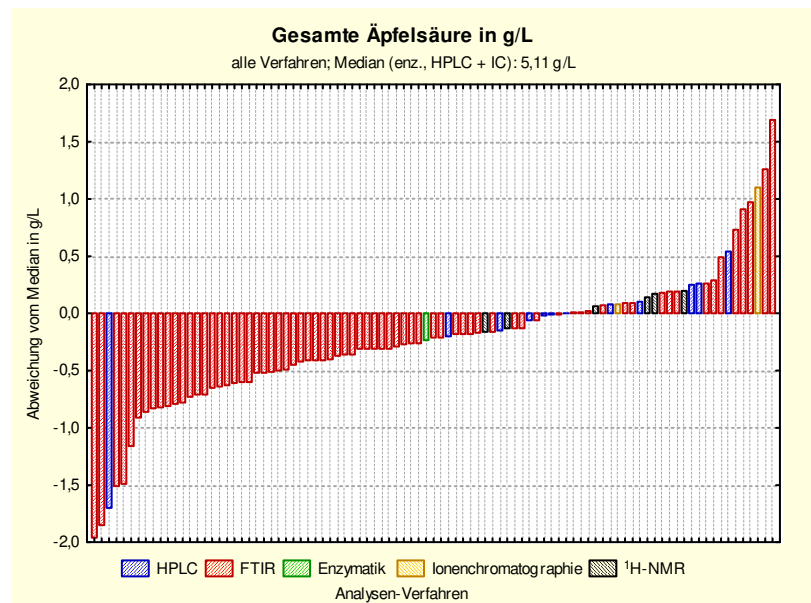
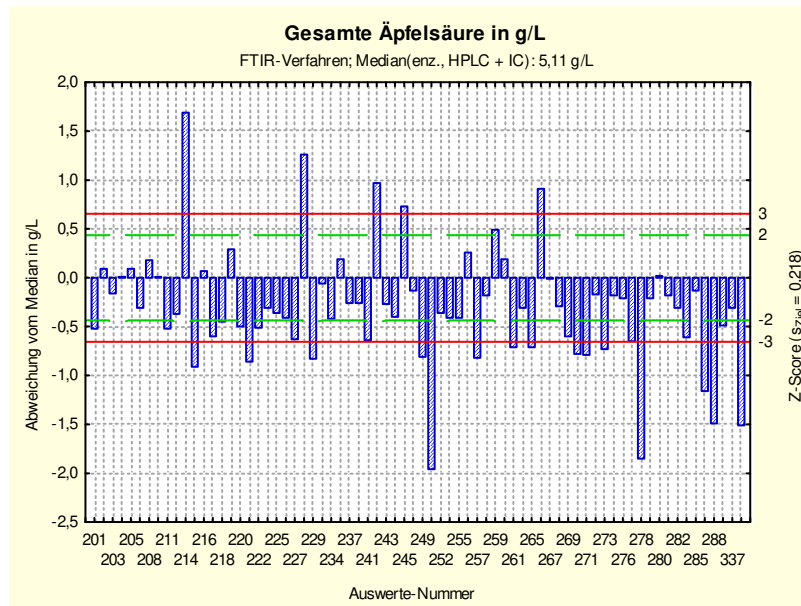
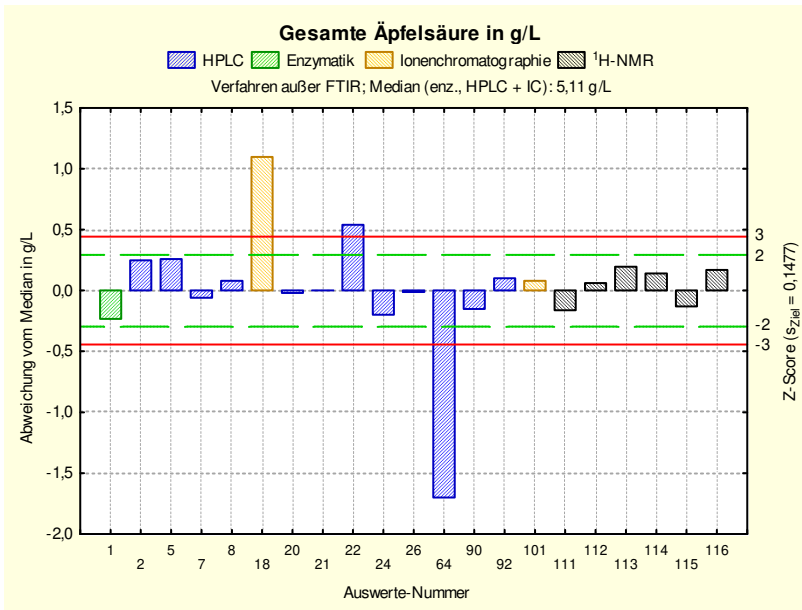
Ergebnisse [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	15	13	31
Minimalwert	3,41	4,88	4,86
Mittelwert	5,112	5,159	5,277
Median	5,110	5,110	5,280
Maximalwert	6,21	5,65	5,87
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,577	0,211	0,262
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,149	0,059	0,047
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,226	0,226	0,233
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,148	0,148	0,152
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218		
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,55	0,93	1,13
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	3,91	1,43	1,72
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	2,65	0,97	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,66	0,26	0,20
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,01	0,40	0,31
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,68	0,27	

**6.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	5,135	0,226
IC	Ionenchromatographie	2	5,700	0,818
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch manuell	1	4,877	
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	15	5,151	0,263
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	72	4,782	0,435
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,168	0,159
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	28	5,332	0,264
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	4,967	0,092
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	32	5,283	0,285









**6.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]****6.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,190	0,011	0,84	
02	HPLC	0,582	0,403	30,72	(*)
04	enzymat. autom.	0,240	0,061	4,65	
05	enzymat. autom.	0,187	0,008	0,61	
07	HPLC	0,280	0,101	7,70	(**)
08	HPLC	n.b., BG:			
09	enzymat. autom.	0,178	-0,001	-0,08	
18	IC	<NG			
20	HPLC	0,160	-0,019	-1,45	
21	HPLC	0,160	-0,019	-1,45	
22	HPLC	0,150	-0,029	-2,21	
26	HPLC	<= 0			
64	HPLC	0,370	0,191	14,56	(*)
65	enzymat. Hand	0,252	0,073	5,53	(**)
70	enzymat. autom.	0,150	-0,029	-2,21	
90	HPLC	<BG(0,2)			
92	HPLC	0,306	0,127	9,68	(*)
95	enzymat. autom.	0,190	0,011	0,84	
106	enzymat. Hand	0,180	0,001	0,08	
111	NMR	<0,200			
112	NMR	<0,200			
113	NMR	<0,200			
114	NMR	<0,200			
115	NMR	0,170	-0,009	-0,69	
116	NMR	<0,200			

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

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

**6.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,051	0,000	0,11	0,03	
04	enz.(L-) autom.	0,080	0,030	6,59	1,49	
05	enz.(L-) autom.	0,048	-0,003	-0,56	-0,13	
09	enz.(L-) autom.	0,062	0,011	2,57	0,58	
10	enz.(L-) autom.	0,040	-0,011	-2,35	-0,53	
12	enz.(L-) autom.	0,100	0,050	11,06	2,49	
14	enz.(L-) autom.	0,047	-0,004	-0,78	-0,18	
15	enz.(L-) autom.	<= 0				
29	enz.(L-) autom.	0,055	0,004	1,01	0,23	
31	enz.(L-) autom.	0,050	-0,001	-0,11	-0,03	
38	enz.(L-) autom.	<= 0				
40	enz.(L-) autom.	0,140	0,090	19,99	4,51	
41	enz.(L-) autom.	<= 0				
42	enz.(L-) autom.	0,040	-0,011	-2,35	-0,53	
44	enz.(L-) autom.	<0,1				
45	enz.(L-) autom.	0,050	-0,001	-0,11	-0,03	
47	enz.(L-) autom.	0,030	-0,021	-4,58	-1,03	
48	enz.(L-) autom.	<= 0				
50	enz.(L-) autom.	0,060	0,009	2,12	0,48	
53	enz.(L-) autom.	0,110	0,060	13,29	3,00	
55	enz.(L-) autom.	<= 0				
56	enz.(L-) autom.	0,080	0,030	6,59	1,49	
58	enz.(L-) autom.	0,050	-0,001	-0,11	-0,03	
61	enz.(L-) autom.	0,100	0,050	11,06	2,49	
65	enz.(L-) Hand	0,068	0,017	3,80	0,86	
70	enz.(L-) autom.	0,040	-0,011	-2,35	-0,53	
82	enz.(L-) Hand	0,107	0,057	12,62	2,85	
90	enz.(L-) autom.	<NG(0,050)				
95	enz.(L-) autom.	0,040	-0,011	-2,35	-0,53	
105	enz.(L-) autom.	0,048	-0,003	-0,67	-0,15	
106	enz.(L-) Hand	0,040	-0,011	-2,35	-0,53	

**6.14.3 FTIR-Laboregebnisse Gesamte Milchsäure**

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,060	-0,119			(*)
202	FTIR	0,414	0,235			(*)
203	FTIR	0,410	0,231			(*)
204	FTIR	<= 0				
205	FTIR	0,650	0,471			(*)
207	FTIR	0,400	0,221			(*)
208	FTIR	0,130	-0,049			
210	FTIR	<= 0				
211	FTIR	0,650	0,471			(*)
212	FTIR	0,170	-0,009			
214	FTIR	0,400	0,221			(*)
215	FTIR	0,100	-0,079			
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	0,010	-0,169			(*)
218	FTIR	<= 0				
219	FTIR	0,200	0,021			
220	FTIR	0,290	0,111			(*)
221	FTIR	-1,010	-1,189			(*)
222	FTIR	0,010	-0,169			(*)
223	FTIR	<= 0				
225	FTIR	0,450	0,271			(*)
226	FTIR	0,200	0,021			
227	FTIR	-0,170	-0,349			(*)
228	FTIR	0,230	0,051			
229	FTIR	-0,360	-0,539			(*)
231	FTIR	0,420	0,241			(*)
234	FTIR	<= 0				
236	FTIR	0,200	0,021			
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	-0,050	-0,229			(*)
241	FTIR	-0,370	-0,549			(*)
242	FTIR	0,710	0,531			(*)
243	FTIR	0,200	0,021			
244	FTIR	0,130	-0,049			
245	FTIR	0,560	0,381			(*)
247	FTIR	0,030	-0,149			(*)
249	FTIR	0,500	0,321			(*)
250	FTIR	0,650	0,471			(*)
252	FTIR	0,170	-0,009			
254	FTIR	<= 0				
255	FTIR	<= 0				
256	FTIR	0,210	0,031			
257	FTIR	-0,220	-0,399			(*)
259	FTIR	<= 0				
260	FTIR	-0,500	-0,679			(*)
261	FTIR	<= 0				
262	FTIR	<= 0				
265	FTIR	<= 0				
266	FTIR	0,640	0,461			(*)
267	FTIR	<= 0				
268	FTIR	-0,510	-0,689			(*)
269	FTIR	<= 0				
270	FTIR	<= 0				
271	FTIR	0,170	-0,009			
272	FTIR	-0,140	-0,319			(*)
273	FTIR	-0,050	-0,229			(*)
275	FTIR	0,060	-0,119			(*)
276	FTIR	0,300	0,121			(*)
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	<= 0				
279	FTIR	0,500	0,321			(*)
280	FTIR	-0,240	-0,419			(*)
281	FTIR	1,800	1,621			(*)

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
282	FTIR	0,500	0,321			(*)
284	FTIR	<= 0				
285	FTIR	-0,090	-0,269			(*)
287	FTIR	0,450	0,271			(*)
288	FTIR	0,480	0,301			(*)
320	FTIR	0,010	-0,169			(*)
337	FTIR	0,200	0,021			
365	FTIR	<= 0				

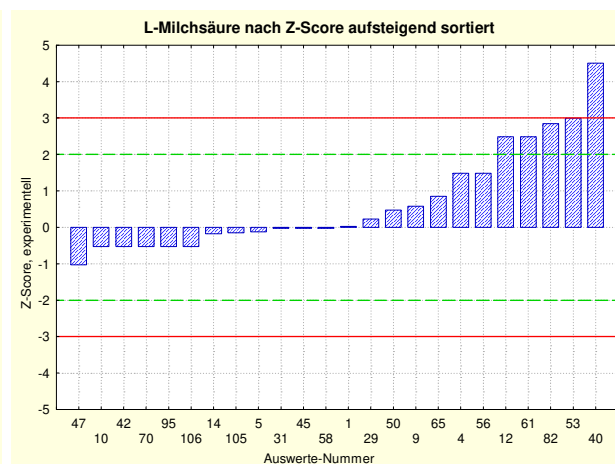
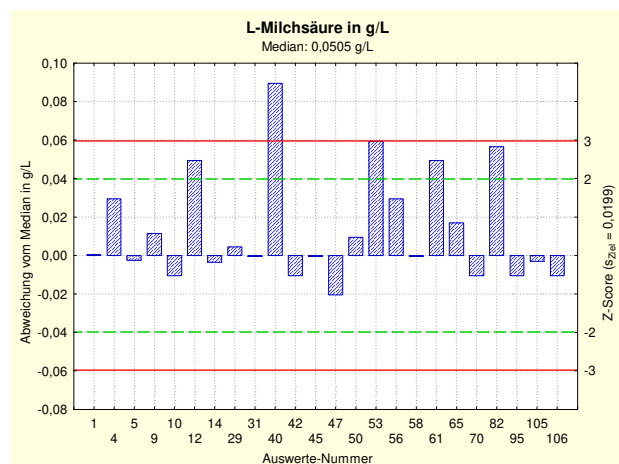
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte herkömmlicher Methoden ab.

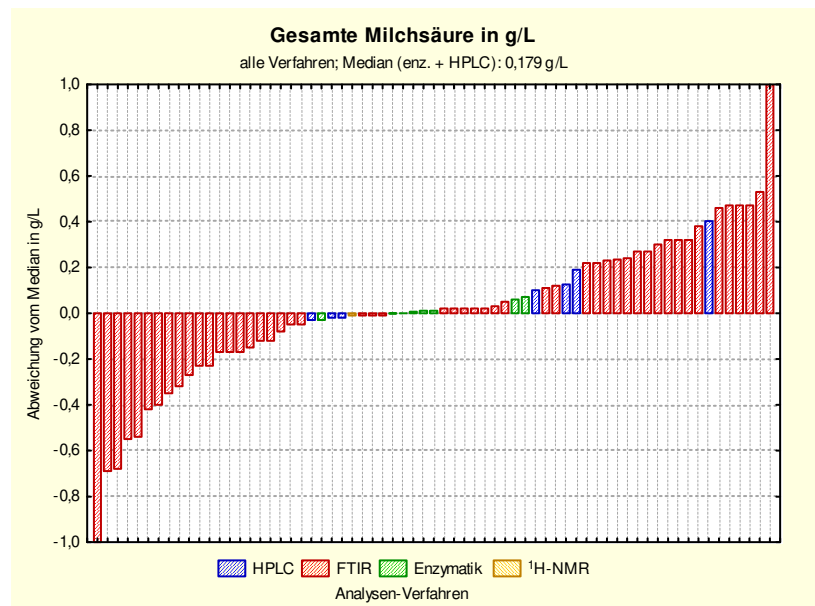
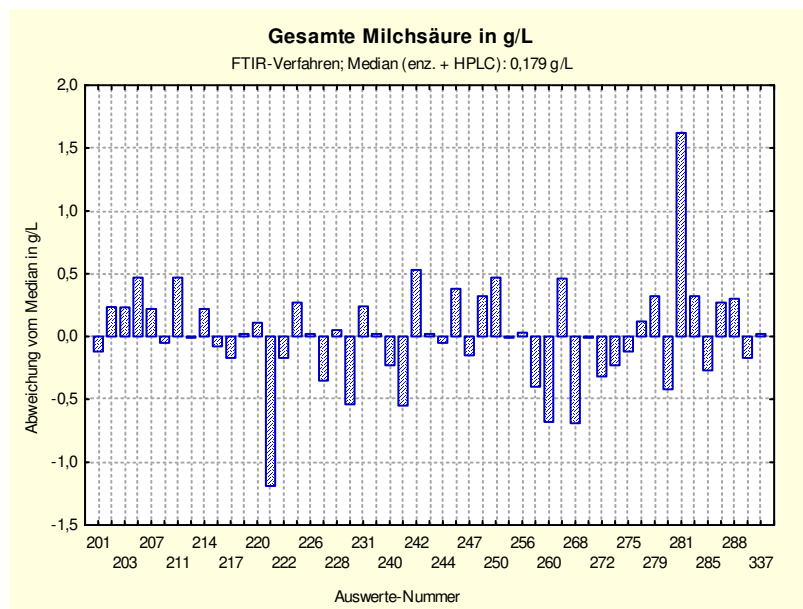
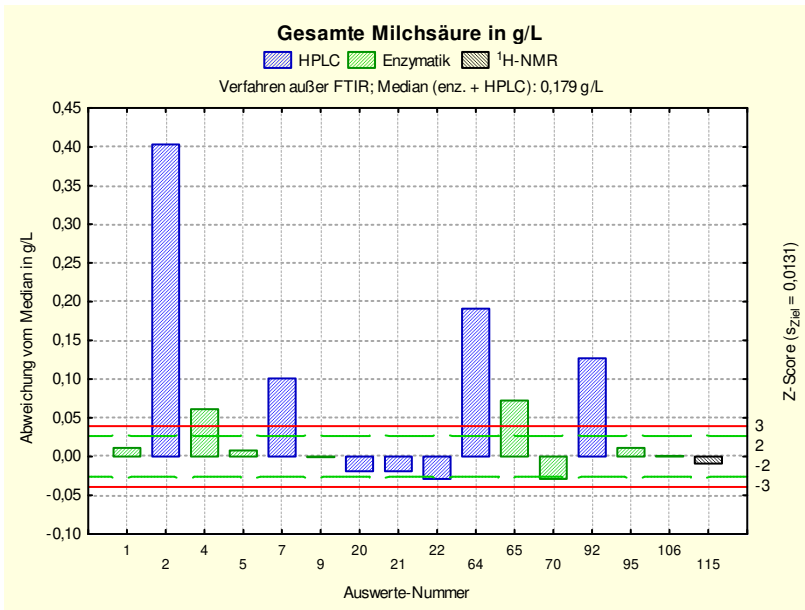
**6.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	12	10	24
Minimalwert	0,15	0,15	0,03
Mittelwert	0,193	0,179	0,064
Median	0,184	0,179	0,051
Maximalwert	0,28	0,24	0,14
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,042	0,027	0,028
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,012	0,008	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,013	0,013	0,004
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	(0,209)	(0,209)	
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	3,14	2,04	6,35
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			1,43
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(0,27)	(0,21)	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,91	0,64	1,30
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(0,06)	(0,05)	

**6.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	0,274	0,147
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	0,189	0,035
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	0,207	0,044
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	19	0,218	0,0719
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	51	0,197	0,340
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,170	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	0,0609	0,0264
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	4	0,0644	0,0291
	alle Verfahren L-Milchsäure	24	0,0619	0,0269





## 6.15 Reduktone [mg/L]

### 6.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	5,0	-7,00	-5,30	(*)
12	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	
25	Glyoxal/potentiometr.	12,2	0,19	0,14	
26	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	
29	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76	
39	Glyoxal/potentiometr.	10,4	-1,60	-1,21	
41	Glyoxal/Stärke	16,0	4,00	3,03	
43	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76	
56	Glyoxal/MTT	9,1	-2,90	-2,20	
58	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-2,00	-1,51	
61	Glyoxal/Stärke	8,0	-4,00	-3,03	
64	Acetaldehyd/Stärke	39,0	27,00	20,44	(*)
66	Glyoxal/Stärke	12,0	0,00	0,00	
69	Glyoxal/potentiometr.	13,0	1,00	0,76	
70	Glyoxal/potentiometr.	17,1	5,14	3,89	
72	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	
75	Glyoxal/Stärke	10,0	-2,00	-1,51	
78	Glyoxal/Stärke	4,0	-8,00	-6,06	(*)
80	Glyoxal/Stärke	12,0	0,00	0,00	
84	Glyoxal/Stärke	20,0	8,00	6,06	(*)

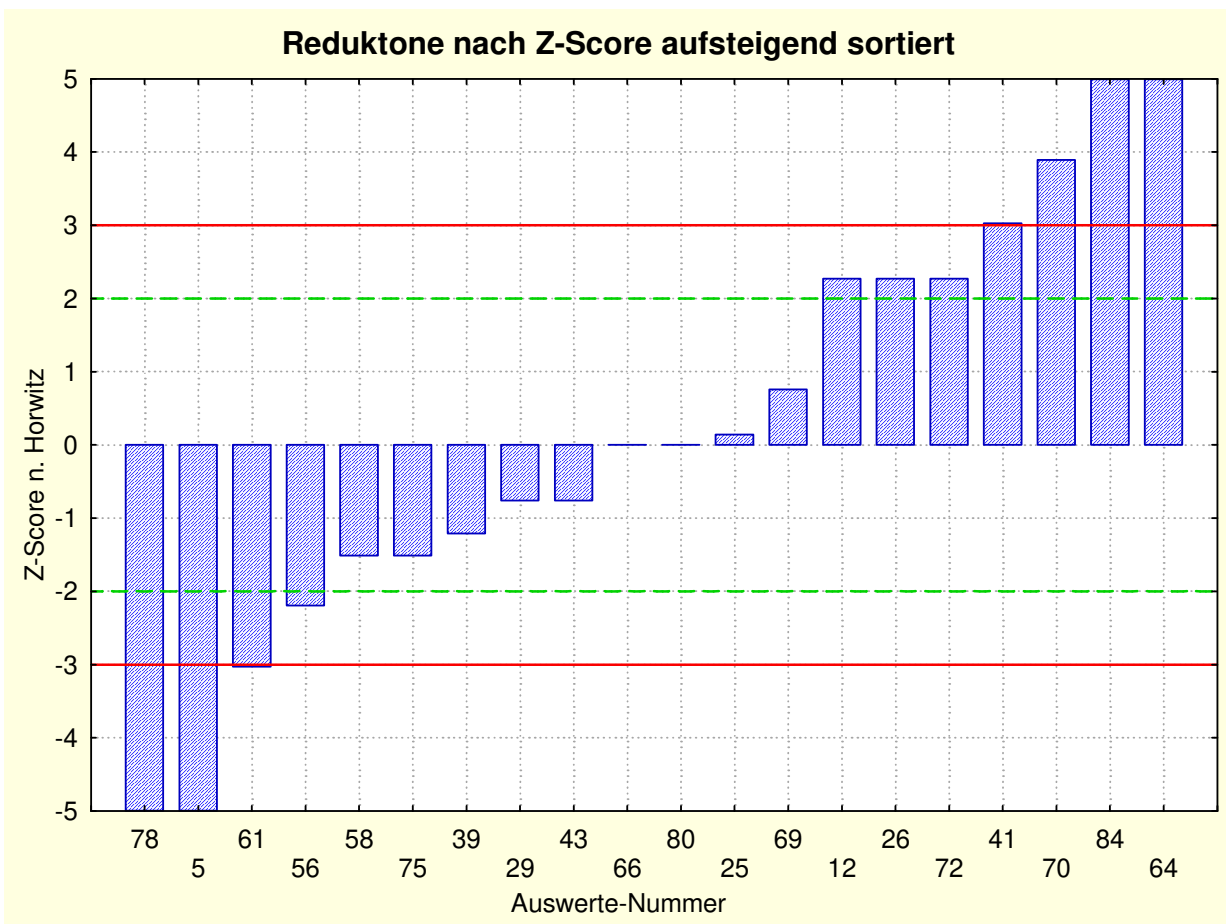
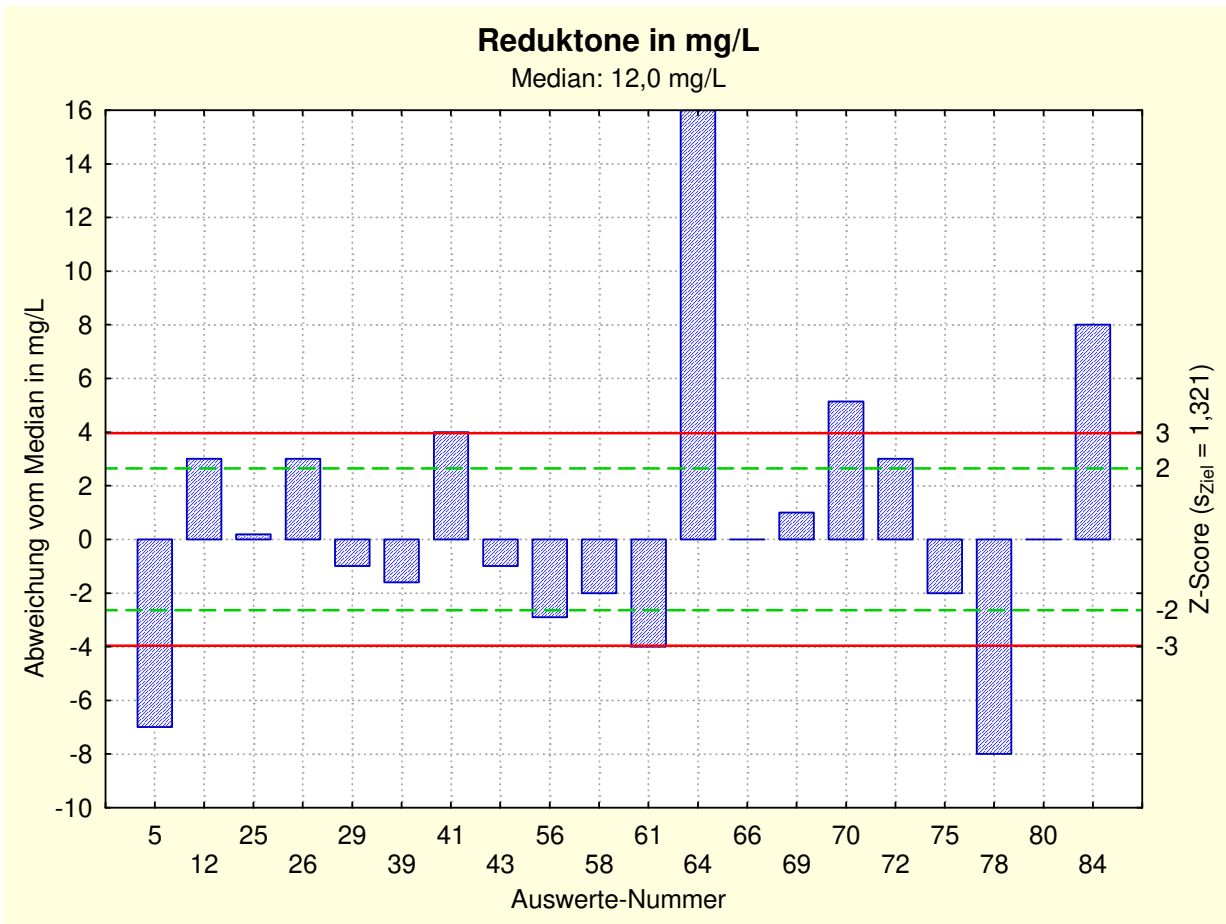
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte ab

### 6.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	16
Minimalwert	8,0
Mittelwert	12,30
Median	12,00
Maximalwert	17,1
Standardabweichung ( $s_L$ )	2,658
Standardfehler des Mittelwertes	0,664
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,321
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,01
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,50
Quotient ( $u_M/s_{exp,herk.}$ )	

### 6.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	39,000	
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	5,000	
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	9	11,393	4,152
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	8	13,633	2,554
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	9,100	
	alle Verfahren	20	12,302	4,289



## 6.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

### 6.16.1 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	31,2	13,00	6,91	(*)
02	LwK 6.2	24,7	6,50	3,45	
04	LwK 6.3	21,0	2,80	1,49	
05	LwK 6.2	20,5	2,30	1,22	
06	LwK 6.2	18,2	0,00	0,00	
08	LwK 6.2	16,8	-1,40	-0,74	
09	LwK 6.2	19,4	1,20	0,64	
10	LwK 6.4	17,0	-1,20	-0,64	
12	LwK 6.3	21,0	2,80	1,49	
45	LwK 6.3	25,0	6,80	3,61	
47	LwK 6.3	14,0	-4,20	-2,23	
53	LwK 6.3	17,0	-1,20	-0,64	
55	LwK 6.4	16,0	-2,20	-1,17	
56	LwK 6.4	17,0	-1,20	-0,64	
91	LwK 6.2	19,0	0,80	0,43	
92	LwK 6.3	12,9	-5,30	-2,82	
102	LwK 6.3	20,0	1,80	0,96	
104	LwK 6.2	16,7	-1,50	-0,80	
202	LwK 6.5	25,7	7,50	3,99	
205	LwK 6.5	18,0	-0,20	-0,11	
206	LwK 6.5	19,6	1,40	0,74	
208	LwK 6.5	21,8	3,60	1,91	
210	LwK 6.5	19,0	0,80	0,43	
212	LwK 6.5	29,0	10,80	5,74	(*)
215	LwK 6.5	25,0	6,80	3,61	
218	LwK 6.5	18,0	-0,20	-0,11	
224	LwK 6.5	22,0	3,80	2,02	
236	LwK 6.5	20,0	1,80	0,96	
237	LwK 6.5	20,0	1,80	0,96	
244	LwK 6.5	22,0	3,80	2,02	
249	LwK 6.5	23,0	4,80	2,55	
251	LwK 6.5	24,0	5,80	3,08	
252	LwK 6.5	26,0	7,80	4,15	
254	LwK 6.5	25,0	6,80	3,61	
258	LwK 6.5	29,9	11,70	6,22	(*)
262	LwK 6.5	29,0	10,80	5,74	(*)
263	LwK 6.5	25,9	7,72	4,10	
264	LwK 6.5	17,5	-0,70	-0,37	
266	LwK 6.5	34,0	15,80	8,40	(*)
267	LwK 6.5	15,0	-3,20	-1,70	
281	LwK 6.5	21,0	2,80	1,49	
282	LwK 6.5	27,0	8,80	4,68	
283	LwK 6.5	24,0	5,80	3,08	
285	LwK 6.5	25,0	6,80	3,61	
337	LwK 6.5	19,0	0,80	0,43	
365	LwK 6.5	27,0	8,80	4,68	

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

### 6.16.2 Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
14	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	26,6	-2,40	-0,86	
19	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	3,00	1,07	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	



**Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	11,00	3,94	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,7	1,73	0,62	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
29	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-5,00	-1,79	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	3,00	1,07	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-5,00	-1,79	
38	Redox incl.	30,0	1,00	0,36	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	
48	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
58	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
62	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	17,0	-12,00	-4,29	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
74	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,1	2,05	0,73	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-8,00	-2,86	
79	Redox incl.	21,0	-8,00	-2,86	
82	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	20,0	-9,00	-3,22	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
86	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
106	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	

**6.16.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	5,00	2,82	1,79	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,5	1,54	0,87	0,55	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
29	LwK 6.1 (excl.Red.)	13,0	-4,00	-2,25	-1,43	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	19,0	2,00	1,13	0,72	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	3,00	1,69	1,07	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	14,0	-3,00	-1,69	-1,07	
58	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	3,00	1,69	1,07	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	-22,0	-39,00	-21,96	-13,95	(*)
66	LwK 6.1 (excl.Red.)	13,0	-4,00	-2,25	-1,43	
69	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	5,00	2,82	1,79	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,8	-4,19	-2,36	-1,50	
72	LwK 6.1 (excl.Red.)	13,0	-4,00	-2,25	-1,43	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,0	7,00	3,94	2,50	
78	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
80	LwK 6.1 (excl.Red.)	16,0	-1,00	-0,56	-0,36	
84	LwK 6.1 (excl.Red.)	10,0	-7,00	-3,94	-2,50	

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

Methodenkod schwarze Schrift: Wert vom Auswerter nachberechnet

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

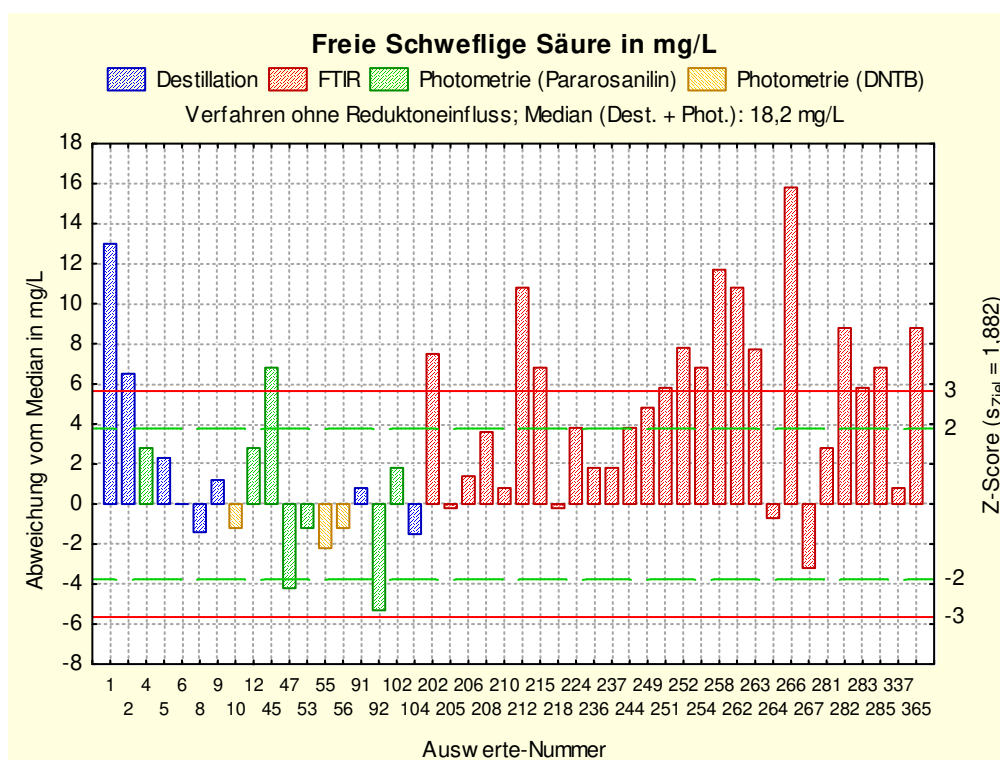
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab.

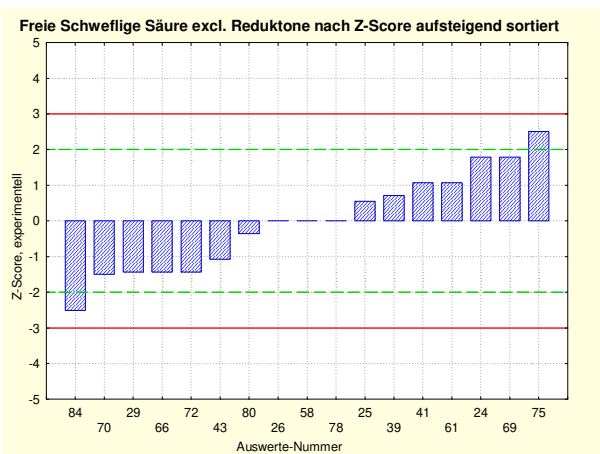
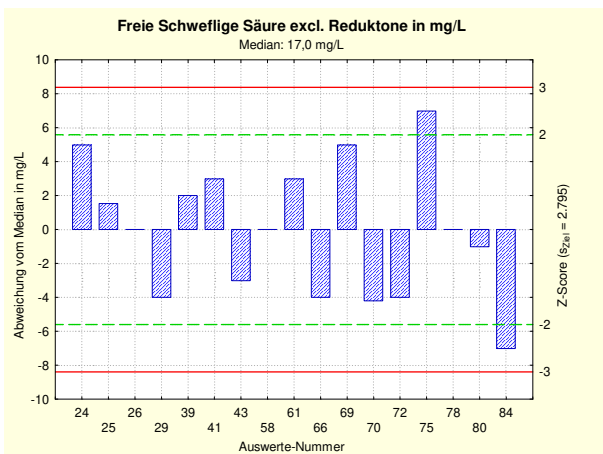
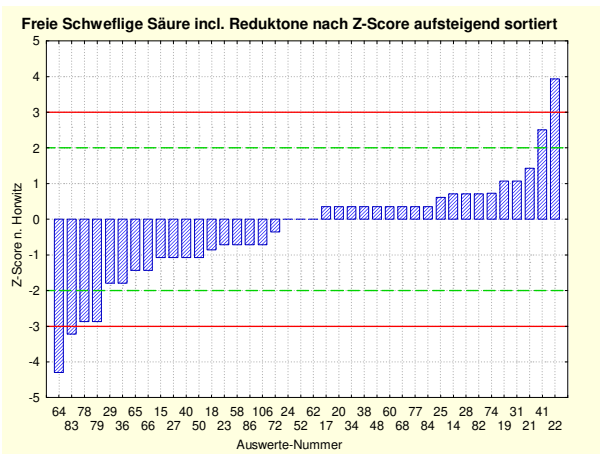
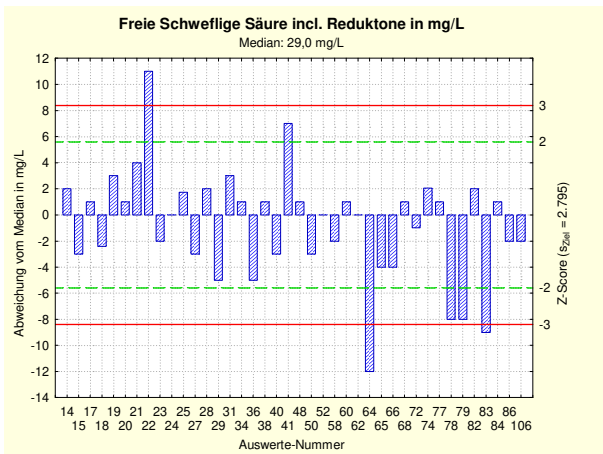
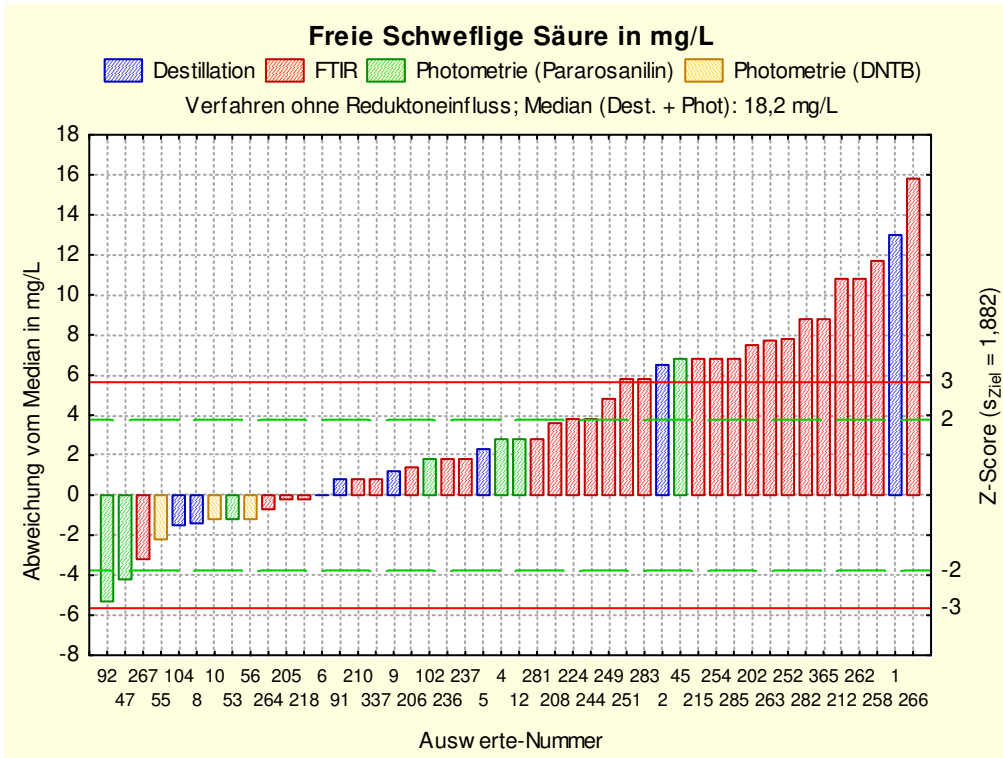
### 6.16.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation, Photometrie	Jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	17	40	17
Minimalwert	12,9	17,0	10,0
Mittelwert	18,60	28,21	16,96
Median	18,20	29,00	17,00
Maximalwert	25,0	40,0	24,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	3,271	4,239	3,936
Standardfehler des Mittelwertes	0,793	0,670	0,955
Zielstandardabweichung			
- nach Horwitz ( $s_H$ )	1,882	2,795	1,776
- experimentell ( $s_H$ incl. Red.)			2,795
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,74	1,52	2,22
Quotient ( $s_L/s_H$ incl. Red.)			1,41
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,42	0,24	0,54
Quotient ( $u_M / s_{exp\ herk.}$ )			0,34

### 6.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1(incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	38	28,47	3,27
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	2	25,50	7,22
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	40	28,36	3,37
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - mit Abzug der Reduktone	10	17,68	5,13
- Basis erweitert	- Basis erweitert durch Nachberechnung von Werten	18	16,52	4,73
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	20,02	3,65
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	7	18,76	4,76
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	16,67	0,64
	Destillations- und photometrische Verfahren	18	18,95	3,92
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	23,21	4,53





**6.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]****6.17.1 Laborergebnisse**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	183,0	9,00	0,70	1,68	
02	LwK 7.3	175,1	1,10	0,09	0,21	
04	LwK 7.7	182,0	8,00	0,62	1,49	
05	LwK 7.3	180,0	6,00	0,47	1,12	
06	LwK 7.4.2	176,0	2,00	0,16	0,37	
08	LwK 7.3	174,0	0,00	0,00	0,00	
09	LwK 7.3	168,0	-6,00	-0,47	-1,12	
12	LwK 7.4.2	174,0	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	191,0	17,00	1,33	3,17	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	165,0	-9,00	-0,70	-1,68	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	175,0	1,00	0,08	0,19	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	173,3	-0,70	-0,05	-0,13	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	187,0	13,00	1,02	2,43	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	180,0	6,00	0,47	1,12	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	181,0	7,00	0,55	1,31	
22	LwK 7.4.2m	170,0	-4,00	-0,31	-0,75	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	177,0	3,00	0,23	0,56	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	163,0	-11,00	-0,86	-2,05	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	181,8	7,77	0,61	1,45	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	-16,00	-1,25	-2,99	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	168,5	-5,50	-0,43	-1,03	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	186,0	12,00	0,94	2,24	
29	LwK 7.4.1	173,0	-1,00	-0,08	-0,19	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	196,0	22,00	1,72	4,11	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	185,0	11,00	0,86	2,05	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	179,0	5,00	0,39	0,93	
38	LwK 7.7	183,0	9,00	0,70	1,68	
40	LwK 7.4.1	174,5	0,50	0,04	0,09	
41	LwK 7.5.1(incl. Red.)	183,0	9,00	0,70	1,68	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	149,0	-25,00	-1,95	-4,67	
44	LwK 7.4.1	177,0	3,00	0,23	0,56	
45	LwK 7.7	183,0	9,00	0,70	1,68	
47	LwK 7.4.2	164,0	-10,00	-0,78	-1,87	
48	LwK 7.4.2	160,0	-14,00	-1,09	-2,61	
50	LwK 7.4.2	149,0	-25,00	-1,95	-4,67	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	174,0	0,00	0,00	0,00	
53	LwK 7.4.1	170,0	-4,00	-0,31	-0,75	
55	LwK 7.7	182,4	8,40	0,66	1,57	
56	LwK 7.7	175,8	1,80	0,14	0,34	
58	LwK 7.4.2	170,0	-4,00	-0,31	-0,75	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	189,0	15,00	1,17	2,80	
61	LwK 7.3	164,0	-10,00	-0,78	-1,87	
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	179,0	5,00	0,39	0,93	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,0	-20,00	-1,56	-3,73	
65	LwK 7.4.2	125,0	-49,00	-3,83	-9,15	(**)
66	LwK 7.5.3(incl. Red.)	172,0	-2,00	-0,16	-0,37	
68	LwK 7.4.2	195,0	21,00	1,64	3,92	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	176,0	2,00	0,16	0,37	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	168,4	-5,56	-0,43	-1,04	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	180,0	6,00	0,47	1,12	
74	LwK 7.1	97,4	-76,60	-5,98	-14,30	(**)
75	LwK 7.4.2	157,0	-17,00	-1,33	-3,17	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	179,0	5,00	0,39	0,93	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	165,0	-9,00	-0,70	-1,68	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	173,0	-1,00	-0,08	-0,19	
80	LwK 7.5.3(excl. Red.)	164,0	-10,00	-0,78	-1,87	
82	LwK 7.4.1	176,0	2,00	0,16	0,37	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	158,0	-16,00	-1,25	-2,99	
84	LwK 7.5.1(excl. Red.)	150,0	-24,00	-1,87	-4,48	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	191,0	17,00	1,33	3,17	

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

**Fortsetzung: Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
91	LwK 7.3	179,0	5,00	0,39	0,93	
92	LwK 7.6	181,0	7,00	0,55	1,31	
96	LwK 7.4.2	169,0	-5,00	-0,39	-0,93	
97	LwK 7.4.2	175,0	1,00	0,08	0,19	
101	LwK 7.4.2	172,0	-2,00	-0,16	-0,37	
102	LwK 7.6	172,0	-2,00	-0,16	-0,37	
103	LwK 7.7	179,0	5,00	0,39	0,93	
104	LwK 7.3	174,0	0,00	0,00	0,00	
106	LwK 7.4.2	132,0	-42,00	-3,28	-7,84	(**)
202	LwK 7.8	161,0	-13,00	-1,02	-2,43	
205	LwK 7.8	146,0	-28,00	-2,19	-5,23	
206	LwK 7.8	169,0	-5,00	-0,39	-0,93	
207	FTIR(direkt)	182,0	8,00	0,62	1,49	
208	LwK 7.8	211,0	37,00	2,89	6,91	(***)
210	LwK 7.8	188,0	14,00	1,09	2,61	
212	LwK 7.8	169,0	-5,00	-0,39	-0,93	
215	LwK 7.8	154,0	-20,00	-1,56	-3,73	
218	LwK 7.8	176,0	2,00	0,16	0,37	
224	LwK 7.8	155,0	-19,00	-1,48	-3,55	
236	LwK 7.8	154,0	-20,00	-1,56	-3,73	
237	LwK 7.8	149,0	-25,00	-1,95	-4,67	
244	LwK 7.8	162,0	-12,00	-0,94	-2,24	
249	LwK 7.8	157,0	-17,00	-1,33	-3,17	
251	LwK 7.8	155,0	-19,00	-1,48	-3,55	
252	LwK 7.8	157,0	-17,00	-1,33	-3,17	
254	LwK 7.8	183,0	9,00	0,70	1,68	
258	LwK 7.8	156,0	-18,00	-1,41	-3,36	
262	LwK 7.8	186,0	12,00	0,94	2,24	
263	LwK 7.8	170,6	-3,37	-0,26	-0,63	
264	LwK 7.8	156,5	-17,50	-1,37	-3,27	
266	LwK 7.8	169,0	-5,00	-0,39	-0,93	
267	LwK 7.8	145,0	-29,00	-2,26	-5,41	(***)
281	LwK 7.8	154,0	-20,00	-1,56	-3,73	
282	LwK 7.8	180,0	6,00	0,47	1,12	
283	LwK 7.8	152,0	-22,00	-1,72	-4,11	
285	LwK 7.8	141,0	-33,00	-2,58	-6,16	(***)
337	LwK 7.8	149,0	-25,00	-1,95	-4,67	
365	LwK 7.8	128,0	-46,00	-3,59	-8,59	(***)

(\*\*) 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.

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.

**6.17.2 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	25
Minimalwert	97,4	149,0
Mittelwert	166,18	171,94
Median	172,50	174,00
Maximalwert	195,0	195,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	19,575	8,946
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	3,699	1,789
Zielstandardabweichung nach Horwitz ( $s_H$ )	12,713	12,807
Zielstandardabweichung experimentell ( $s_{\text{exp. herk.}}$ )	5,357	5,357
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,54	0,70
Quotient ( $s_L/s_{\text{exp. herk.}}$ )	3,65	1,67
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,29	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\text{exp. herk.}}$ )	0,69	0,33

**6.17.3 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	97,40	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	174,64	7,12
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	5	174,17	2,96
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	164,71	15,56
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	170,00	
	Destillationsverfahren	28	170,11	9,54
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	20	178,56	8,95
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	181,50	12,03
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	168,64	7,61
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	25	177,74	9,31
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	5	160,29	13,32
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	179,50	26,46
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	164,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	8	164,21	14,04
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	2	176,50	7,22
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	181,05	2,90
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	160,97	15,27
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	182,00	

