



Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

und

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

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2018“**

**Teil 2**  
**Durchführung und Ergebnisse**  
**der Untersuchung eines Rotweines FT18P02**  
**und eines Weißweines FT18P03**

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

Stand: 25.09.2018



**Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>7</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT18P02 und FT18P03	8
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	13
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT18P02 und FT18P03</b>	<b>13</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	18
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT18P02</b>	<b>22</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	22
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	22
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	23
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	24
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	24
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	26
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)	26
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	27
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	28
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	28
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	30
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	30
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	30
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	31
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	32
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	33
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	33
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	33
4.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	35
4.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	35
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	36
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	37
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	38
4.5	Glucose [g/L]	41
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	41
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	41
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	43
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	43
4.6	Fructose [g/L]	45
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	45
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	45
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	47
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	47

4.7	Glycerin [g/L]	49
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	49
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	49
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	50
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	51
4.8	pH-Wert	52
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	52
4.8.2	FTIR-Laborergebnisse	52
4.8.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	54
4.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	54
4.9	Gesamtsäure [g/L]	56
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	56
4.9.2	Angaben zu den Analyseverfahren	56
4.9.3	FTIR-Laborergebnisse	57
4.9.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	58
4.10	Weinsäure [g/L]	60
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	60
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	60
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	62
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	62
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	64
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	64
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	64
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	66
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	66
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	68
4.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse , Teil 1	68
4.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	69
4.12.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	69
4.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	69
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	71
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	71
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	71
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	72
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	73
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	73
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	75
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	75
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	75
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	76
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	77
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	77
4.15	Reduktone [mg/L]	79
4.15.1	Laborergebnisse	79
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	79
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	80
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	81
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	81
4.16.2	Laborergebnisse jodometrisch mitgeteilt einschließlich Reduktone	81
4.16.3	Laborergebnisse jodometrisch ausschließlich Reduktone	82
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	83
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	83

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	85
4.17.1	Laborergebnisse	85
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	86
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	86
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	87
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	87
<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P03</b>	<b>90</b>
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	90
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	90
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	91
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	92
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	92
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	94
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	94
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	95
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	96
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	96
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	98
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	98
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	98
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	99
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	100
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	101
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	101
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	102
5.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	103
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	103
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	104
5.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	106
5.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	106
5.5	Glucose [g/L]	110
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	110
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	110
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	112
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	112
5.6	Fructose [g/L]	114
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	114
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	114
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	116
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	116
5.7	Glycerin [g/L]	118
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	118
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	118
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	118
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	119
5.8	pH-Wert	121
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	121
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	121
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	122
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	123

5.9	Gesamtsäure [g/L]	125
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	125
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	125
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	127
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	127
5.10	Weinsäure [g/L]	129
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	129
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	129
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	131
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	131
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	133
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	133
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	133
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	135
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	135
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	137
5.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1	137
5.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	138
5.12.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	138
5.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	138
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	140
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	140
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	140
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	141
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	142
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	142
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	144
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	144
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	144
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	145
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	146
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	146
5.15	Reduktone [mg/L]	148
5.15.1	Laborergebnisse	148
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	148
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	148
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	150
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	150
5.16.2	Laborergebnisse jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone	151
5.16.3	Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone	151
5.16.4	Deskriptive Ergebnisse für Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	152
5.16.5	Deskriptive Ergebnisse jodometrischer Verfahren	152
5.16.6	Angaben zu den Analyseverfahren	152
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	155
5.17.1	Laborergebnisse	155
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone	156
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	157
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	157
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	157

## 1 Einleitung

Die jährliche Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz wurde wiederum in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik" mit einer speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung verbunden. In dieser erweiterten Laborvergleichsuntersuchung waren von den teilnehmenden Laboratorien im Rahmen ihrer Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden Parameter zu bestimmen, die über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinausgehen, aber üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmt werden. Zugleich konnten die beteiligten Laboratorien die Qualität ihrer FTIR-Messergebnisse überprüfen.

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

Teil 1 der Berichte behandelt neben Aspekten, die für die gesamte Laborvergleichsuntersuchung von Bedeutung sind, die Ergebnisse für das Prüfgut FT18P01. Der vorliegende Teil 2 dokumentiert die Ergebnisse der Untersuchung der Prüfgüter FT18P02 und FT18P03. Teil 3 berichtet die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT18P04 und FT18P05. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 der Berichte besprochen wurden. In einigen Gliederungspunkten wird daher auf Teil 1 verwiesen.

## 2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT18P02 bzw. FT18P03 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfgüter durch die teilnehmenden Laboratorien behandelt.

### 2.1 Untersuchungsmaterial

#### 2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Das Prüfgut FT18P02 war ein 2017er sortenreiner, farbstarker Rotwein der Rebsorte Acolon aus dem Anbaugebiet Pfalz, der mit Süßreserve der gleichen Rebsorte und desselben Jahrganges auf einen Restzuckergehalt von knapp 28 g/L eingestellt wurde. Weitere Angaben siehe Teil 1, Abschnitt 2.1.2 der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Das Prüfgut FT18P03 bestand aus einem Verschnitt von stark essigstichigem 2016er fränkischen Müller-Thurgau, der zur Einstellung der gewünschten Gehalte an Flüchtigter Säure und Restzucker mit Pfälzer Riesling und einer Mischung weißer Mosel Qualitätsweine hergestellt wurde. Verschnittanteile und analytische Werte aus Voranalysen finden sich in Teil 1 Abschnitt 2.1.2 der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde mit beiden Proben durchgeführt.

### 2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT18P02 und FT18P03

Vom Prüfgut **FT18P02** wurden 207 Flaschen a 0,375L gefüllt. Während der Füllung wurde jede 17. Flasche, insgesamt 14 Flaschen als Basis für die Homogenitätsprüfung entnommen und aufsteigend nummeriert. Mittels Zufallsgenerator wurden daraus 12 Flaschen für die Homogenitätsprüfung ausgewählt. Aus jeder Probe wurden 4 Serien von Messproben erstellt, die jeweils zweimal unter Wiederholbedingungen untersucht wurden. Für die Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. Je eine Doppelserie diente der Bestimmung des pH-Wertes und der Gesamtsäure sowie der jodometrischen Bestimmung der Reduktone, der Freien, Gebundenen und Gesamten Schweflige Säure mit elektrometrischer Endpunktbestimmung an einem automatisierten Titrator. Die vierte Doppelserie wurde zur Bestimmung von Relativer Dichte, Vorhandenem Alkohol, Gesamtextrakt, Vergärbare Zucker(r), Glucose, Fructose, Glycerin, pH-Wert, Gesamtsäure, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtigter Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) verwendet. Die Messergebnisse sind in Tabelle 1 und Tabelle 2 enthalten.

**Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P02, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe Nr.	pH-Wert		Gesamtsäure	Reduktone	Schweflige Säure		
		gemessen	korr.			frei	gebunden	gesamt
				g/L	mg/L	mg/L	mg/L	mg/L
1	14	3,87	3,87	6,02	17,19	62,50	50,00	112,50
2	13	3,85	3,85	6,00	17,19	62,50	50,00	112,50
3	6	3,85	3,85	6,05	17,19	63,02	51,04	114,06
4	12	3,85	3,85	6,00	17,50	61,46	52,08	113,54
5	2	3,86	3,86	6,06	16,56	63,02	52,08	115,10
6	8	3,86	3,86	6,02	16,88	62,50	52,08	114,58
7	7	3,84	3,84	6,00	16,56	61,98	52,08	114,06
8	11	3,85	3,85	6,00	16,88	61,98	52,08	114,06
9	3	3,85	3,85	6,00	16,56	62,50	52,08	114,58
10	9	3,85	3,85	5,94	16,56	62,50	52,08	114,58
11	1	3,85	3,85	5,98	16,25	61,46	53,13	114,59
12	10	3,86	3,86	5,93	16,25	62,50	52,08	114,58
13	13	3,67	3,82	6,13	17,50	62,50	48,96	111,46
14	6	3,68	3,83	6,07	17,19	62,50	51,04	113,54
15	9	3,68	3,83	6,03	17,81	63,02	50,00	113,02
16	1	3,68	3,83	6,01	17,19	63,54	52,08	115,62
17	10	3,69	3,84	6,04	16,88	61,98	52,08	114,06
18	7	3,70	3,85	6,00	17,19	61,98	52,08	114,06
19	2	3,71	3,86	6,08	16,88	63,02	51,04	114,06
20	3	3,71	3,86	6,01	16,88	63,02	51,04	114,06
21	14	3,71	3,86	6,02	17,19	62,50	51,04	113,54
22	11	3,71	3,86	5,97	17,19	63,02	52,08	115,10
23	12	3,72	3,87	6,00	17,19	61,98	51,04	113,02
24	8	3,72	3,87	6,02	16,88	63,02	52,08	115,10

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT18P02** wurden wie in Teil 1 beschrieben graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen und auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge bzw. Probenfolge geprüft. Die Messergebnisse zeigten sowohl graphisch auffällige einzelne Werte als auch unterschiedlich signifikante Korrelationen zur Mess- oder Füllreihenfolge. Diese werden häufig beobachtet und sind bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden Varianzanalyse zu berücksichtigen. Besonders auffällig war eine deutliche Stufenbildung bei



Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P02, Teil 2

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol g/L	Gesamt-extrakt g/L	Vergärb. Zucker (r) g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Glycerin g/L	pH-Wert	Gesamt-säure g/L	Wein-säure g/L	Äpfel-säure g/L	Milch-säure g/L	Flüchtige Säure g/L
1	14	1,00701	85,41	56,12	30,05	15,12	13,86	6,55	3,67	5,56	2,32	-0,09	2,45	0,644
2	13	1,00704	85,38	56,11	30,24	15,12	14,00	6,63	3,66	5,56	2,30	-0,08	2,47	0,640
3	6	1,00700	85,32	56,09	30,06	14,93	14,11	6,58	3,66	5,58	2,32	0,00	2,42	0,635
4	12	1,00706	85,61	56,22	30,15	15,04	13,91	6,46	3,67	5,59	2,30	-0,09	2,43	0,637
5	2	1,00703	85,57	56,14	30,07	15,21	13,97	6,52	3,66	5,58	2,29	-0,05	2,38	0,617
6	8	1,00702	85,34	56,13	29,89	15,01	13,88	6,65	3,66	5,59	2,29	-0,06	2,43	0,642
7	7	1,00701	85,39	56,14	30,07	15,23	13,89	6,45	3,67	5,58	2,26	-0,03	2,42	0,626
8	11	1,00706	85,40	56,15	30,03	15,13	14,01	6,57	3,66	5,59	2,31	-0,09	2,44	0,637
9	3	1,00703	85,42	56,15	30,02	15,06	13,90	6,50	3,67	5,60	2,28	0,01	2,39	0,623
10	9	1,00703	85,34	56,12	30,00	15,04	13,90	6,57	3,66	5,61	2,32	-0,08	2,42	0,633
11	1	1,00701	85,46	56,12	30,00	15,10	13,89	6,48	3,66	5,60	2,25	0,03	2,42	0,625
12	10	1,00706	85,25	56,21	30,10	15,17	13,88	6,55	3,66	5,59	2,30	-0,08	2,45	0,649
13	13	1,00697	85,37	56,16	29,97	15,03	13,81	6,40	3,68	5,59	2,31	-0,07	2,45	0,642
14	6	1,00694	85,39	56,13	30,04	15,05	13,84	6,50	3,66	5,59	2,29	-0,05	2,43	0,654
15	9	1,00700	85,30	56,12	29,93	14,90	13,96	6,50	3,66	5,60	2,29	-0,02	2,40	0,636
16	1	1,00691	85,59	56,03	29,97	15,07	13,85	6,49	3,67	5,60	2,24	0,02	2,42	0,639
17	10	1,00703	85,56	56,17	30,11	14,97	13,90	6,54	3,67	5,60	2,28	-0,01	2,42	0,632
18	7	1,00697	85,38	56,09	29,94	14,97	13,90	6,52	3,67	5,61	2,32	-0,03	2,39	0,629
19	2	1,00697	85,48	56,11	30,13	14,98	13,84	6,43	3,67	5,59	2,25	-0,05	2,42	0,626
20	3	1,00700	85,46	56,09	30,00	14,99	13,84	6,54	3,66	5,60	2,26	-0,08	2,39	0,633
21	14	1,00700	85,20	56,14	30,02	14,83	13,83	6,46	3,67	5,59	2,28	-0,05	2,42	0,648
22	11	1,00707	85,48	56,14	30,17	14,90	13,90	6,49	3,66	5,60	2,27	-0,06	2,46	0,632
23	12	1,00705	85,62	56,26	30,05	15,00	13,84	6,50	3,67	5,60	2,25	-0,03	2,46	0,638
24	8	1,00710	85,26	56,23	30,25	14,97	13,93	6,50	3,65	5,61	2,26	-0,04	2,44	0,637

den potentiometrischen pH-Wert-Messergebnissen zwischen der ersten und der Wiederholungsmessserie, die möglicherweise auf eine Kalibrierung des pH-Meters zwischen den beiden Messreihen zurückzuführen sind. Dies gab Anlass, die Mittelwerte der beiden Teilerien zu berechnen und die Messergebnisse der Wiederholungsserie um die Differenz der Mittelwerte zu erhöhen. Die ursprünglichen und die korrigierten Werte sind in der Tabelle 1 in der Hauptspalte 'pH-Wert' nebeneinander gestellt. Bei der anschließenden Varianzanalyse, deren wesentliche Ergebnisse in Tabelle 3 zusammengefasst sind wurden beide Wertereihen berücksichtigt. Unberücksichtigt blieben dahingegen die FTIR-Messergebnisse zum Parameter Äpfelsäure, da diese weit überwiegend negative Beträge aufwiesen.

**Tabelle 3: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT18P02**

	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.	1,007015	24	1,7300	0,1800	0,000037	0,000022	0,000132	0,281	0,170	0,000063
Vorh. Alkohol FTIR	85,42	24	2,4813	0,0668	0,0881	0,0758	0,535	0,165	0,142	0,2297
Gesamtextrakt FTIR	56,14	24	2,7883	0,0459	0,0370	0,0350	0,594	0,062	0,059	0,2408
Vergärbare Zucker (r) FTIR	30,05	24	0,4893	0,8767	0,1041		0,854	0,122		0,3561
Glucose FTIR	15,03	24	0,3222	0,9648	0,1205		0,449	0,269		0,2119
Fructose FTIR	13,90	24	0,4253	0,9162	0,0805		0,418	0,193		0,1836
Glycerin FTIR	6,516	24	0,3893	0,9355	0,0700		0,278	0,252		0,1290
pH-Wert FTIR	3,665	24	1,3232	0,3181	0,0061	0,0025	0,0476	0,129	0,052	0,0199
Gesamtsäure FTIR	5,592	24	1,2654	0,3450	0,0124	0,0045	0,107	0,116	0,042	0,0444
Weinsäure FTIR	2,285	24	1,1208	0,4216	0,0247	0,0061	0,114	0,216	0,053	0,0512
Milchsäure FTIR	2,426	24	3,3333	<b>0,0247</b>	0,0166	<b>0,0179</b>	0,120	0,138	0,149	<b>0,0506</b>
Flüchtige Säure	0,636	24	2,3340	0,0805	0,0068	0,0056	0,038	0,177	0,145	0,0167
pH-Wert, potentiometrisch - korrigiert	3,776	24	0,0186	1,0000	0,1102		0,0476	<b>2,315</b>		0,1039
Gesamtsäure, acidimetr.	3,853	24	1,7478	0,1757	0,0114	0,0069	0,0476	0,239	0,146	0,0218
Reduktone	6,016	24	1,2325	0,3611	0,0407	0,0139	0,107	0,381	0,130	0,0572
Freie SO <sub>2</sub>	16,98	24	0,9302	0,5443	0,3944		1,774	0,222		0,8001
Gebundene SO <sub>2</sub>	62,5	24	0,9231	0,5493	0,5412		5,367	0,101		2,2108
Gesamte SO <sub>2</sub>	51,47	24	3,2347	<b>0,0275</b>	0,6720	<b>0,7103</b>	4,551	0,148	0,156	<b>1,9291</b>
Gesamte SO <sub>2</sub>	113,97	24	4,0144	<b>0,0122</b>	0,6182	<b>0,7590</b>	5,357	0,115	0,142	<b>2,2244</b>

N = Anzahl der Messwerte

Die Varianzanalyse zeigte mit Ausnahme der Parameter Milchsäure, Gebundene und Gesamte Schweflige Säure keine signifikanten Unterschiede zwischen den Proben. Damit ist für die übrigen Parameter die Homogenität nachgewiesen, da der Quotient  $s_r/s_z$  aus der Wiederholstandardabweichung (Fehler  $s_r$ ) und der Zielstandardabweichung ( $s_z$ ) unter dem einzuhaltenden Wert von 0,5 liegt. Eine Überschreitung dieses Höchstwertes ist nur für den Parameter pH-Wert (potentiometrisch) gegeben und entfällt nach der Korrektur des systematischen Unterschiedes zwischen den Wiederholungen.

Für die Parameter Milchsäure, Gebundene und Gesamte Schweflige Säure ist jedoch bei einem Wert des Quotienten  $s_r/s_z < 0,5$  eine Inhomogenität nachgewiesen. Der Wert des in diesem Falle zu beachtenden Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  liegt jedoch ebenso unter dem zulässigen Höchstwert von 0,3 wie die Standardabweichung der Proben  $s_{Pr}$  deutlich unterhalb des nach Fearn und Thompson ermittelten maximal tolerierbaren Wertes, der in der letzten Spalte der Tabelle 3 aufgeführt ist. Für diese beiden Parameter darf also von einer noch für die Laborvergleichsuntersuchung ausreichenden Homogenität ausgegangen werden. Damit ist eine ausreichende Homogenität des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung gegeben.

Von dem Prüfgut **FT18P03** wurden insgesamt 213 Flaschen a 0,375 L gefüllt. Die Ziehung von 16 Proben während der Füllung und die Auswahl von 12 Proben zur Homogenitätsprüfung erfolgten wie bei dem Prüfgut FT18P02. Auch die weitere Bearbeitung der Proben sowie die Durchführung der Messungen erfolgten in der für das Prüfgut FT18P02 beschriebenen Weise. Die Messergebnisse sind in Tabelle 4 und Tabelle 5 enthalten.

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P03, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe-Nr	pH-Wert	Gesamtsäure g/L	Reduktone mg/L	Freie SO <sub>2</sub> mg/L	Gebundene SO <sub>2</sub> mg/L	Gesamte SO <sub>2</sub> mg/L
1	5	3,15	7,75	6,88	43,23	188,54	231,77
2	11	3,16	7,73	6,56	43,75	187,50	231,25
3	1	3,18	7,73	6,56	43,75	190,63	234,38
4	3	3,18	7,73	6,56	43,23	190,63	233,86
5	15	3,19	7,70	6,25	43,23	189,58	232,81
6	8	3,19	7,70	6,56	43,75	189,58	233,33
7	6	3,20	7,71	6,25	43,75	188,54	232,29
8	10	3,20	7,71	5,94	43,75	187,50	231,25
9	14	3,19	7,71	6,25	43,23	189,58	232,81
10	7	3,21	7,66	6,25	43,23	189,58	232,81
11	12	3,22	7,68	6,25	43,23	187,50	230,73
12	2	3,22	7,70	6,25	43,75	189,58	233,33
13	15	3,27	7,77	6,56	43,75	185,42	229,17
14	7	3,21	7,77	6,25	43,75	184,38	228,13
15	1	3,20	7,78	6,25	44,27	187,50	231,77
16	14	3,19	7,79	6,25	44,27	186,46	230,73
17	8	3,21	7,75	6,25	43,75	186,46	230,21
18	5	3,22	7,77	5,94	44,79	186,46	231,25
19	10	3,22	7,77	6,25	44,79	187,50	232,29
20	12	3,22	7,74	6,25	43,75	186,46	230,21
21	6	3,22	7,73	6,25	44,79	187,50	232,29
22	2	3,23	7,73	6,25	44,27	186,46	230,73
23	11	3,23	7,74	6,25	44,27	186,46	230,73
24	3	3,73	7,78	6,25	44,27	185,42	229,69

Mit den Messergebnissen des Prüfgutes **FT18P03** wurde ebenso verfahren wie bei dem Prüfgut FT18P02. Die graphischen Auswertungen zeigten, wie regelmäßig beobachtet, zahlreiche unterschiedlich signifikante Korrelationen der Messergebnisse zur laufenden Messnummer. Solche Korrelationen werden auch vorgetäuscht, wenn eine systematische Differenz zwischen den ersten und zweiten Messungen vorliegt, wie z.B. bei den acidimetrisch gemessenen Werten für Gesamtsäure oder den Werten für Freie Schweflige Säure. Ferner treten abweichende einzelne Messergebnisse bei denen die zweite Messung im zentralen Bereich der Streuung liegt regelmäßig auf. Ein offensichtlicher starker Ausreißer ist jedoch der potentiometrische Messwert mit der Laufenden Nummer 24 bei dem Parameter pH-Wert.

Wie die Tabelle 6 mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse aufzeigt, ist bei keinem Parameter ein signifikanter Unterschied zwischen den Proben und damit eine Inhomogenität nachweisbar. Diese Ergebnisse der Varianzanalyse sind gültig, soweit der Wert für  $s_r/s_{Ziel}$  nicht über 0,5 liegt. Die Forderung ist nur für Milchsäure und die potentiometrisch gemessenen pH-Werte nicht erfüllt. Eine Korrektur der Korrelation der Milchsäurewerte zur Meßfolge bzw. der Ausschluss des Ausreißers bei den pH-Werten verringerte den Wert dieses Quotienten deutlich. Bei dem Parameter Milchsäure wird der Richtwert nach der Korrektur nur noch formal, für die potentiometrischen Messwerte des pH-Wertes auch nach dem Ausschluss

Tabelle 5: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P03, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol g/L	Gesamt-extrakt g/L	Vergärb. Zucker (r) g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Glycerin g/L	pH-Wert	Gesamt-säure g/L	Wein-säure g/L	Äpfel-säure g/L	Milch-säure g/L	Milch-säure korr. g/L	Flücht-ige Säure g/L
1	5	1,00121	87,16	41,37	20,46	8,82	10,00	5,57	3,17	7,54	1,64	3,18	0,810	0,806	1,002
2	11	1,00122	87,08	41,34	20,41	8,62	10,06	5,56	3,17	7,54	1,61	3,20	0,870	0,861	1,006
3	1	1,00125	87,39	41,41	20,49	8,76	10,00	5,64	3,17	7,54	1,62	3,16	0,860	0,847	0,998
4	3	1,00122	87,27	41,37	20,49	8,87	9,96	5,55	3,17	7,55	1,63	3,12	0,800	0,783	0,987
5	15	1,00125	87,19	41,42	20,49	8,91	9,98	5,55	3,17	7,53	1,63	3,15	0,830	0,809	0,990
6	8	1,00125	87,37	41,39	20,37	8,73	10,05	5,72	3,16	7,53	1,62	3,16	0,860	0,834	1,005
7	6	1,00129	87,40	41,48	20,66	8,86	10,06	5,59	3,17	7,56	1,62	3,15	0,810	0,780	0,969
8	10	1,00124	87,21	41,41	20,51	8,88	9,98	5,62	3,17	7,54	1,63	3,12	0,840	0,806	0,988
9	14	1,00127	87,25	41,47	20,49	8,75	10,04	5,57	3,17	7,55	1,62	3,16	0,860	0,821	0,985
10	7	1,00127	87,34	41,45	20,50	8,84	10,02	5,66	3,17	7,54	1,63	3,14	0,880	0,837	0,990
11	12	1,00129	87,05	41,49	20,55	8,85	10,04	5,64	3,17	7,54	1,64	3,16	0,810	0,763	0,987
12	2	1,00132	86,93	41,42	20,56	8,84	10,04	5,63	3,17	7,55	1,62	3,19	0,860	0,809	1,000
13	15	1,00123	86,79	41,47	20,35	8,69	9,89	5,58	3,17	7,54	1,63	3,18	0,860	0,804	1,031
14	7	1,00121	86,83	41,49	20,43	8,70	9,97	5,48	3,18	7,55	1,62	3,23	0,890	0,830	1,025
15	1	1,00121	87,13	41,47	20,34	8,66	9,94	5,69	3,18	7,55	1,60	3,24	0,910	0,846	1,025
16	14	1,00129	87,13	41,55	20,64	8,62	10,01	5,59	3,17	7,56	1,62	3,18	0,910	0,842	1,020
17	8	1,00123	87,07	41,47	20,60	8,76	10,02	5,58	3,17	7,55	1,62	3,21	0,870	0,797	1,023
18	5	1,00127	87,06	41,51	20,62	8,79	9,97	5,52	3,17	7,56	1,60	3,21	0,920	0,843	1,012
19	10	1,00129	87,08	41,54	20,79	8,78	10,01	5,52	3,17	7,56	1,61	3,21	0,870	0,789	1,003
20	12	1,00125	87,07	41,55	20,47	8,82	9,86	5,58	3,18	7,58	1,62	3,16	0,870	0,784	1,012
21	6	1,00131	87,09	41,54	20,55	8,63	10,02	5,58	3,17	7,57	1,59	3,22	0,910	0,820	1,021
22	2	1,00126	87,24	41,53	20,49	8,64	9,91	5,58	3,17	7,57	1,59	3,19	0,970	0,876	1,022
23	11	1,00126	86,87	41,53	20,60	8,70	9,92	5,50	3,18	7,59	1,64	3,21	0,890	0,792	1,015
24	3	1,00130	87,05	41,58	20,54	8,66	9,97	5,65	3,17	7,58	1,61	3,18	0,920	0,817	1,010

deutlich überschritten. Bei vorsichtiger Interpretation tragen die potentiometrischen Messergebnisse nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei, widersprechen ihr aber nicht, da die mit FTIR gemessenen Werte völlig unauffällig sind.

**Tabelle 6: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT18P03**

	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	1,001258	24	0,9819	0,5086	0,000033		0,000132	0,250		0,00006
Vorh. Alkohol FTIR	87,127	24	0,4625	0,8940	0,1941		0,535	0,363		0,2800
Gesamtextrakt FTIR	41,469	24	0,3069	0,9701	0,0808		0,594	0,136		0,2498
Vergärbare Zucker FTIR	20,517	24	0,7878	0,6501	0,1096		0,597	0,184		0,2601
Glucose FTIR	8,757	24	0,5767	0,8145	0,1023		0,279	0,366		0,1468
Fructose FTIR	9,988	24	0,5759	0,8151	0,0607		0,313	0,194		0,1374
Glycerin FTIR	5,590	24	0,8481	0,6041	0,0606		0,244	0,248		0,1129
pH-Wert FTIR	3,171	24	0,9273	0,5463	0,0046		0,0476	0,096		0,0196
Gesamtsäure FTIR	7,553	24	0,7209	0,7024	0,0172		0,107	0,161		0,0458
Weinsäure FTIR	1,619	24	0,5758	0,8152	0,0158		0,0852	0,186		0,0372
Äpfelsäure FTIR	3,180	24	0,3978	0,9312	0,0387		0,0987	0,392		0,0534
Milchsäure FTIR	0,870	24	0,3514	0,9532	0,0498		0,0503	0,992		0,0504
- korrigiert	0,816	24	1,3743	0,2960	0,0260	0,0112	0,0476	0,545	0,236	0,0307
Flüchtige Säure FTIR	1,005	24	0,2189	0,9914	0,0203		0,0568	0,358		0,0296
pH-Wert, potentiometr.	3,227	24	0,8058	0,6362	0,1155		0,0476	2,427		0,1088
- ohne Lfd. Nr. 24	3,205	23	0,5837	0,8072	0,0285		0,0476	0,599		0,0326
Gesamtsäure acidim.	7,735	24	0,3743	0,9428	0,0408		0,1070	0,381		0,0572
Reduktone	6,31	24	0,3558	0,9513	0,2467		0,7656	0,322		0,3829
Freie SO <sub>2</sub>	43,86	24	0,4545	0,8989	0,5910		3,972	0,149		1,6852
Gebundene SO <sub>2</sub>	187,72	24	0,1497	0,9982	2,2179		13,66	0,162		5,8531
Gesamte SO <sub>2</sub>	231,58	24	0,3325	0,9609	1,8492		5,357	0,345		2,7488

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass beide Prüfgüter nach den Ergebnissen der Homogenitätsprüfung uneingeschränkt für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet sind.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

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

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

## 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT18P02 und FT18P03

### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT18P02 wird durch die in Tabelle 7 und für das Prüfgut FT18P03 durch die in Tabelle 8 zusammengestellten deskrip-

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

Für das **Prüfgut FT18P02** kam es bei 20 der 29 Datengruppen zu keinem Ergebnisausschluss, wobei grob fehlerhafte Werte, die nur bei zwei Datengruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte traten bei dem Parameter Reduktone fünfmal bei dem Parameter Gesamte Äpfelsäure einmal auf. Wegen einer Abweichung um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median wurden nur bei den Parametern Weinsäure (alle herkömmlichen Verfahren) und L-Äpfelsäure mehr als ein Laborergebnis ausgeschlossen. Auch die maßgeblichen Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  lagen in der Regel unter dem Richtwert 1,5. Dieser wurde bei den Parametern Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure, Weinsäure (alle herkömmlichen Verfahren), Flüchtige Säure, L-Äpfelsäure, Gesamte Milchsäure und Freie Schweflige Säure (Destillations- und photometrische Verfahren) mit Werten zwischen 1,6 und 1,9 mäßig überschritten. Bei diesen Parametern war häufig zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes mäßig eingeschränkt. Die Werte des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  überschritten den Höchstwert 2,0 eindeutig bei den Parametern **Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Reduktone** sowie **jodometrisch bestimmte Freie und Gesamte Schweflige Säure jeweils nach Abzug der Reduktone**. Bei diesen Parametern war stets auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt oder nicht mehr gegeben, wie die auf über 0,4 oder sogar über 0,5 erhöhten Werte des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  ausweisen. Prüfgutübergreifend wurden die Ergebnisse für die zweite Gruppe der auffälligen Parameter bereits in Teil 1 des Berichtes dargestellt und diskutiert. Für diese Parameter können **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Für **alle anderen Parameter** sind die erhaltenen **Z-Score aussagekräftig**.

#### **Erläuterungen zur Tabelle 7 und zur Tabelle 8 :**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT18P02

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Labor-Stdfehler $u_M$	Zielstandardabweichungen			Quotienten				
							n. Horwitz $s_H$	exp. herk. $s_{exp}$	exp. FTIR $s_{\bar{U}}$	$s_L/s_H$	$s_L/s_{exp}$	$s_L/s_{\bar{U}}$	$u_M/s_{Ziel}$	$u_M/s_{\bar{U}}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	52	51	1,00736	1,00736	0,000130	0,000018			0,000132	0,000190	0,98	0,68	0,14	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	27	27	83,46	83,51	0,897	0,173	2,427	0,535	0,886	0,37	1,68	1,01	0,32	0,19
Gesamtextrakt (g/L)	45	44	55,78	55,80	0,550	0,0829	1,723	0,594	0,594	0,32	0,93	0,93	0,14	0,14
Vergärbare Zucker (g/L)														
- enzymatisch + HPLC	31	31	27,16	27,19	0,475	0,0853	0,936	0,777	0,777	0,51	0,61	0,61	0,11	0,11
- reduktometrisch	12	12	28,69	28,73	1,679	0,485	0,980	0,818	0,818	1,71	2,05	2,05	0,59	0,59
Glucose (g/L)	32	32	13,63	13,57	0,308	0,0544	0,518	0,409	0,409	0,59	0,75	0,75	0,13	0,13
Fructose (g/L)	32	32	13,60	13,60	0,381	0,0674	0,519	0,410	0,410	0,73	0,93	0,93	0,16	0,16
Glycerin (g/L)	18	18	7,251	7,170	0,445	0,105	0,302		0,348	1,48		1,28	0,35	0,30
- $Z_{Max} = 4,5$	18	17	7,168	7,170	0,281	0,0683	0,302		0,348	0,93		0,81	0,23	0,20
pH-Wert	43	42	3,746	3,750	0,0562	0,0087		0,0476	0,049		1,18	1,14	0,18	0,18
Gesamtsäure (g/L)	46	46	5,719	5,735	0,168	0,0248	0,249	0,107	0,145	0,67	1,57	1,16	0,23	0,17
Weinsäure (g/L)														
- nur HPLC	12	11	1,792	1,790	0,124	0,0375	0,0928		0,227	1,34		0,55	0,40	0,17
- alle herk. Verfahren	29	26	1,793	1,807	0,146	0,0286	0,0935		0,227	1,56		0,64	0,31	0,13
Flüchtige Säure (g/L)	24	23	0,6350	0,6500	0,071	0,0148	0,0392		0,0891	1,81		0,80	0,38	0,17
Acetat als Essigsäure (g/L)														
- enzymatisch, automatisiert	21	21	0,6249	0,6300	0,0458	0,0100	0,0382		0,0382	1,20		1,20	0,26	0,26
- sonst. Verfahren, $Z_{Max}=4,5$	9	9	0,5847	0,5700	0,0412	0,0137	0,0351		0,0351	1,17		1,17	0,39	0,39
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	10 (1)	10	0,9364	0,9350	0,0438	0,0139	0,0534	0,0416	0,218	0,82	1,05	0,20	0,33	0,06
L-Äpfelsäure (g/L)	31	29	0,9490	0,9500	0,0661	0,0123	0,0542	0,0420		1,22	1,57		0,29	
Gesamte Milchsäure (g/L)	18	18	2,422	2,478	0,237	0,0560	0,122		0,209	1,94		1,14	0,46	0,27
L-Milchsäure (g/L)	29	28	1,989	1,991	0,147	0,0278	0,102	0,106		1,45	1,38		0,26	
Reduktone (mg/L)	36 (5)	36	18,72	18,50	4,48	0,75	1,91			2,35			0,39	
Freie Schweflige Säure (mg/L)														
Destillation	10	10	52,91	53,66	3,82	1,21	4,71		4,71	0,81		0,81	0,26	0,26
Destillation + Photometrie	18	18	48,62	51,20	7,49	1,77	4,53		4,53	1,65		1,65	0,39	0,39
- jodometrisch incl. Reduktone	28	28	56,73	57,50	4,98	0,94	5,00			1,00			0,19	
- jodometrisch excl. Reduktone	10	10	39,52	39,00	10,66	3,37	3,60	5,00		2,96	2,13		0,67	
- wie vor, Basis erweitert	34	34	38,98	38,00	7,33	1,26	3,52	5,00		2,09	1,47		0,25	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillationsverfahren	32	32	91,03	89,00	7,04	1,24	7,25	5,36	7,25	0,97	1,31	0,97	0,23	0,17
- jodometrisch incl. Reduktone	17	17	94,85	92,00	8,26	2,00	7,45	5,36		1,11	1,54		0,37	
- jodometrisch excl. Reduktone*)	22	22	79,33	78,50	11,36	2,42	6,51	5,36		1,74	2,12		0,45	

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

Bei dem Prüfgut **FT18P03** war in der Auswertung bei 17 von 30 Wertegruppen kein Laborergebnis auszuschließen, wobei wiederum grob fehlerhafte Werte, die in vier Gruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Bei weiteren zehn Wertegruppen war aufgrund eines absoluten Z-Score-Betrages über 5 nur jeweils ein Laborergebnis auszuschließen. Lediglich bei den Parametern Relative Dichte und mit Destillationsverfahren bestimmter Gesamter Schwefliger Säure wurden aus diesem Grund zwei Laborergebnisse bei der wiederholten Berechnung ausgeschlossen. Um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte traten je zweimal bei den Parametern Reduktone und Freie Schwefliger Säure (jodometrisch ohne Reduktonabzug) auf. Mit 15 Wertegruppen lag bei nur der Hälfte der Wertegruppen der Quotient  $s_L/s_Z$  im unauffälligen Bereich bis zu 1,5. Bei acht Wertegruppen war der Quotient mäßig auf einen Betrag von rund 1,6 bis 2,0 erhöht, wobei der Höchstwert 2,0 bei den Parametern Vorhandener Alkohol und Freie Schweflige Säure (jodometrisch ohne Reduktonabzug) erreicht wurde. Bei weiteren sieben Wertegruppen, darunter Vergärbare Zucker (reduktometrisch), **Flüchtige Säure**, **Reduktone** sowie der von der Qualität der Reduktonbestimmung abhängigen **jodometrisch unter Abzug der Reduktone bestimmten Freien Schwefligen Säure** wurde der Höchstwert 2,0 überschritten. Bei den drei zuletzt genannten Parametern ist der Befund dafür entscheidend, dass **keine gültige Bewertung** der Laborleistung durch **Z-Score** möglich ist. Bei dem Parameter Flüchtige Säure ist außerdem die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt und für die beiden anderen Parameter nicht gegeben.

Eine **eingeschränkte Zuverlässigkeit** des Bezugswertes in Kombination mit unauffälligen oder mäßig erhöhten Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  liegt bei weiteren Auswertungsvarianten vor. Sie ist bei den Parametern **Vorhandener Alkohol**, **Acetat**, **Gesamte Äpfelsäure**, **Gesamte Milchsäure** sowie den verschiedenen Varianten der Bestimmung der **Freien Schwefligen Säure** vor einer Bewertung **der Z-Score** zu Lasten des Labors zu beachten.

Bei dem Parameter **Glycerin** wurden zur Bewertung nur die Ergebnisse enzymatischer Bestimmungsverfahren herangezogen, weil die mittels HPLC erhaltenen Laborergebnisse wie die Tabelle im Abschnitt 5.7.3 belegt, wahrscheinlich infolge von Störeinflüssen aus der Prüfgutmatrix, einen signifikant höheren Mittelwert und zugleich eine erheblich größere Streuung aufwiesen. Bei deren Einbeziehen war keine gültige Bewertung der Laborleistung zu erwarten. Zugleich veranschaulichen die beiden Auswertungsvarianten in Tabelle 8 den großen Einfluss einzelner stärker abweichender Laborergebnisse auf das Gesamtergebnis, hier vor allem die Zuverlässigkeit des Bezugswertes bei geringer Ergebnisanzahl.

Das erhebliche Störpotential einzelner, stärker abweichender Laborergebnisse für das Gesamtergebnis demonstrieren auch die beiden **informierenden Auswertungen** für die Ergebnisse der Bestimmung der **Freien Schwefligen Säure im Destillationsverfahren**. In diesem Fall wirkt sich ein stärker abweichendes, durch die normale Ausschlussregel noch nicht erfasstes Laborergebnis sowohl auf die Kenngröße der Verfahrensbeherrschung  $s_L/s_{Ziel}$  als auch auf die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ausgedrückt durch den Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  aus.



**Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT18P03**

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	54	52	1,00138	1,00137	0,000133	0,000018			0,000132	0,000190		1,01	0,70	0,14	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	27	27	84,587	84,500	1,066	0,205	2,451	0,535	0,886	0,43	1,99	1,20	0,38	0,23	
Gesamtextrakt (g/L)	47	46	40,85	40,85	0,591	0,087	1,322	0,594	0,594	0,45	1,00	1,00	0,15	0,15	
Vergärbare Zucker (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	34	34	18,75	18,60	0,559	0,096	0,678	0,545	0,584	0,82	1,02	0,96	0,18	0,16	
- reduktometrisch	12	12	19,22	19,45	1,200	0,346	0,704	0,568	0,584	1,70	2,11	2,05	0,61	0,59	
Glucose (g/L)	36	35	7,895	7,880	0,262	0,044	0,327	0,256	0,408	0,80	1,03	0,64	0,17	0,11	
Fructose (g/L)	35	35	10,776	10,700	0,265	0,045	0,424	0,332	0,332	0,62	0,80	0,80	0,13	0,13	
Glycerin (g/L)															
- enzymatisch	11	10	5,408	5,425	0,374	0,118	0,238		0,348	1,57		1,07	0,50	0,34	
- wie vorstehend, z <sub>Max</sub> =  4	11	9	5,512	5,430	0,187	0,0624	0,238		0,348	0,79		0,54	0,26	0,18	
pH-Wert	46	46	3,280	3,290	0,0515	0,0076		0,0476	0,0493		1,08	1,05	0,16	0,15	
Gesamtsäure (g/L)	50	50	7,518	7,510	0,135	0,0190	0,314	0,107	0,145	0,43	1,26	0,93	0,18	0,13	
Weinsäure (g/L)															
- HPLC + IC	12	12	2,174	2,148	0,140	0,0405	0,108		0,227	1,30		0,62	0,37	0,18	
- alle herkömmlichen Verfahren	32	32	2,230	2,195	0,145	0,0257	0,110		0,227	1,32		0,64	0,23	0,11	
Flüchtige Säure (g/L) ohne SO <sub>2</sub>	28	27	1,239	1,242	0,139	0,0268	0,0680		0,0891	2,05		1,56	0,39	0,30	
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- enzymatisch, automatisiert	19	18	1,348	1,355	0,121	0,0285	0,0732		0,0732	1,65		1,65	0,39	0,39	
- sonstige Verfahren	9	9	1,183	1,161	0,0810	0,0270	0,0642		0,0642	1,26		1,26	0,42	0,42	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	12	12	2,608	2,560	0,141	0,0407	0,126	0,0829	0,218	1,12	1,70	0,65	0,49	0,19	
L-Äpfelsäure (g/L)	31	30	2,564	2,530	0,135	0,0246	0,124	0,0822		1,08	1,64		0,30		
Gesamte Milchsäure (g/L)	18	18	0,9666	0,9845	0,0902	0,0213	0,0558		0,209	1,62		0,43	0,38	0,10	
L-Milchsäure (g/L)	28 (1)	27	0,5868	0,5790	0,0623	0,0120	0,0356	0,0434		1,75	1,43		0,28		
Reduktone (mg/L)	16 (2)	16	4,30	4,35	1,50	0,375	0,557			2,69			0,67		
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillation	10	10	30,79	30,70	6,16	1,95	2,93		2,93	2,10			0,66		
- wie vorstehend; z <  4,5	10	9	29,19	30,40	3,74	1,25	2,91		2,91	1,29			0,43		
- Destillation + Photometrie	18 (1)	17	29,24	29,80	4,94	1,20	2,86		2,86	1,73		1,73	0,42	0,42	
- jodometr. incl. Reduktone	30 (2)	30	29,29	28,50	5,62	1,03	2,75			2,04			0,37		
- jodometr. excl. Reduktone	11	11	31,26	30,00	6,38	1,92	2,88	2,75		2,22	2,31		0,70		
- wie vor, Basis erweitert *)	19	19	30,07	30,00	6,89	1,58	2,88	2,75		2,39	2,50		0,57		
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	32	30	214,68	212,50	7,50	1,37	15,18	5,36	15,18	0,49	1,40	0,49	0,26	0,09	
- jodometr. incl. Reduktone	18	17	208,14	205,00	6,75	1,64	14,72	5,36		0,46	1,26		0,31		
- jodometr. excl. Reduktone *)	12	12	211,53	211,00	11,74	3,39	15,09	5,36		0,78	2,19		0,63		

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

Bei dem Parameter **Weinsäure** ergibt sich die eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Gruppe der mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Ionenchromatographie (IC) ermittelten Werte vor allem aus der relativ geringen Anzahl gültiger Laborergebnisse. Daher wurden die Laborergebnisse für diesen Parameter unter Einschluss der Ergebnisse photometrischer Verfahren bewertet. Durch die knapp dreimal höhere Ergebnisanzahl resultierte trotz der gegenüber den mittels HPLC erhaltenen Laborergebnissen erhöhten Streuung eine geringere Unsicherheit des Bezugswertes.

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

Bei zusammenfassender Betrachtung werden für die Mehrzahl der Parameter **gültige Z-Score** erhalten. **Ausgenommen** sind die Parameter **Flüchtige Säure**, **Reduktone** sowie **Freie Schweflige Säure nach Abzug der Reduktone**, wobei für die Parameter Vorhandener Alkohol, Acetat, Gesamte Äpfelsäure, Gesamte Milchsäure sowie bei allen zur Bewertung der Laborleistung herangezogenen Varianten der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure die eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes zu berücksichtigen ist.

### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 begründet, wurden auch für die Prüfgüter FT18P02 und FT18P03 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unter Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung der Laborergebnisse durch ein robustes Verfahren unterzogen. Hierbei werden vor allem die Standardabweichungen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT18P02 in der Tabelle 9 und für das Prüfgut FT18P03 in der Tabelle 10 zusammengefasst.

---

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

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

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

**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{FTIR}$ )** = 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

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

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

**Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut FT18P02**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. (S <sub>L</sub> )	Zielstdabw n. Horwitz (S <sub>H</sub> )	Zielstdabw exp. FTIR (S <sub>FTIR</sub> )	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	76	1,00705	1,007045	0,000356		0,000146		<b>2,44</b>	0,28
Vorhandener Alkohol (g/L)	78	84,721	84,750	1,008	2,458	0,739	0,41	1,36	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	49	55,906	55,840	0,782	1,724	0,415	0,45	<b>1,88</b>	0,27
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	72	29,151	29,225	1,290	0,995	0,354	1,30	<b>3,64</b>	<b>0,43</b>
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	75	28,283	28,400	1,233	0,971	0,354	1,27	<b>3,48</b>	<b>0,40</b>
Glucose (g/L)	75	14,399	14,500	0,835	0,548	0,288	1,52	<b>2,90</b>	0,33
Fructose (g/L)	75	13,883	13,860	0,785	0,528	0,222	1,49	<b>3,54</b>	<b>0,41</b>
Glycerin (g/L)	67	6,688	6,600	0,777	0,281	0,265	<b>2,76</b>	<b>2,93</b>	<b>0,36</b>
pH-Wert	76	3,671	3,670	0,0742		0,0188		<b>3,95</b>	<b>0,45</b>
Gesamtsäure (g/L)	78	5,499	5,500	0,186	0,241	0,0816	0,77	<b>2,28</b>	0,26
Weinsäure (g/L)	71	1,660	1,550	0,435	0,082	0,132	<b>5,30</b>	<b>3,30</b>	<b>0,39</b>
Flüchtige Säure (g/L)	71	0,550	0,565	0,1275	0,0348	0,0427	<b>3,66</b>	<b>2,99</b>	0,35
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	71	0,709	0,670	0,330	0,0403	0,0975	<b>8,20</b>	<b>3,38</b>	<b>0,40</b>
Gesamte Milchsäure (g/L)	69	2,387	2,430	0,458	0,120	0,0805	<b>3,81</b>	<b>5,69</b>	<b>0,68</b>
Freie Schweflige Säure (mg/L)	20	45,50	46,00	6,40	4,14	4,14	1,55	1,55	0,35
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	21	89,64	91,00	11,10	7,38	7,38	1,50	1,50	0,33

**Tabelle 10: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT18P03**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw n. Horwitz S <sub>H</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>FTIR</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	76	1,00123	1,001200	0,000264		0,000146		<b>1,80</b>	0,21
Vorhandener Alkohol (g/L)	78	86,093	86,000	1,029	2,488	0,739	0,41	1,39	0,16
Gesamtextrakt (g/L)	49	41,314	41,300	0,802	1,334	0,415	0,60	<b>1,93</b>	0,28
Vergärbare Zucker (r)	72	19,780	19,950	1,035	0,719	0,354	1,44	<b>2,92</b>	0,34
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	75	18,678	18,600	0,946	0,678	0,354	1,40	<b>2,67</b>	0,31
Glucose (g/L)	75	8,719	8,700	0,498	0,355	0,288	1,40	<b>1,73</b>	0,20
Fructose (g/L)	75	9,923	9,880	0,742	0,396	0,222	<b>1,87</b>	<b>3,34</b>	<b>0,39</b>
Glycerin (g/L)	68	5,795	5,765	0,507	0,251	0,265	<b>2,02</b>	<b>1,91</b>	0,23
pH-Wert	76	3,272	3,270	0,0821		0,0188		<b>4,37</b>	<b>0,50</b>
Gesamtsäure (g/L)	78	7,536	7,595	0,192	0,317	0,0816	0,61	<b>2,35</b>	0,27
Weinsäure (g/L)	71	1,375	1,340	0,381	0,073	0,132	<b>5,26</b>	<b>2,89</b>	0,34
Flüchtige Säure (g/L)	70	1,094	1,080	0,181	0,0604	0,0427	<b>2,99</b>	<b>4,23</b>	<b>0,51</b>
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	71	3,122	3,200	0,409	0,152	0,0975	<b>2,69</b>	<b>4,20</b>	<b>0,50</b>
Gesamte Milchsäure (g/L)	69	0,979	1,000	0,311	0,057	0,0805	<b>5,49</b>	<b>3,86</b>	<b>0,46</b>
Freie Schweflige Säure (mg/L)	20	26,61	26,00	8,88	2,55	2,55	<b>3,49</b>	<b>3,49</b>	<b>0,78</b>
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	21	218,86	218,91	21,36	15,56	15,56	1,37	1,37	0,30

Wie bereits in Teil 1 der Berichte für das Prüfgut FT18P01 angesprochen, weisen auch bei den Prüfgütern **FT18P02** und **FT18P03** die Messergebnisse für fast alle Parameter bei Gegenüberstellung mit der Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens **erhöhte Quotienten  $s_L/s_{FTIR}$**  auf. Davon sind bei dem farbstarken Rotwein-Prüfgut FT18P02 und dem biologisch belasteten Weißwein-Prüfgut FT18P03 noch mehr Parameter betroffen als bei dem Prüfgut FT18P01. Dies dürfte vor allem auf den Einsatz unterschiedlicher Kalibrierungen zurückzuführen sein, weil bei einheitlicher Kalibrierung Matrixeffekte für den Vergleich von FTIR-Ergebnissen untereinander nicht zur Streuung zwischen den Laboratorien beitragen. Insoweit zeigt auch dieser Befund eine mangelhafte Nutzung der Möglichkeiten des Verfahrens an. Eine durchgehende Ausnahme besteht nur für die Parameter Vorhandener Alkohol und für Gesamte Schweflige Säure auf der Basis des geänderten Leistungskriteriums. Bei dem Parameter Freie Schweflige Säure wird im Allgemeinen ebenfalls eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Messergebnisse beobachtet. Insoweit liegt bei dem Prüfgut FT18P03 eine Ausnahme vor. Da zu deren Bestimmung nach der Kenntnis des Auswerter weitgehend einheitliche Kalibrierungen verwendet werden, ist die Ursache der mangelnden Übereinstimmung nicht offensichtlich.

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

**Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT18P02**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	$Z_{\bar{U}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00705	1,00736	-0,000315	0,000190	-1,66
Vorhandener Alkohol (g/L)	84,750	83,510	1,240	0,886	1,40
Gesamtextrakt(g/L)	55,840	55,800	0,040	0,594	0,07
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	29,225	28,725	0,500	0,818	0,61
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	28,400	27,190	1,210	0,777	1,56
Glucose (g/L)	14,500	13,565	0,935	0,409	2,29
Fructose (g/L)	13,860	13,600	0,260	0,410	0,63
Glycerin (g/L)	6,600	7,170	-0,570	0,348	-1,64
pH-Wert	3,740	3,750	-0,010	0,049	-0,20
Gesamtsäure (g/L)	5,500	5,735	-0,235	0,145	-1,62
Weinsäure (g/L)	1,550	1,807	-0,257	0,227	-1,13
Flüchtige Säure (g/L)	0,565	0,650	-0,085	0,089	-0,95
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	0,670	0,935	-0,265	0,218	-1,22
Gesamte Milchsäure (g/L)	2,430	2,478	-0,048	0,209	-0,23
Freie Schweflige Säure (mg/L)	46,00	51,20	-5,20	4,53	-1,15
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	91,00	89,00	2,00	7,25	0,28

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

Ein statistisch erheblicher Unterschied der Medianwerte zeigt sich bei dem Prüfgut **F18P02** für die Parameter **Relative Dichte, Vergärbare Zucker (Summe), Glucose, Glycerin** und **Gesamtsäure**. Weiterhin sind die absoluten Beträge der Z<sub>0</sub>-Score für die Parameter Vorhandener Alkohol, Weinsäure, Gesamte Äpfelsäure und Freie Schweflige Säure über den Richtwert erhöht. Dies deutet auf relativ starke Matrixeffekte bei dem intensiv farbigen Rotwein-Prüfgut.

Bei dem Prüfgut **FT18P03** werden ebenfalls bei relativ vielen Parametern erheblich erhöhte Z<sub>0</sub>-Score der FTIR-Medianwerte beobachtet. Betroffen sind die Parameter **Vorhandener Alkohol, Glucose, Fructose**, letzere mit unterschiedlichen Vorzeichen, sodass bei dem Summenparameter Vergärbare Zucker kein ausgeprägter Matrixeffekt resultiert. Weiterhin ergeben sich für die Parameter **Weinsäure, Flüchtige Säure** und **Gesamte Äpfelsäure** sowie **Freie Schweflige Säure** erheblich erhöhte absolute Beträge der Z<sub>0</sub>-Score für die Mediane.

Die deutlichen Matrixeffekte bei diesen Prüfgütern zeigen an, dass die eingesetzten Kalibrierungen infolge unzureichender Vertretung entsprechenden Probematerials bei Erstellen der Parameterkalibrierungen materialspezifische Einflüsse nicht genügend ausgleichen. Die Messergebnisse bei diesen Prüfgütern sind daher nur eingeschränkt zur Überprüfung der eigenen Arbeitsumgebung geeignet. **Erhöhte Beträge der Z-Score bei diesen Prüfgütern können daher nicht ohne eine sorgfältige Interpretation zu Lasten der Teilnehmer gewertet werden.**

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

**Tabelle 12: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT18P03**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00120	1,00137	-0,000170	0,000190	-0,89
Vorhandener Alkohol (g/L)	86,000	84,500	1,500	0,886	<b>1,69</b>
Gesamtextrakt (g/L)	41,300	40,850	0,450	0,594	0,76
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	19,950	19,450	0,500	0,584	0,86
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	18,600	18,600	0,000	0,584	0,00
Glucose (g/L)	8,700	7,880	0,820	0,408	<b>2,01</b>
Fructose (g/L)	9,880	10,700	-0,820	0,332	<b>-2,47</b>
Glycerin (g/L)	5,765	5,420	0,345	0,348	0,99
pH-Wert	3,270	3,290	-0,020	0,049	-0,41
Gesamtsäure (g/L)	7,595	7,510	0,085	0,145	0,59
Weinsäure (g/L)	1,340	2,195	-0,855	0,227	<b>-3,77</b>
Flüchtige Säure (g/L)	1,080	1,242	-0,162	0,089	<b>-1,82</b>
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	3,200	2,560	0,640	0,218	<b>2,94</b>
Gesamte Milchsäure (g/L)	1,000	0,984	0,016	0,209	0,08
Freie Schweflige Säure (mg/L)	26,00	29,80	-3,80	2,86	<b>-1,33</b>
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	218,91	212,50	6,41	15,18	0,42

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT18P02

### 4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	1,00733	-0,000030	-0,23	
02	LwK 8.1	1,00716	-0,000200	-1,52	
03	LwK 8.1	1,00730	-0,000060	-0,45	
04	LwK 8.4	1,00742	0,000060	0,45	
05	LwK 8.4	1,00731	-0,000050	-0,38	
06	LwK 8.4	1,00749	0,000130	0,98	
07	LwK 8.4	1,00739	0,000030	0,23	
11	LwK 8.4	1,00751	0,000150	1,14	
12	LwK 8.4	1,00750	0,000140	1,06	
14	LwK 8.4	1,00737	0,000010	0,08	
16	LwK 8.4	1,00720	-0,000160	-1,21	
17	LwK 8.4	1,00736	0,000000	0,00	
19	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
20	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
22	LwK 8.4	1,00741	0,000050	0,38	
23	LwK 8.4	1,00760	0,000240	1,82	
24	LwK 8.4	1,00727	-0,000090	-0,68	
25	LwK 8.4	1,00735	-0,000010	-0,08	
27	LwK 8.4	1,00735	-0,000010	-0,08	
28	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
29	LwK 8.4	1,00731	-0,000050	-0,38	
30	LwK 8.1	1,00710	-0,000260	-1,97	
31	LwK 8.4	1,00736	0,000000	0,00	
33	LwK 8.1	1,00730	-0,000060	-0,45	
35	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
37	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
38	LwK 8.3	1,00746	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
40	LwK 8.4	1,00736	0,000000	0,00	
41	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
42	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
43	LwK 8.4	1,00736	0,000000	0,00	
45	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
47	LwK 8.4	1,00732	-0,000040	-0,30	
50	LwK 8.4	1,00734	-0,000020	-0,15	
51	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
53	LwK 8.4	1,00750	0,000140	1,06	
55	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
56	LwK 8.4	1,00721	-0,000150	-1,14	
59	LwK 8.4	1,00734	-0,000020	-0,15	
60	LwK 8.4	1,00680	-0,000560	-4,24	
61	LwK 8.4	1,00750	0,000140	1,06	
62	LwK 8.4	1,00732	-0,000040	-0,30	
63	LwK 8.4	1,00740	0,000040	0,30	
64	LwK 8.4	1,00760	0,000240	1,82	
66	LwK 8.4	1,00750	0,000140	1,06	
68	LwK 8.4	1,00738	0,000020	0,15	
74	LwK 8.4	1,00760	0,000240	1,82	
80	LwK 8.4	1,00730	-0,000060	-0,45	
81	LwK 8.4	1,00948	0,002120	16,06	(**)
84	LwK 8.2	1,00570	-0,001660	-12,58	(**)
86	LwK 8.4	1,00735	-0,000010	-0,08	
92	LwK 8.4	1,00744	0,000080	0,61	

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

## 4.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00670	-0,000660	-3,47	
202	FTIR	1,00683	-0,000530	-2,79	
203	FTIR	1,00659	-0,000770	-4,05	
204	FTIR	1,00713	-0,000230	-1,21	
206	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
207	FTIR	1,00740	0,000040	0,21	
208	FTIR	1,00729	-0,000070	-0,37	
209	FTIR	1,00670	-0,000660	-3,47	
210	FTIR	1,00741	0,000050	0,26	
212	FTIR	1,00698	-0,000380	-2,00	
213	FTIR	1,00790	0,000540	2,84	
214	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
216	FTIR	1,00700	-0,000360	-1,89	
217	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
218	FTIR	1,00700	-0,000360	-1,89	
219	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
220	FTIR	1,00698	-0,000380	-2,00	
221	FTIR	1,00680	-0,000560	-2,95	
222	FTIR	1,00670	-0,000660	-3,47	
223	FTIR	1,00707	-0,000290	-1,53	
224	FTIR	1,00780	0,000440	2,32	
225	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
226	FTIR	1,00650	-0,000860	-4,53	
227	FTIR	1,00702	-0,000340	-1,79	
228	FTIR	1,00710	-0,000260	-1,37	
229	FTIR	1,00697	-0,000390	-2,05	
230	FTIR	1,00610	-0,001260	-6,63	(**)
231	FTIR	1,00666	-0,000700	-3,68	
233	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
235	FTIR	1,00672	-0,000640	-3,37	
236	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
237	FTIR	1,00719	-0,000170	-0,89	
238	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
241	FTIR	1,00685	-0,000510	-2,68	
242	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
243	FTIR	1,00716	-0,000200	-1,05	
244	FTIR	1,00730	-0,000060	-0,32	
245	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
246	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
247	FTIR	1,00700	-0,000360	-1,89	
249	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
250	FTIR	1,00730	-0,000060	-0,32	
251	FTIR	1,00780	0,000440	2,32	
254	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
255	FTIR	1,00710	-0,000260	-1,37	
256	FTIR	1,00728	-0,000080	-0,42	
257	FTIR	1,00660	-0,000760	-4,00	
258	FTIR	1,00680	-0,000560	-2,95	
259	FTIR	1,00647	-0,000890	-4,68	
260	FTIR	1,00750	0,000140	0,74	
261	FTIR	1,00740	0,000040	0,21	
262	FTIR	1,00750	0,000140	0,74	
263	FTIR	1,00680	-0,000560	-2,95	
264	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
265	FTIR	1,00700	-0,000360	-1,89	
266	FTIR	1,00733	-0,000030	-0,16	
267	FTIR	1,00660	-0,000760	-4,00	
268	FTIR	1,00722	-0,000140	-0,74	
269	FTIR	1,00740	0,000040	0,21	
270	FTIR	1,00720	-0,000160	-0,84	
271	FTIR	1,00706	-0,000300	-1,58	
273	FTIR	1,00703	-0,000330	-1,74	
274	FTIR	1,00650	-0,000860	-4,53	
275	FTIR	1,00670	-0,000660	-3,47	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	1,00760	0,000240	1,26	
277	FTIR	1,00730	-0,000060	-0,32	
278	FTIR	1,00690	-0,000460	-2,42	
280	FTIR	1,00530	-0,002060	-10,84	(**)
281	FTIR	1,00710	-0,000260	-1,37	
282	FTIR	1,00780	0,000440	2,32	
283	FTIR	1,00775	0,000390	2,05	
284	FTIR	1,00520	-0,002160	-11,37	(**)
322	FTIR	1,00620	-0,001160	-6,11	(**)
338	FTIR	1,00737	0,000010	0,05	
349	FTIR	1,00740	0,000040	0,21	
363	FTIR	1,00730	-0,000060	-0,32	

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

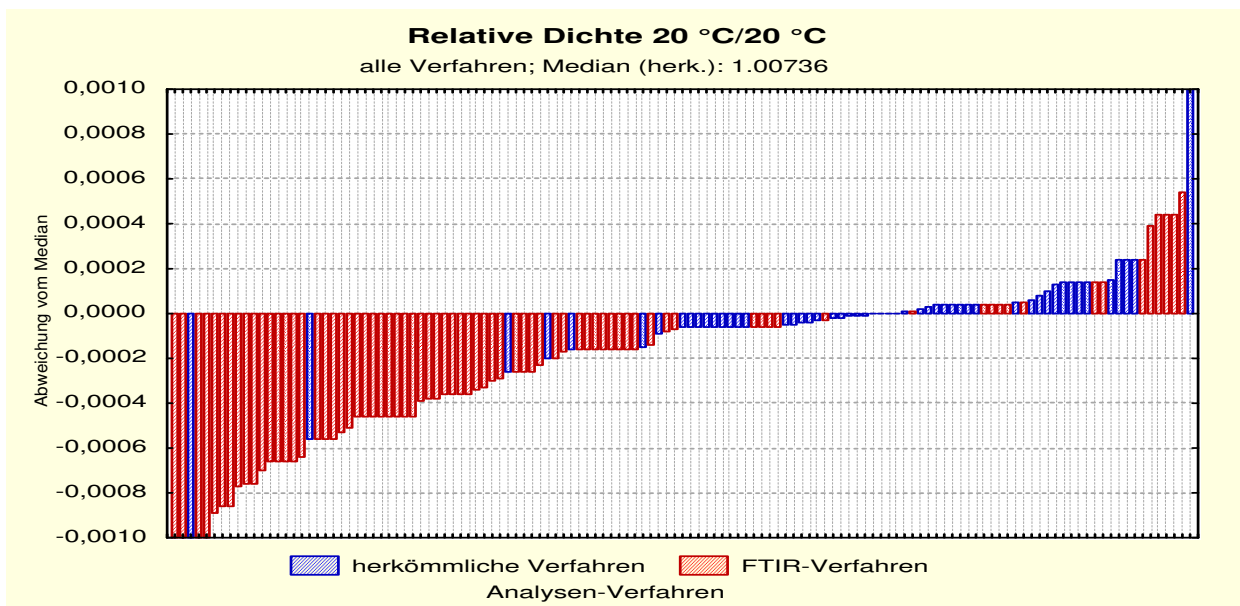
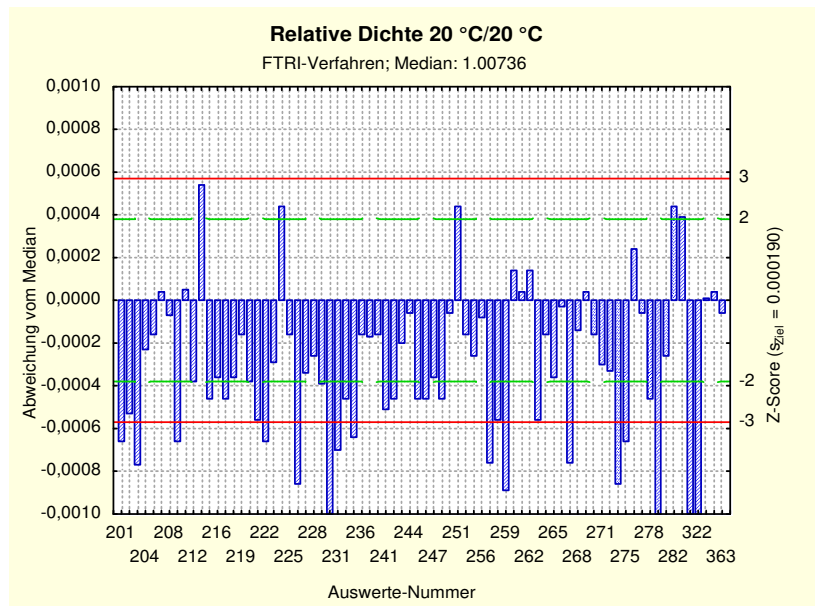
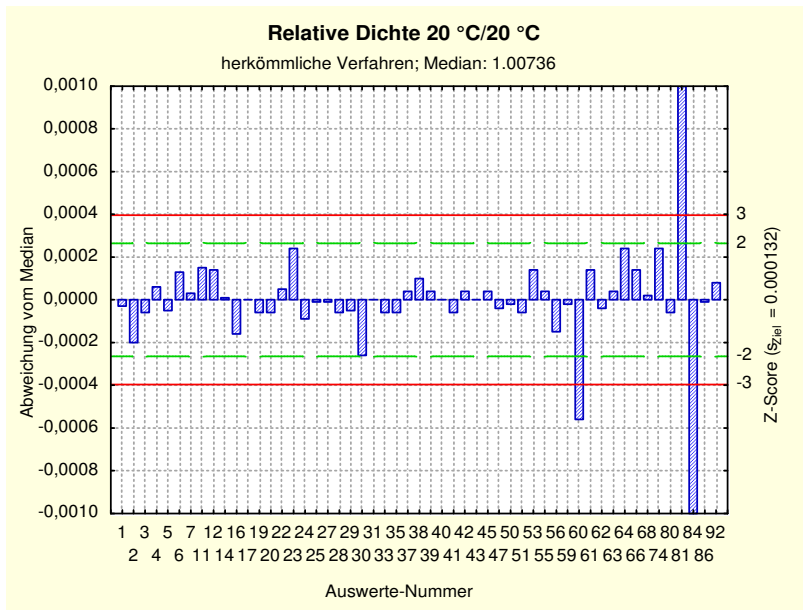
**4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	52	51
Minimalwert	1,00680	1,00680
Mittelwert	1,007399	1,007358
Median	1,007360	1,007360
Maximalwert	1,00948	1,00760
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,000321	0,000130
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,000045	0,000018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>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> )	2,43	0,98
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	2,08	0,68
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,34	0,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	2,08	0,68

**4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	5	1,00724	0,000106
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	1,00746	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	46	1,00738	0,000090
	herkömmliche Verfahren	52	1,00737	0,000099
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	1,00705	0,000356





## 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	83,00	-0,510	-0,21	-0,95	
02	LwK 2.1	85,60	2,090	0,86	3,91	
03	LwK 2.4	83,80	0,290	0,12	0,54	
04	LwK 2.9	84,95	1,440	0,59	2,69	
05	LwK 2.1	82,08	-1,429	-0,59	-2,67	
06	LwK 2.4	83,42	-0,090	-0,04	-0,17	
07	LwK 2.9	83,90	0,390	0,16	0,73	
11	LwK 2.1	83,77	0,260	0,11	0,49	
12	LwK 2.1	82,60	-0,910	-0,37	-1,70	
14	LwK 2.1	82,70	-0,810	-0,33	-1,51	
16	LwK 2.9	84,21	0,700	0,29	1,31	
17	LwK 2.9	84,20	0,690	0,28	1,29	
19	LwK 2.9	84,30	0,790	0,33	1,48	
20	LwK 2.1	84,69	1,180	0,49	2,21	
22	LwK 2.7	82,62	-0,890	-0,37	-1,66	
23	LwK 2.7	84,16	0,650	0,27	1,21	
24	LwK 2.9	83,70	0,190	0,08	0,36	
25	LwK 2.5	83,70	0,190	0,08	0,36	
27	LwK 2.1	83,48	-0,030	-0,01	-0,06	
28	LwK 2.4	84,10	0,590	0,24	1,10	
29	LwK 2.5	84,00	0,490	0,20	0,92	
30	LwK 2.4	83,80	0,290	0,12	0,54	
31	LwK 2.1	83,51	0,000	0,00	0,00	
33	LwK 2.4	84,12	0,610	0,25	1,14	
36	LwK 2.9	84,80	1,290	0,53	2,41	
38	LwK 2.2	84,50	0,990	0,41	1,85	
39	LwK 2.9	84,60	1,090	0,45	2,04	
40	LwK 2.1	83,70	0,190	0,08	0,36	
41	LwK 2.4	83,65	0,140	0,06	0,26	
42	LwK 2.5	82,97	-0,540	-0,22	-1,01	
45	LwK 2.1	83,40	-0,110	-0,05	-0,21	
47	LwK 2.1	84,50	0,990	0,41	1,85	
50	LwK 2.9	84,00	0,490	0,20	0,92	
51	LwK 2.9	83,40	-0,110	-0,05	-0,21	
53	LwK 2.9	82,10	-1,410	-0,58	-2,64	
55	LwK 2.1	83,53	0,020	0,01	0,04	
56	LwK 2.9	84,20	0,690	0,28	1,29	
59	LwK 2.9	84,47	0,960	0,40	1,79	
60	LwK 2.1	84,50	0,990	0,41	1,85	
61	LwK 2.9	89,00	5,490	2,26	10,26	(**)
62	LwK 2.1	82,20	-1,310	-0,54	-2,45	
63	LwK 2.5	83,63	0,120	0,05	0,22	
64	LwK 2.9	83,80	0,290	0,12	0,54	
66	LwK 2.1	83,30	-0,210	-0,09	-0,39	
68	LwK 2.9	84,31	0,800	0,33	1,50	
74	LwK 2.9	83,50	-0,010	-0,00	-0,02	
75	LwK 2.4	82,50	-1,007	-0,42	-1,88	
81	LwK 2.1	81,50	-2,010	-0,83	-3,76	
84	LwK 2.2	85,10	1,590	0,66	2,97	
86	LwK 2.5	84,39	0,880	0,36	1,64	
88	LwK 2.4	82,69	-0,820	-0,34	-1,53	
92	LwK 2.7	83,39	-0,120	-0,05	-0,22	
94	LwK 2.5	83,90	0,390	0,16	0,73	
96	LwK 2.9	84,31	0,800	0,33	1,50	
100	LwK 2.9	83,60	0,090	0,04	0,17	
102	LwK 2.4	82,96	-0,550	-0,23	-1,03	
106	LwK 2.4	84,31	0,800	0,33	1,50	
107	NMR	78,69	-4,815	-1,98	-9,00	(**)
108	NMR	79,43	-4,084	-1,68	-7,63	(**)
109	NMR	80,61	-2,897	-1,19	-5,41	(**)
110	NMR	81,82	-1,693	-0,70	-3,16	

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

## 4.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	84,43	0,920	0,38	1,04	
202	LwK 2.8	84,77	1,260	0,52	1,42	
203	LwK 2.8	85,22	1,710	0,70	1,93	
204	LwK 2.8	84,90	1,390	0,57	1,57	
206	LwK 2.8	84,73	1,220	0,50	1,38	
207	LwK 2.8	80,96	-2,550	-1,05	-2,88	
208	LwK 2.8	85,64	2,130	0,88	2,40	
209	LwK 2.8	81,30	-2,210	-0,91	-2,49	
210	LwK 2.8	83,83	0,320	0,13	0,36	
212	LwK 2.8	83,00	-0,510	-0,21	-0,58	
213	LwK 2.8	85,60	2,090	0,86	2,36	
214	LwK 2.8	85,79	2,280	0,94	2,57	
216	LwK 2.8	85,50	1,990	0,82	2,25	
217	LwK 2.8	85,40	1,890	0,78	2,13	
218	LwK 2.8	85,37	1,860	0,77	2,10	
219	LwK 2.8	88,50	4,990	2,06	5,63	(**)
220	LwK 2.8	85,90	2,390	0,98	2,70	
221	LwK 2.8	84,80	1,290	0,53	1,46	
222	LwK 2.8	84,80	1,290	0,53	1,46	
223	LwK 2.8	85,74	2,230	0,92	2,52	
224	LwK 2.8	84,06	0,550	0,23	0,62	
225	LwK 2.8	85,70	2,190	0,90	2,47	
226	LwK 2.8	84,33	0,820	0,34	0,93	
227	LwK 2.8	84,54	1,030	0,42	1,16	
228	LwK 2.8	84,90	1,390	0,57	1,57	
229	LwK 2.8	84,91	1,400	0,58	1,58	
230	LwK 2.8	84,10	0,590	0,24	0,67	
231	LwK 2.8	85,75	2,240	0,92	2,53	
233	LwK 2.8	85,70	2,190	0,90	2,47	
235	LwK 2.8	84,90	1,390	0,57	1,57	
236	LwK 2.8	84,40	0,890	0,37	1,00	
237	LwK 2.8	84,70	1,190	0,49	1,34	
238	LwK 2.8	84,26	0,750	0,31	0,85	
241	LwK 2.8	85,70	2,190	0,90	2,47	
242	LwK 2.8	82,70	-0,810	-0,33	-0,91	
243	LwK 2.8	84,20	0,690	0,28	0,78	
244	LwK 2.8	85,58	2,070	0,85	2,34	
245	LwK 2.8	85,65	2,140	0,88	2,42	
246	LwK 2.8	83,90	0,390	0,16	0,44	
247	LwK 2.8	84,20	0,690	0,28	0,78	
248	LwK 2.8	86,13	2,620	1,08	2,96	
249	LwK 2.8	84,80	1,290	0,53	1,46	
250	LwK 2.8	85,72	2,210	0,91	2,49	
251	LwK 2.8	84,10	0,590	0,24	0,67	
254	LwK 2.8	84,70	1,190	0,49	1,34	
255	LwK 2.8	83,60	0,090	0,04	0,10	
256	LwK 2.8	85,40	1,890	0,78	2,13	
257	LwK 2.8	85,00	1,490	0,61	1,68	
258	LwK 2.8	84,30	0,790	0,33	0,89	
259	LwK 2.8	84,47	0,960	0,40	1,08	
260	LwK 2.8	82,70	-0,810	-0,33	-0,91	
261	LwK 2.8	88,10	4,590	1,89	5,18	(**)
262	LwK 2.8	84,80	1,290	0,53	1,46	
263	LwK 2.8	84,80	1,290	0,53	1,46	
264	LwK 2.8	84,24	0,730	0,30	0,82	
265	LwK 2.8	83,40	-0,110	-0,05	-0,12	
266	LwK 2.8	83,90	0,390	0,16	0,44	
267	LwK 2.8	84,90	1,390	0,57	1,57	
268	LwK 2.8	84,30	0,790	0,33	0,89	
269	LwK 2.8	86,90	3,390	1,40	3,83	
270	LwK 2.8	82,20	-1,310	-0,54	-1,48	
271	LwK 2.8	83,77	0,260	0,11	0,29	
273	LwK 2.8	85,00	1,490	0,61	1,68	
274	LwK 2.8	85,60	2,090	0,86	2,36	
275	LwK 2.8	84,16	0,651	0,27	0,73	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 2.8	83,57	0,060	0,02	0,07	
277	LwK 2.8	83,05	-0,460	-0,19	-0,52	
278	LwK 2.8	84,20	0,690	0,28	0,78	
280	LwK 2.8	86,97	3,464	1,43	3,91	
281	LwK 2.8	84,00	0,490	0,20	0,55	
282	LwK 2.8	84,61	1,100	0,45	1,24	
283	LwK 2.8	83,34	-0,170	-0,07	-0,19	
284	LwK 2.8	84,42	0,910	0,37	1,03	
313	LwK 2.8	84,90	1,390	0,57	1,57	
322	LwK 2.8	86,70	3,190	1,31	3,60	
338	LwK 2.8	84,07	0,560	0,23	0,63	
349	LwK 2.8	87,60	4,090	1,69	4,62	
363	LwK 2.8	84,30	0,790	0,33	0,89	

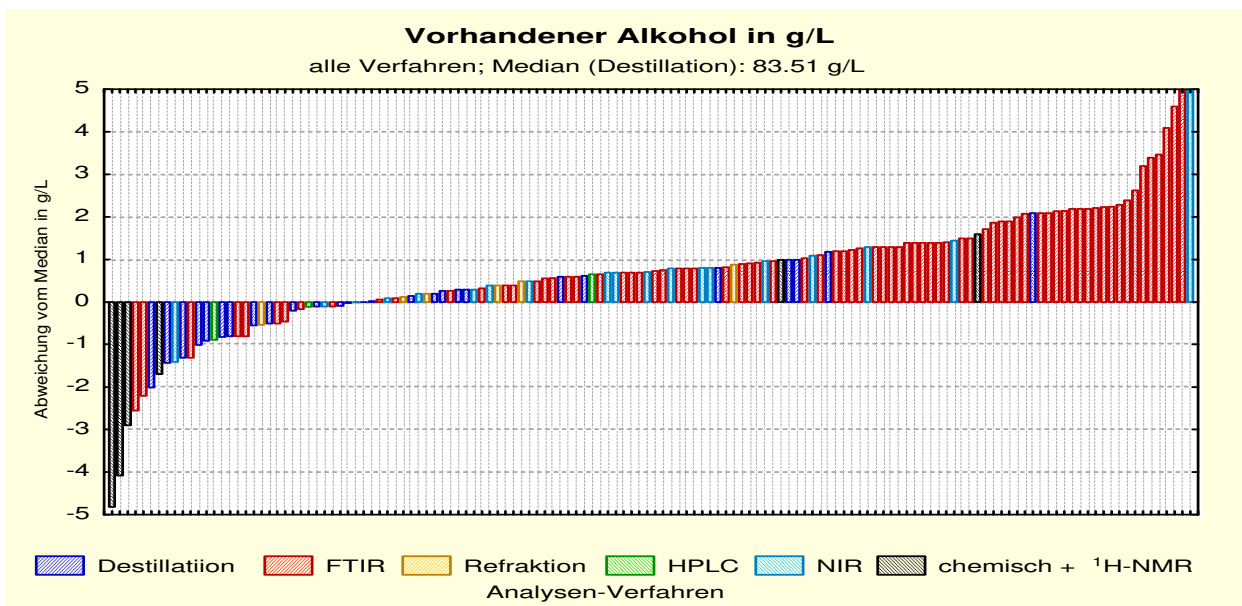
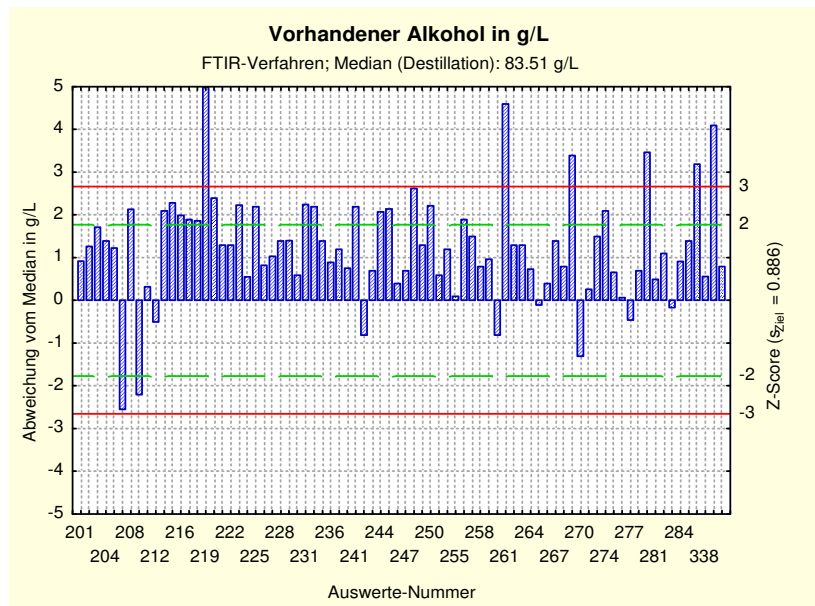
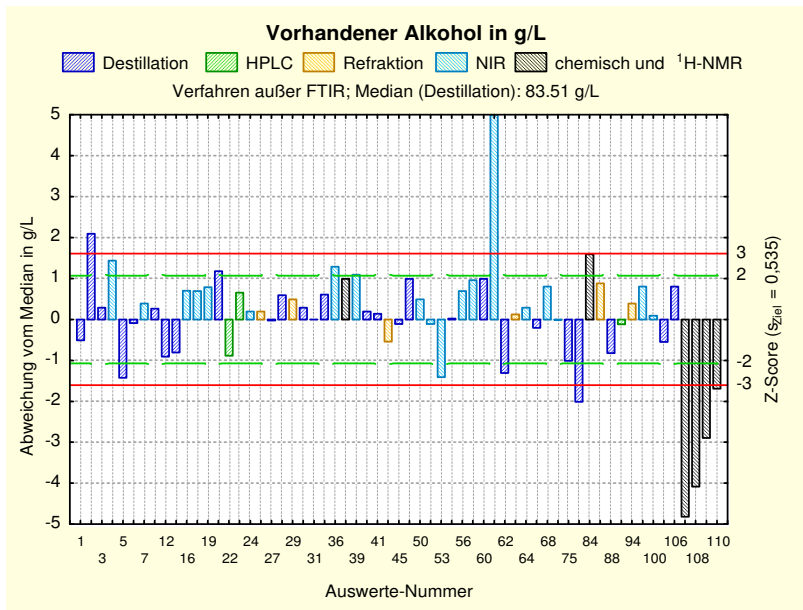
Rot markierte Werte wurden mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet

**4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	27
Minimalwert	81,50
Mittelwert	83,460
Median	83,510
Maximalwert	85,60
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,897
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,173
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,427
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,37
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,68
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	1,01
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,07
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,32
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,19

**4.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	17	83,397	1,054
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	10	83,558	0,673
	Destillationsverfahren	27	83,454	0,886
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	84,800	0,481
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	83,766	0,532
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	83,390	0,873
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	84,721	1,008
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	19	84,132	0,575
NMR	$^1H$ - Kernresonanzspektroskopie	4	80,138	1,554



### 4.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 4.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	54,2	-1,60	-0,93	-2,69	
03	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
04	LwK 3.3	56,5	0,70	0,41	1,18	
06	LwK 3.3	56,0	0,20	0,12	0,34	
07	LwK 3.3	55,9	0,10	0,06	0,17	
11	LwK 3.3	56,3	0,50	0,29	0,84	
12	LwK 3.3	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
14	LwK 3.3	55,4	-0,40	-0,23	-0,67	
16	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
17	LwK 3.3	56,0	0,20	0,12	0,34	
19	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 3.2	56,3	0,50	0,29	0,84	
22	LwK 3.3	55,5	-0,30	-0,17	-0,51	
23	LwK 3.3	55,9	0,10	0,06	0,17	
24	LwK 3.3	55,5	-0,30	-0,17	-0,51	
25	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 3.3	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
28	LwK 3.3	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
29	LwK 3.3	55,9	0,10	0,06	0,17	
30	LwK 3.1	55,1	-0,70	-0,41	-1,18	
31	LwK 3.2	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
33	LwK 3.3	55,9	0,10	0,06	0,17	
36	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
38	LwK 3.3	56,2	0,40	0,23	0,67	
39	LwK 3.3	56,2	0,40	0,23	0,67	
40	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
41	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
42	LwK 3.3	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
43	LwK 3.3	55,9	0,10	0,06	0,17	
45	LwK 3.3	55,8	0,00	0,00	0,00	
47	LwK 3.3	56,0	0,20	0,12	0,34	
50	LwK 3.3	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
51	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
53	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
55	LwK 3.2	55,8	0,00	0,00	0,00	
56	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
59	LwK 3.3	56,0	0,20	0,12	0,34	
60	LwK 3.2	54,6	-1,20	-0,70	-2,02	
62	LwK 3.2	55,1	-0,70	-0,41	-1,18	
63	FTIR	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
66	LwK 3.2	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
80	LwK 3.2	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
81	LwK 3.3	58,2	2,40	1,39	4,04	
84	LwK 3.3	52,0	-3,80	-2,21	-6,40	(**)
86	LwK 3.3	56,0	0,20	0,12	0,34	
92	LwK 3.3	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	

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

#### 4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	54,0	-1,75	-1,02	-2,95	
202	FTIR (gemessen)	55,4	-0,45	-0,26	-0,76	
203	FTIR (gemessen)	55,9	0,14	0,08	0,24	
204	FTIR (gemessen)	57,2	1,40	0,81	2,36	
206	FTIR (gemessen)	54,5	-1,29	-0,75	-2,17	
208	FTIR (gemessen)	55,4	-0,39	-0,23	-0,66	
210	FTIR (gemessen)	56,1	0,30	0,17	0,51	
212	FTIR (gemessen)	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
217	FTIR (gemessen)	55,3	-0,50	-0,29	-0,84	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR (gemessen)	55,0	-0,81	-0,47	-1,36	
219	FTIR (gemessen)	57,3	1,50	0,87	2,53	
220	FTIR (gemessen)	56,5	0,70	0,41	1,18	
221	FTIR (gemessen)	56,5	0,70	0,41	1,18	
222	FTIR (gemessen)	55,2	-0,60	-0,35	-1,01	
223	FTIR (gemessen)	55,3	-0,50	-0,29	-0,84	
224	FTIR-Basis	57,0	1,20	0,70	2,02	
225	FTIR (gemessen)	55,5	-0,30	-0,17	-0,51	
227	FTIR (gemessen)	55,8	0,04	0,02	0,07	
228	FTIR (gemessen)	56,7	0,90	0,52	1,52	
229	FTIR (gemessen)	56,4	0,57	0,33	0,96	
230	FTIR (gemessen)	57,1	1,30	0,75	2,19	
231	FTIR (gemessen)	55,9	0,14	0,08	0,24	
233	FTIR (gemessen)	55,5	-0,27	-0,16	-0,45	
237	FTIR (gemessen)	56,2	0,40	0,23	0,67	
238	FTIR (gemessen)	56,5	0,70	0,41	1,18	
241	FTIR (gemessen)	56,3	0,50	0,29	0,84	
247	FTIR (gemessen)	55,8	0,00	0,00	0,00	
249	FTIR (gemessen)	56,4	0,60	0,35	1,01	
251	FTIR (gemessen)	56,6	0,80	0,46	1,35	
254	FTIR (gemessen)	56,6	0,80	0,46	1,35	
255	FTIR-Basis	56,6	0,80	0,46	1,35	
258	LwK 3.3	54,6	-1,20	-0,70	-2,02	
259	FTIR-Basis	53,9	-1,90	-1,10	-3,20	
260	FTIR-Basis	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
261	FTIR (gemessen)	56,2	0,40	0,23	0,67	
262	FTIR (gemessen)	55,5	-0,30	-0,17	-0,51	
263	FTIR (gemessen)	55,7	-0,10	-0,06	-0,17	
265	FTIR (gemessen)	54,9	-0,90	-0,52	-1,52	
266	FTIR (gemessen)	55,0	-0,85	-0,49	-1,43	
267	FTIR (gemessen)	55,2	-0,60	-0,35	-1,01	
268	FTIR (gemessen)	55,7	-0,14	-0,08	-0,24	
269	FTIR (gemessen)	58,7	2,90	1,68	4,88	
270	FTIR (gemessen)	55,8	0,00	0,00	0,00	
271	FTIR (gemessen)	55,5	-0,27	-0,16	-0,45	
273	FTIR (gemessen)	55,9	0,10	0,06	0,17	
274	FTIR (gemessen)	63,4	7,60	4,41	12,79	(**)
276	FTIR (gemessen)	54,7	-1,11	-0,64	-1,87	
277	FTIR (gemessen)	54,9	-0,87	-0,50	-1,46	
278	FTIR (gemessen)	56,0	0,20	0,12	0,34	
281	FTIR (gemessen)	55,6	-0,20	-0,12	-0,34	
284	FTIR (gemessen)	56,5	0,70	0,41	1,18	
322	FTIR (gemessen)	56,3	0,50	0,29	0,84	
338	FTIR (gemessen)	56,9	1,05	0,61	1,77	

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

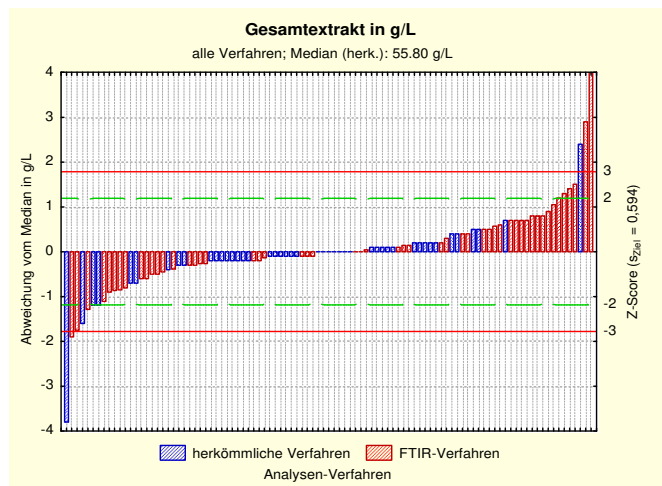
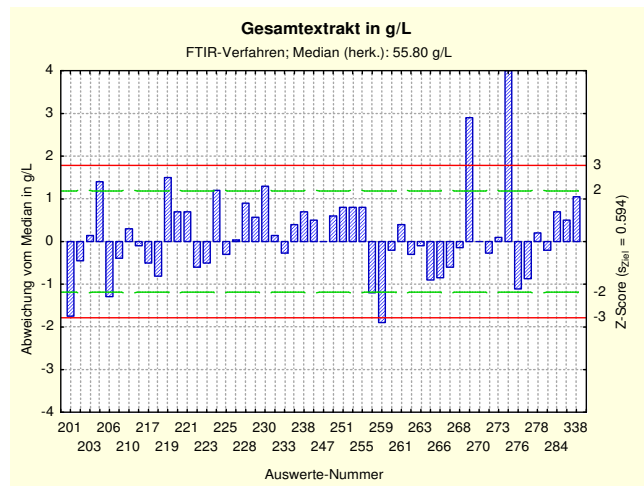
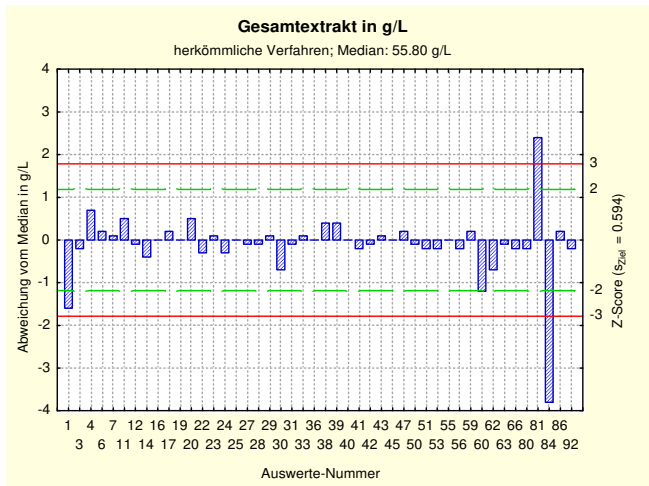
**4.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	45	44
Minimalwert	52,0	54,2
Mittelwert	55,69	55,78
Median	55,80	55,80
Maximalwert	58,2	58,2
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,783	0,550
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,117	0,083
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,723	1,723
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,565)	(0,565)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,45	0,32
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,32	0,93
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(1,39)	(0,97)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,07	0,05
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,20	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,21)	(0,15)

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

**4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	55,100	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	8	55,412	0,694
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	37	55,800	0,268
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	49	55,906	0,782
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	4	55,816	1,483





#### 4.4 Vergärbare Zucker [g/L]

##### 4.4.1 Herkömmliche Laboregebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 4.5	26,90	-0,290	-0,31	-0,37	
07	LwK 4.5	27,06	-0,130	-0,14	-0,17	
11	LwK 4.7	27,40	0,210	0,22	0,27	
12	LwK 4.1	27,64	0,450	0,48	0,58	
14	LwK 4.5	27,20	0,010	0,01	0,01	
16	LwK 4.5	26,90	-0,290	-0,31	-0,37	
17	LwK 4.5	27,30	0,110	0,12	0,14	
20	LwK 4.5	26,81	-0,380	-0,41	-0,49	
22	LwK 4.7	27,10	-0,090	-0,10	-0,12	
23	LwK 4.7	27,21	0,020	0,02	0,03	
24	NMR	25,50	-1,690	-1,81	-2,17	
25	LwK 4.4	30,00	2,810	3,00	3,62	
27	LwK 4.5	27,30	0,110	0,12	0,14	
28	LwK 4.7	28,20	1,010	1,08	1,30	
29	LwK 4.4	30,00	2,810	3,00	3,62	
30	LwK 4.4	28,60	1,410	1,51	1,81	
31	LwK 4.5	28,00	0,810	0,87	1,04	
33	LwK 4.4	27,80	0,610	0,65	0,79	
36	LwK 4.5	26,90	-0,290	-0,31	-0,37	
38	LwK 4.3	26,45	-0,740	-0,79	-0,95	
39	LwK 4.5	27,50	0,310	0,33	0,40	
40	LwK 4.7	27,00	-0,190	-0,20	-0,24	
41	LwK 4.5	27,50	0,310	0,33	0,40	
42	LwK 4.5	27,14	-0,050	-0,05	-0,06	
43	LwK 4.5	27,19	0,002	0,00	0,00	
45	LwK 4.5	26,84	-0,350	-0,37	-0,45	
47	LwK 4.5	27,18	-0,010	-0,01	-0,01	
50	LwK 4.5	27,10	-0,090	-0,10	-0,12	
51	LwK 4.4	28,30	1,110	1,19	1,43	
53	LwK 4.5	27,90	0,710	0,76	0,91	
55	LwK 4.5	27,50	0,310	0,33	0,40	
56	LwK 4.5	26,59	-0,600	-0,64	-0,77	
59	LwK 4.7	26,52	-0,670	-0,72	-0,86	
60	LwK 4.4	31,00	3,810	4,07	4,90	
61	LwK 4.5	27,70	0,510	0,55	0,66	
62	LwK 4.5	25,90	-1,290	-1,38	-1,66	
63	LwK 4.4	28,85	1,660	1,77	2,14	
66	LwK 4.4	29,30	2,110	2,26	2,72	
68	LwK 4.5	27,27	0,080	0,09	0,10	
74	LwK 4.5	27,50	0,310	0,33	0,40	
75	LwK 4.4	25,50	-1,690	-1,81	-2,17	
81	LwK 4.5	26,28	-0,910	-0,97	-1,17	
84	LwK 4.3	30,83	3,640	3,89	4,68	
92	LwK 4.7	27,19	0,000	0,00	0,00	
107	NMR	24,97	-2,216	-2,37	-2,85	
108	NMR	25,69	-1,503	-1,61	-1,93	
109	NMR	26,75	-0,442	-0,47	-0,57	
110	NMR	28,49	1,302	1,39	1,68	

##### 4.4.2 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	28,90	1,710	1,83	2,20	
203	LwK 4.8	27,59	0,400	0,43	0,51	
204	LwK 4.8	29,80	2,610	2,79	3,36	
206	LwK 4.8	27,62	0,430	0,46	0,55	
207	LwK 4.8	27,03	-0,160	-0,17	-0,21	
209	LwK 4.8	29,00	1,810	1,93	2,33	
210	LwK 4.8	29,20	2,010	2,15	2,59	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	LwK 4.8	28,34	1,150	1,23	1,48	
213	LwK 4.8	29,38	2,190	2,34	2,82	
214	LwK 4.8	30,61	3,420	3,66	4,40	
216	LwK 4.8	29,00	1,810	1,93	2,33	
217	LwK 4.8	25,80	-1,390	-1,49	-1,79	
218	LwK 4.8	26,32	-0,870	-0,93	-1,12	
219	LwK 4.8	30,08	2,890	3,09	3,72	
220	LwK 4.8	29,60	2,410	2,58	3,10	
221	LwK 4.8	30,20	3,010	3,22	3,87	
222	LwK 4.8	30,16	2,970	3,17	3,82	
224	LwK 4.8	26,91	-0,280	-0,30	-0,36	
225	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
226	LwK 4.8	28,52	1,330	1,42	1,71	
227	LwK 4.8	29,91	2,720	2,91	3,50	
228	LwK 4.8	27,60	0,410	0,44	0,53	
229	LwK 4.8	30,32	3,130	3,35	4,03	
230	LwK 4.8	29,44	2,250	2,40	2,90	
231	LwK 4.8	28,66	1,470	1,57	1,89	
233	LwK 4.8	28,69	1,500	1,60	1,93	
235	LwK 4.8	30,55	3,360	3,59	4,32	
236	LwK 4.8	24,70	-2,490	-2,66	-3,20	
237	LwK 4.8	29,20	2,010	2,15	2,59	
238	LwK 4.8	30,53	3,340	3,57	4,30	
241	LwK 4.8	30,45	3,260	3,48	4,20	
242	LwK 4.8	29,20	2,010	2,15	2,59	
243	LwK 4.8	29,14	1,950	2,08	2,51	
244	LwK 4.8	31,50	4,310	4,61	5,55	(**)
245	LwK 4.8	29,05	1,860	1,99	2,39	
246	LwK 4.8	29,36	2,170	2,32	2,79	
247	LwK 4.8	28,26	1,070	1,14	1,38	
248	LwK 4.8	30,21	3,020	3,23	3,89	
249	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
250	LwK 4.8	29,45	2,260	2,42	2,91	
251	LwK 4.8	26,54	-0,650	-0,69	-0,84	
254	LwK 4.8	30,80	3,610	3,86	4,65	
255	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
256	LwK 4.8	27,50	0,310	0,33	0,40	
257	LwK 4.8	29,15	1,960	2,09	2,52	
258	LwK 4.8	28,30	1,110	1,19	1,43	
259	LwK 4.8	30,21	3,020	3,23	3,89	
260	LwK 4.8	29,20	2,010	2,15	2,59	
261	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
262	LwK 4.8	27,00	-0,190	-0,20	-0,24	
263	LwK 4.8	29,60	2,410	2,58	3,10	
264	LwK 4.8	29,25	2,060	2,20	2,65	
265	LwK 4.8	27,82	0,630	0,67	0,81	
266	LwK 4.8	28,89	1,700	1,82	2,19	
267	LwK 4.8	29,02	1,830	1,96	2,36	
268	LwK 4.8	31,40	4,210	4,50	5,42	(**)
269	LwK 4.8	30,70	3,510	3,75	4,52	
270	LwK 4.8	30,09	2,900	3,10	3,73	
271	LwK 4.8	29,41	2,220	2,37	2,86	
273	LwK 4.8	28,52	1,330	1,42	1,71	
274	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
275	LwK 4.8	29,41	2,220	2,37	2,86	
276	LwK 4.8	28,61	1,420	1,52	1,83	
277	LwK 4.8	28,56	1,370	1,46	1,76	
278	LwK 4.8	27,80	0,610	0,65	0,79	
281	LwK 4.8	30,97	3,780	4,04	4,86	
282	LwK 4.8	27,13	-0,060	-0,06	-0,08	
284	LwK 4.8	31,40	4,210	4,50	5,42	(**)
322	LwK 4.8	30,16	2,970	3,17	3,82	
338	LwK 4.8	30,67	3,480	3,72	4,48	
349	LwK 4.8	27,70	0,510	0,55	0,66	
363	LwK 4.8	30,50	3,310	3,54	4,26	

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

**4.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
12	LwK 4.1	27,64	-1,085	-1,11	-1,33	
25	LwK 4.4	30,00	1,275	1,30	1,56	
29	LwK 4.4	30,00	1,275	1,30	1,56	
30	LwK 4.4	28,60	-0,125	-0,13	-0,15	
33	LwK 4.4	27,80	-0,925	-0,94	-1,13	
38	LwK 4.3	26,45	-2,275	-2,32	-2,78	
51	LwK 4.4	28,30	-0,425	-0,43	-0,52	
60	LwK 4.4	31,00	2,275	2,32	2,78	
63	LwK 4.4	28,85	0,125	0,13	0,15	
66	LwK 4.4	29,30	0,575	0,59	0,70	
75	LwK 4.4	25,50	-3,225	-3,29	-3,94	
84	LwK 4.3	30,83	2,105	2,15	2,57	

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

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	28,90	0,175	0,18	0,21	
203	LwK 4.8	27,59	-1,135	-1,16	-1,39	
204	LwK 4.8	29,80	1,075	1,10	1,31	
206	LwK 4.8	27,62	-1,105	-1,13	-1,35	
207	LwK 4.8	27,03	-1,695	-1,73	-2,07	
209	LwK 4.8	29,00	0,275	0,28	0,34	
210	LwK 4.8	29,20	0,475	0,48	0,58	
212	LwK 4.8	28,34	-0,385	-0,39	-0,47	
213	LwK 4.8	29,38	0,655	0,67	0,80	
214	LwK 4.8	30,61	1,885	1,92	2,30	
216	LwK 4.8	29,00	0,275	0,28	0,34	
217	LwK 4.8	25,80	-2,925	-2,98	-3,57	
218	LwK 4.8	26,32	-2,405	-2,45	-2,94	
219	LwK 4.8	30,08	1,355	1,38	1,66	
220	LwK 4.8	29,60	0,875	0,89	1,07	
221	LwK 4.8	30,20	1,475	1,50	1,80	
222	LwK 4.8	30,16	1,435	1,46	1,75	
224	LwK 4.8	26,91	-1,815	-1,85	-2,22	
225	LwK 4.8	29,40	0,675	0,69	0,82	
226	LwK 4.8	28,52	-0,205	-0,21	-0,25	
227	LwK 4.8	29,91	1,185	1,21	1,45	
228	LwK 4.8	27,60	-1,125	-1,15	-1,37	
229	LwK 4.8	30,32	1,595	1,63	1,95	
230	LwK 4.8	29,44	0,715	0,73	0,87	
231	LwK 4.8	28,66	-0,065	-0,07	-0,08	
233	LwK 4.8	28,69	-0,035	-0,04	-0,04	
235	LwK 4.8	30,55	1,825	1,86	2,23	
236	LwK 4.8	24,70	-4,025	-4,11	-4,92	
237	LwK 4.8	29,20	0,475	0,48	0,58	
238	LwK 4.8	30,53	1,805	1,84	2,21	
241	LwK 4.8	30,45	1,725	1,76	2,11	
242	LwK 4.8	29,20	0,475	0,48	0,58	
243	LwK 4.8	29,14	0,415	0,42	0,51	
244	LwK 4.8	31,50	2,775	2,83	3,39	
245	LwK 4.8	29,05	0,325	0,33	0,40	
246	LwK 4.8	29,36	0,635	0,65	0,78	
247	LwK 4.8	28,26	-0,465	-0,47	-0,57	
248	LwK 4.8	30,21	1,485	1,51	1,81	
249	LwK 4.8	29,40	0,675	0,69	0,82	
250	LwK 4.8	29,45	0,725	0,74	0,89	
251	LwK 4.8	26,54	-2,185	-2,23	-2,67	
254	LwK 4.8	30,80	2,075	2,12	2,54	
255	LwK 4.8	29,40	0,675	0,69	0,82	
256	LwK 4.8	27,50	-1,225	-1,25	-1,50	
257	LwK 4.8	29,15	0,425	0,43	0,52	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
258	LwK 4.8	28,30	-0,425	-0,43	-0,52	
259	LwK 4.8	30,21	1,485	1,51	1,81	
260	LwK 4.8	29,20	0,475	0,48	0,58	
261	LwK 4.8	29,40	0,675	0,69	0,82	
262	LwK 4.8	27,00	-1,725	-1,76	-2,11	
263	LwK 4.8	29,60	0,875	0,89	1,07	
264	LwK 4.8	29,25	0,525	0,54	0,64	
265	LwK 4.8	27,82	-0,905	-0,92	-1,11	
266	LwK 4.8	28,89	0,165	0,17	0,20	
267	LwK 4.8	29,02	0,295	0,30	0,36	
268	LwK 4.8	31,40	2,675	2,73	3,27	
269	LwK 4.8	30,70	1,975	2,01	2,41	
270	LwK 4.8	30,09	1,365	1,39	1,67	
271	LwK 4.8	29,41	0,685	0,70	0,84	
273	LwK 4.8	28,52	-0,205	-0,21	-0,25	
274	LwK 4.8	29,40	0,675	0,69	0,82	
275	LwK 4.8	29,41	0,685	0,70	0,84	
276	LwK 4.8	28,61	-0,115	-0,12	-0,14	
277	LwK 4.8	28,56	-0,165	-0,17	-0,20	
278	LwK 4.8	27,80	-0,925	-0,94	-1,13	
281	LwK 4.8	30,97	2,245	2,29	2,74	
282	LwK 4.8	27,13	-1,595	-1,63	-1,95	
284	LwK 4.8	31,40	2,675	2,73	3,27	
322	LwK 4.8	30,16	1,435	1,46	1,75	
338	LwK 4.8	30,67	1,945	1,98	2,38	
349	LwK 4.8	27,70	-1,025	-1,05	-1,25	
363	LwK 4.8	30,50	1,775	1,81	2,17	

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

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	29,29	2,100	2,24	2,70	
202	LwK 4.8	28,90	1,710	1,83	2,20	
203	LwK 4.8	27,59	0,400	0,43	0,51	
204	LwK 4.8	29,92	2,730	2,92	3,51	
206	LwK 4.8	27,62	0,430	0,46	0,55	
207	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
208	LwK 4.8	26,74	-0,450	-0,48	-0,58	
209	LwK 4.8	28,90	1,710	1,83	2,20	
210	LwK 4.8	29,22	2,030	2,17	2,61	
212	LwK 4.8	25,89	-1,300	-1,39	-1,67	
213	LwK 4.8	29,05	1,860	1,99	2,39	
214	LwK 4.8	29,24	2,050	2,19	2,64	
216	LwK 4.8	28,00	0,810	0,87	1,04	
217	LwK 4.8	27,30	0,110	0,12	0,14	
218	LwK 4.8	26,74	-0,450	-0,48	-0,58	
219	LwK 4.8	26,89	-0,300	-0,32	-0,39	
220	LwK 4.8	27,84	0,650	0,69	0,84	
221	LwK 4.8	30,20	3,010	3,22	3,87	
222	LwK 4.8	28,36	1,170	1,25	1,51	
223	LwK 4.8	30,23	3,040	3,25	3,91	
224	LwK 4.8	27,48	0,290	0,31	0,37	
225	LwK 4.8	29,50	2,310	2,47	2,97	
226	LwK 4.8	27,79	0,600	0,64	0,77	
227	LwK 4.8	29,04	1,850	1,98	2,38	
228	LwK 4.8	28,40	1,210	1,29	1,56	
229	LwK 4.8	28,34	1,150	1,23	1,48	
230	LwK 4.8	26,67	-0,520	-0,56	-0,67	
231	LwK 4.8	28,73	1,540	1,65	1,98	
233	LwK 4.8	28,69	1,500	1,60	1,93	
235	LwK 4.8	27,87	0,680	0,73	0,88	
236	LwK 4.8	24,70	-2,490	-2,66	-3,20	
237	LwK 4.8	27,90	0,710	0,76	0,91	
238	LwK 4.8	28,58	1,390	1,49	1,79	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
241	LwK 4.8	28,38	1,190	1,27	1,53	
242	LwK 4.8	26,10	-1,090	-1,17	-1,40	
243	LwK 4.8	26,90	-0,290	-0,31	-0,37	
244	LwK 4.8	28,52	1,330	1,42	1,71	
245	LwK 4.8	27,76	0,570	0,61	0,73	
246	LwK 4.8	25,44	-1,750	-1,87	-2,25	
247	LwK 4.8	28,93	1,740	1,86	2,24	
248	LwK 4.8	29,71	2,520	2,69	3,24	
249	LwK 4.8	29,40	2,210	2,36	2,84	
250	LwK 4.8	29,21	2,020	2,16	2,60	
251	LwK 4.8	26,54	-0,650	-0,69	-0,84	
254	LwK 4.8	28,60	1,410	1,51	1,81	
256	LwK 4.8	27,00	-0,190	-0,20	-0,24	
257	LwK 4.8	28,18	0,990	1,06	1,27	
258	LwK 4.8	28,10	0,910	0,97	1,17	
259	LwK 4.8	29,86	2,670	2,85	3,44	
260	LwK 4.8	28,50	1,310	1,40	1,69	
261	LwK 4.8	27,80	0,610	0,65	0,79	
262	LwK 4.8	27,00	-0,190	-0,20	-0,24	
263	LwK 4.8	29,10	1,910	2,04	2,46	
264	LwK 4.8	29,25	2,060	2,20	2,65	
265	LwK 4.8	26,17	-1,020	-1,09	-1,31	
266	LwK 4.8	28,49	1,300	1,39	1,67	
267	LwK 4.8	28,42	1,230	1,31	1,58	
269	LwK 4.8	28,30	1,110	1,19	1,43	
270	LwK 4.8	27,52	0,330	0,35	0,42	
271	LwK 4.8	30,06	2,870	3,07	3,69	
273	LwK 4.8	28,55	1,360	1,45	1,75	
274	LwK 4.8	28,10	0,910	0,97	1,17	
275	LwK 4.8	29,42	2,230	2,38	2,87	
276	LwK 4.8	30,40	3,210	3,43	4,13	
277	LwK 4.8	31,25	4,060	4,34	5,23	(**)
278	LwK 4.8	26,40	-0,790	-0,84	-1,02	
280	LwK 4.8	26,89	-0,300	-0,32	-0,39	
281	LwK 4.8	29,30	2,110	2,26	2,72	
282	LwK 4.8	27,72	0,530	0,57	0,68	
283	LwK 4.8	27,40	0,210	0,22	0,27	
313	LwK 4.8	27,36	0,170	0,18	0,22	
322	LwK 4.8	28,50	1,310	1,40	1,69	
338	LwK 4.8	28,71	1,520	1,62	1,96	
349	LwK 4.8	29,30	2,110	2,26	2,72	
363	LwK 4.8	29,30	2,110	2,26	2,72	

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

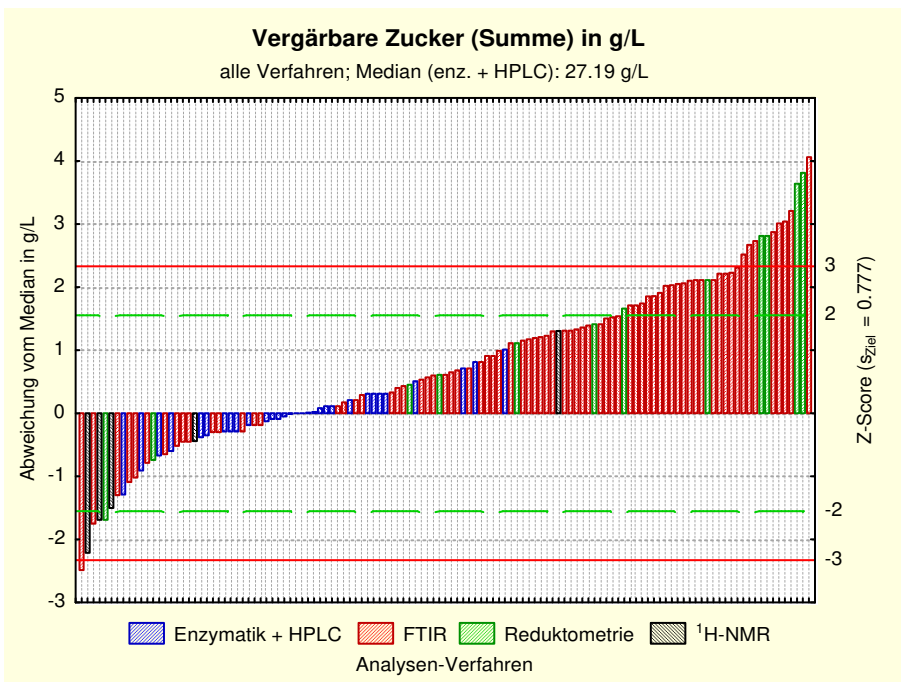
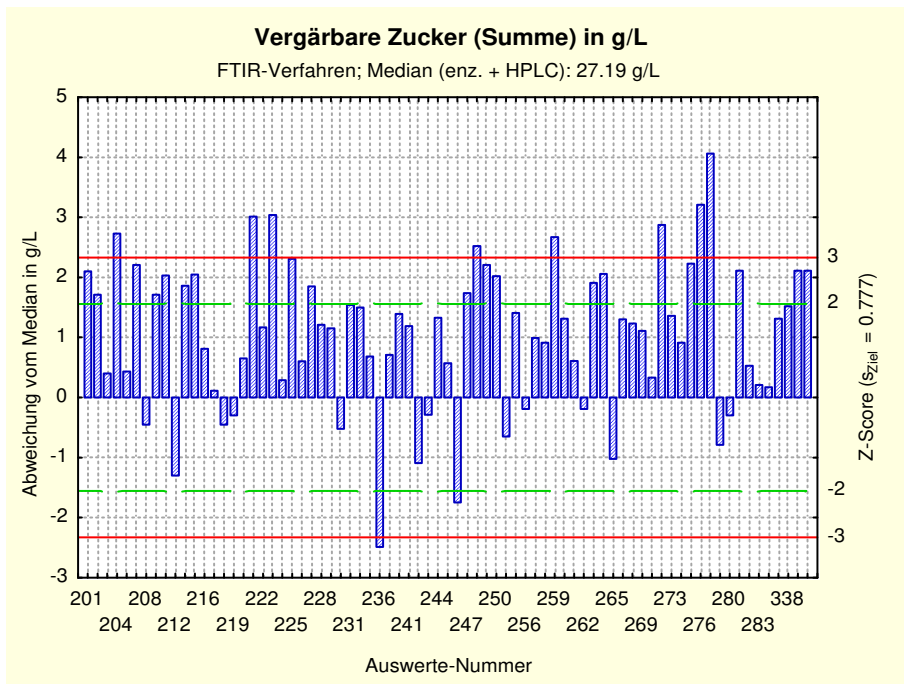
**4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

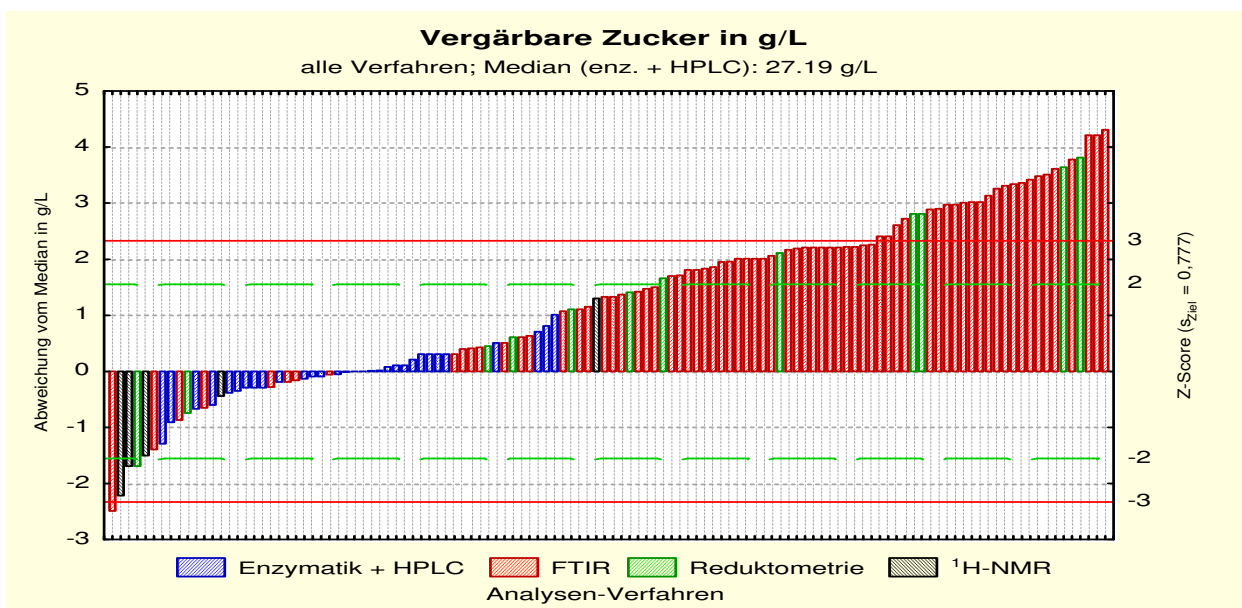
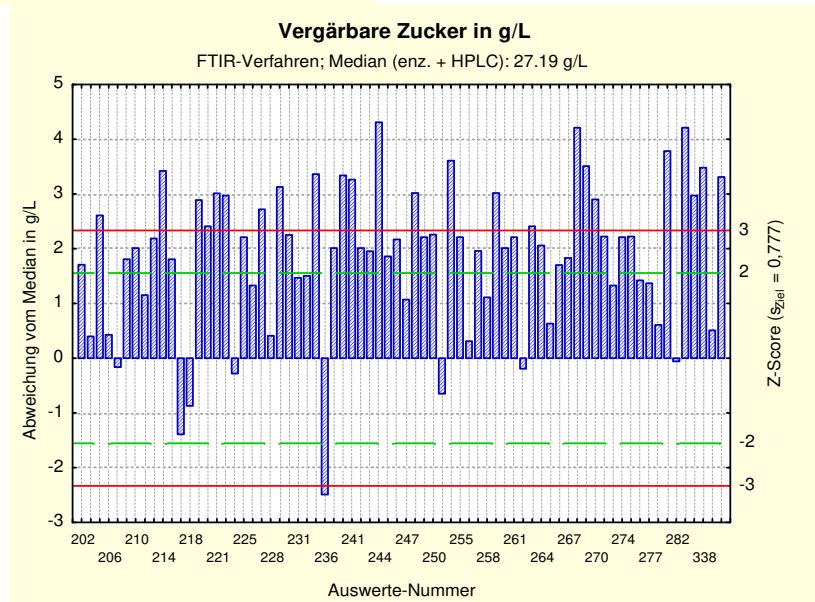
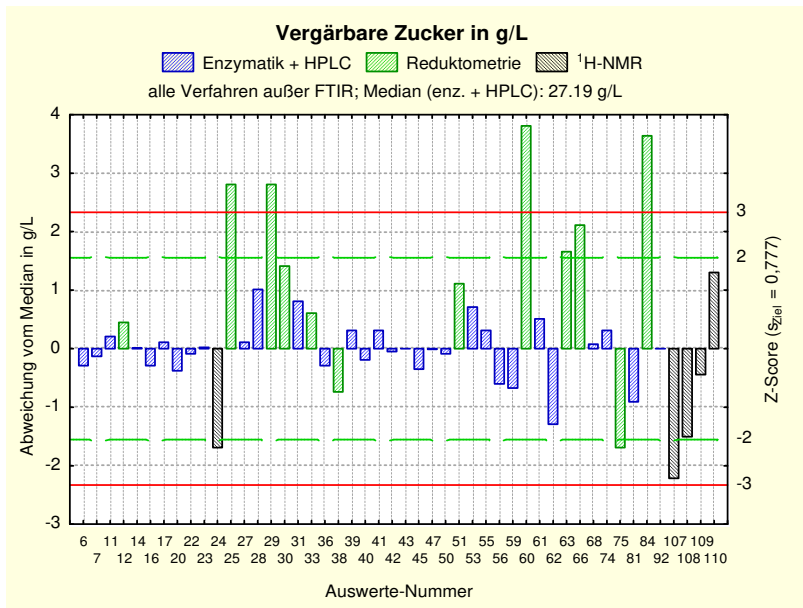
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch	reduktometrisch
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	31	12
Minimalwert	25,90	25,50
Mittelwert	27,164	28,689
Median	27,190	28,725
Maximalwert	28,20	31,00
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,475	1,679
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,085	0,485
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,936	0,980
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,777	0,818
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	(0,584)	(0,584)
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,51	1,71
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,61	2,05
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(0,81)	(2,88)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,09	0,49
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,11	0,59
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(0,15)	(0,83)

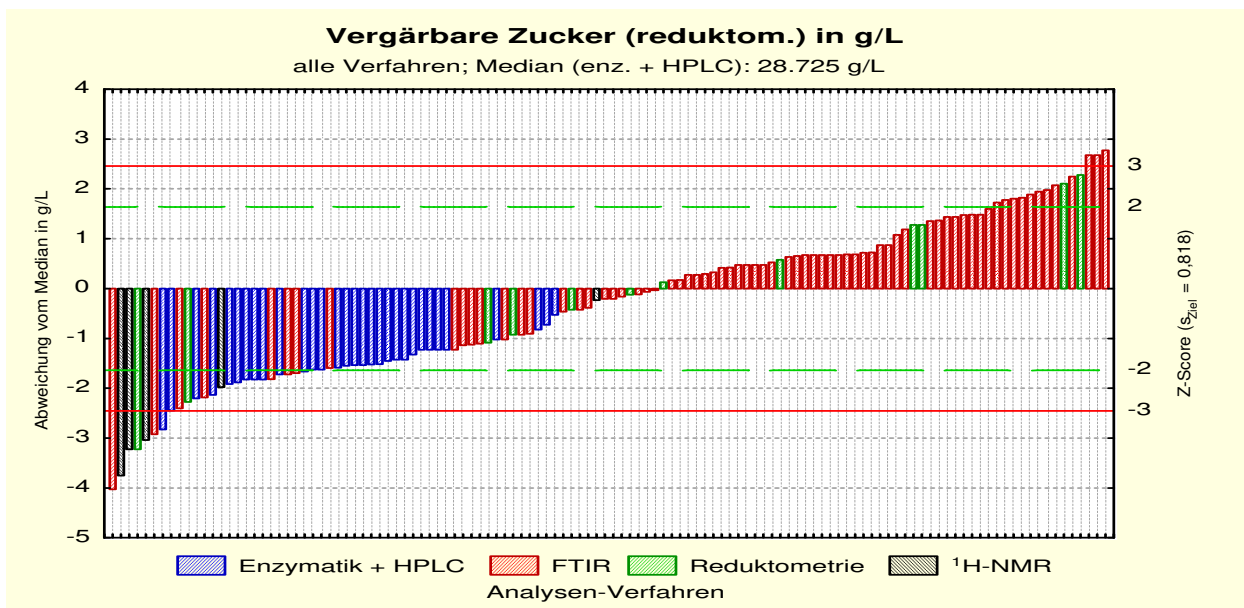
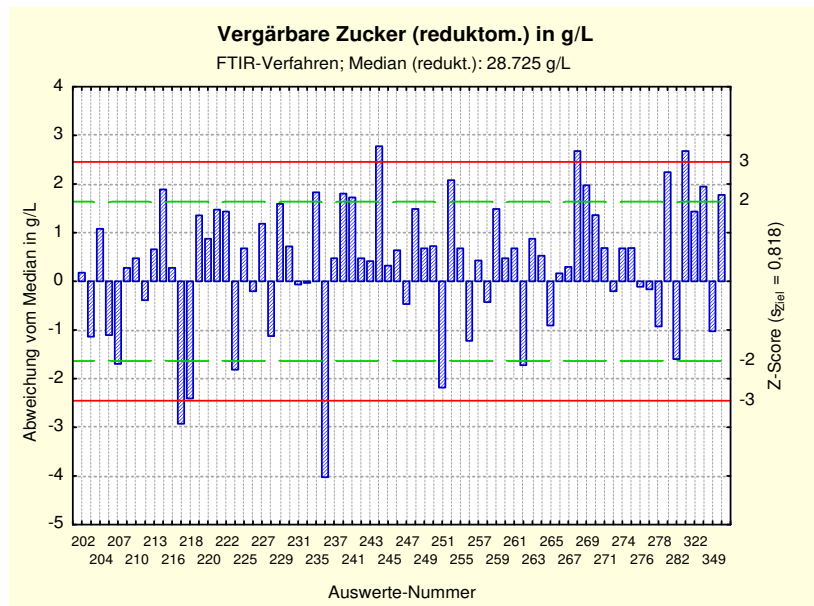
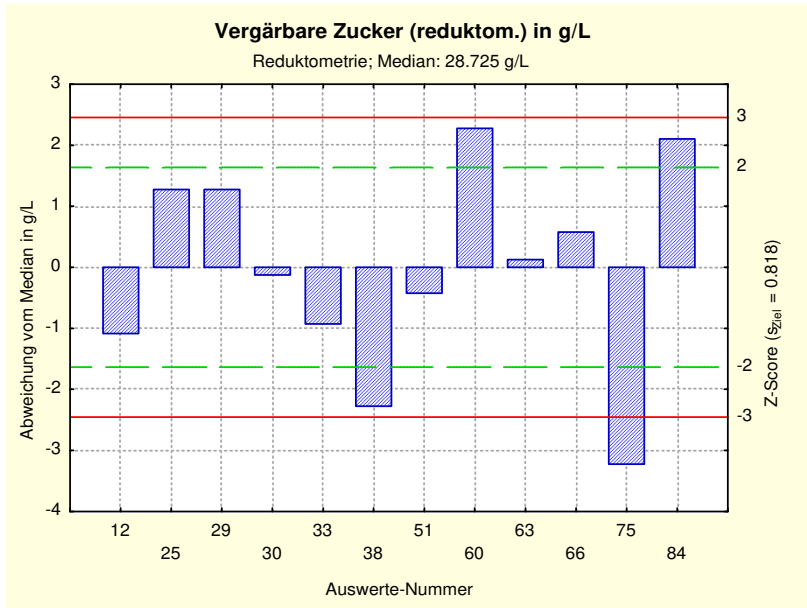
<sup>\*)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s<sub>exp herk.</sub> bewertet.

4.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	27,640	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	28,640	3,512
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	9	28,959	1,452
	reduktometrische Verfahren	12	28,733	1,806
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	24	27,169	0,421
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	7	27,187	0,469
	enzymatische und HPLC-Verfahren	31	27,171	0,412
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	72	29,151	1,290
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	75	28,283	1,233
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	26,258	1,531









## 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	14,28	0,715	1,38	1,75	
05	enzymat., autom.	14,52	0,955	1,84	2,33	
06	enzymat., autom.	13,57	0,005	0,01	0,01	
07	enzymat. Hand	13,86	0,295	0,57	0,72	
11	HPLC	14,10	0,535	1,03	1,31	
12	enzymat., autom.	13,75	0,185	0,36	0,45	
14	enzymat., autom.	13,66	0,095	0,18	0,23	
16	enzymat., autom.	13,52	-0,045	-0,09	-0,11	
17	enzymat., autom.	13,60	0,035	0,07	0,09	
20	enzymat., autom.	13,56	-0,005	-0,01	-0,01	
22	HPLC	13,38	-0,185	-0,36	-0,45	
23	HPLC	13,56	-0,005	-0,01	-0,01	
24	NMR	13,04	-0,525	-1,01	-1,28	
27	enzymat., autom.	13,99	0,425	0,82	1,04	
28	HPLC	13,81	0,245	0,47	0,60	
31	enzymat., autom.	13,54	-0,025	-0,05	-0,06	
36	enzymat., autom.	13,20	-0,365	-0,70	-0,89	
39	enzymat., autom.	13,63	0,065	0,13	0,16	
40	HPLC	13,30	-0,265	-0,51	-0,65	
41	enzymat., autom.	13,75	0,181	0,35	0,44	
42	enzymat., autom.	13,50	-0,065	-0,13	-0,16	
43	enzymat., autom.	13,54	-0,024	-0,05	-0,06	
45	enzymat., autom.	13,46	-0,105	-0,20	-0,26	
47	enzymat., autom.	13,63	0,065	0,13	0,16	
50	enzymat., autom.	13,70	0,135	0,26	0,33	
53	enzymat., autom.	13,40	-0,165	-0,32	-0,40	
56	enzymat., autom.	13,39	-0,175	-0,34	-0,43	
59	HPLC	13,17	-0,395	-0,76	-0,97	
62	enzymat., autom.	13,30	-0,265	-0,51	-0,65	
68	enzymat., autom.	13,68	0,115	0,22	0,28	
81	enzymat. Hand	13,23	-0,340	-0,66	-0,83	
85	HPLC	14,06	0,495	0,96	1,21	
92	HPLC	13,48	-0,085	-0,16	-0,21	
107	NMR	12,42	-1,141	-2,20	-2,79	
108	NMR	12,85	-0,710	-1,37	-1,74	
109	NMR	13,37	-0,194	-0,37	-0,47	
110	NMR	14,13	0,564	1,09	1,38	

### 4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	15,13	1,565	3,02	3,82	
202	FTIR	14,60	1,035	2,00	2,53	
203	FTIR	14,19	0,625	1,21	1,53	
204	FTIR	15,24	1,675	3,23	4,09	
206	FTIR	13,49	-0,075	-0,14	-0,18	
207	FTIR	14,20	0,635	1,23	1,55	
208	FTIR	13,00	-0,565	-1,09	-1,38	
209	FTIR	14,50	0,935	1,80	2,29	
210	FTIR	13,62	0,055	0,11	0,13	
212	FTIR	12,88	-0,685	-1,32	-1,67	
213	FTIR	14,43	0,865	1,67	2,11	
214	FTIR	14,87	1,305	2,52	3,19	
216	FTIR	15,10	1,535	2,96	3,75	
217	FTIR	14,40	0,835	1,61	2,04	
218	FTIR	13,76	0,195	0,38	0,48	
219	FTIR	14,18	0,615	1,19	1,50	
220	FTIR	14,18	0,615	1,19	1,50	
221	FTIR	16,30	2,735	5,28	6,68	(**)

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	FTIR	14,69	1,125	2,17	2,75	
223	FTIR	14,58	1,015	1,96	2,48	
224	FTIR	13,83	0,265	0,51	0,65	
225	FTIR	15,00	1,435	2,77	3,51	
226	FTIR	13,99	0,425	0,82	1,04	
227	FTIR	15,18	1,615	3,12	3,95	
228	FTIR	14,60	1,035	2,00	2,53	
229	FTIR	15,15	1,585	3,06	3,87	
230	FTIR	13,73	0,165	0,32	0,40	
231	FTIR	14,49	0,925	1,78	2,26	
233	FTIR	14,92	1,355	2,61	3,31	
235	FTIR	14,50	0,935	1,80	2,29	
236	FTIR	14,00	0,435	0,84	1,06	
237	FTIR	14,80	1,235	2,38	3,02	
238	FTIR	15,97	2,405	4,64	5,88	(**)
241	FTIR	14,87	1,305	2,52	3,19	
242	FTIR	12,60	-0,965	-1,86	-2,36	
243	FTIR	13,00	-0,565	-1,09	-1,38	
244	FTIR	15,06	1,495	2,88	3,65	
245	FTIR	14,10	0,535	1,03	1,31	
246	FTIR	12,26	-1,305	-2,52	-3,19	
247	FTIR	14,98	1,415	2,73	3,46	
248	FTIR	15,25	1,685	3,25	4,12	
249	FTIR	14,80	1,235	2,38	3,02	
250	FTIR	14,71	1,145	2,21	2,80	
251	FTIR	12,66	-0,905	-1,75	-2,21	
254	FTIR	15,30	1,735	3,35	4,24	
256	FTIR	12,60	-0,965	-1,86	-2,36	
257	FTIR	14,69	1,125	2,17	2,75	
258	FTIR	14,50	0,935	1,80	2,29	
259	FTIR	14,99	1,425	2,75	3,48	
260	FTIR	15,20	1,635	3,15	4,00	
261	FTIR	13,50	-0,065	-0,13	-0,16	
262	FTIR	13,50	-0,065	-0,13	-0,16	
263	FTIR	14,50	0,935	1,80	2,29	
264	FTIR	15,15	1,585	3,06	3,87	
265	FTIR	13,17	-0,395	-0,76	-0,97	
266	FTIR	14,07	0,505	0,97	1,23	
267	FTIR	14,52	0,955	1,84	2,33	
269	FTIR	15,60	2,035	3,93	4,97	
270	FTIR	13,56	-0,005	-0,01	-0,01	
271	FTIR	15,07	1,505	2,90	3,68	
273	FTIR	13,96	0,395	0,76	0,97	
274	FTIR	14,70	1,135	2,19	2,77	
275	FTIR	14,62	1,055	2,04	2,58	
276	FTIR	16,19	2,625	5,07	6,42	(**)
277	FTIR	16,23	2,665	5,14	6,51	(**)
278	FTIR	12,30	-1,265	-2,44	-3,09	
280	FTIR	14,37	0,805	1,55	1,97	
281	FTIR	16,05	2,485	4,79	6,07	(**)
282	FTIR	14,12	0,555	1,07	1,36	
283	FTIR	13,99	0,425	0,82	1,04	
313	FTIR	14,06	0,495	0,96	1,21	
322	FTIR	13,30	-0,265	-0,51	-0,65	
338	FTIR	13,95	0,385	0,74	0,94	
349	FTIR	14,70	1,135	2,19	2,77	
363	FTIR	14,20	0,635	1,23	1,55	

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

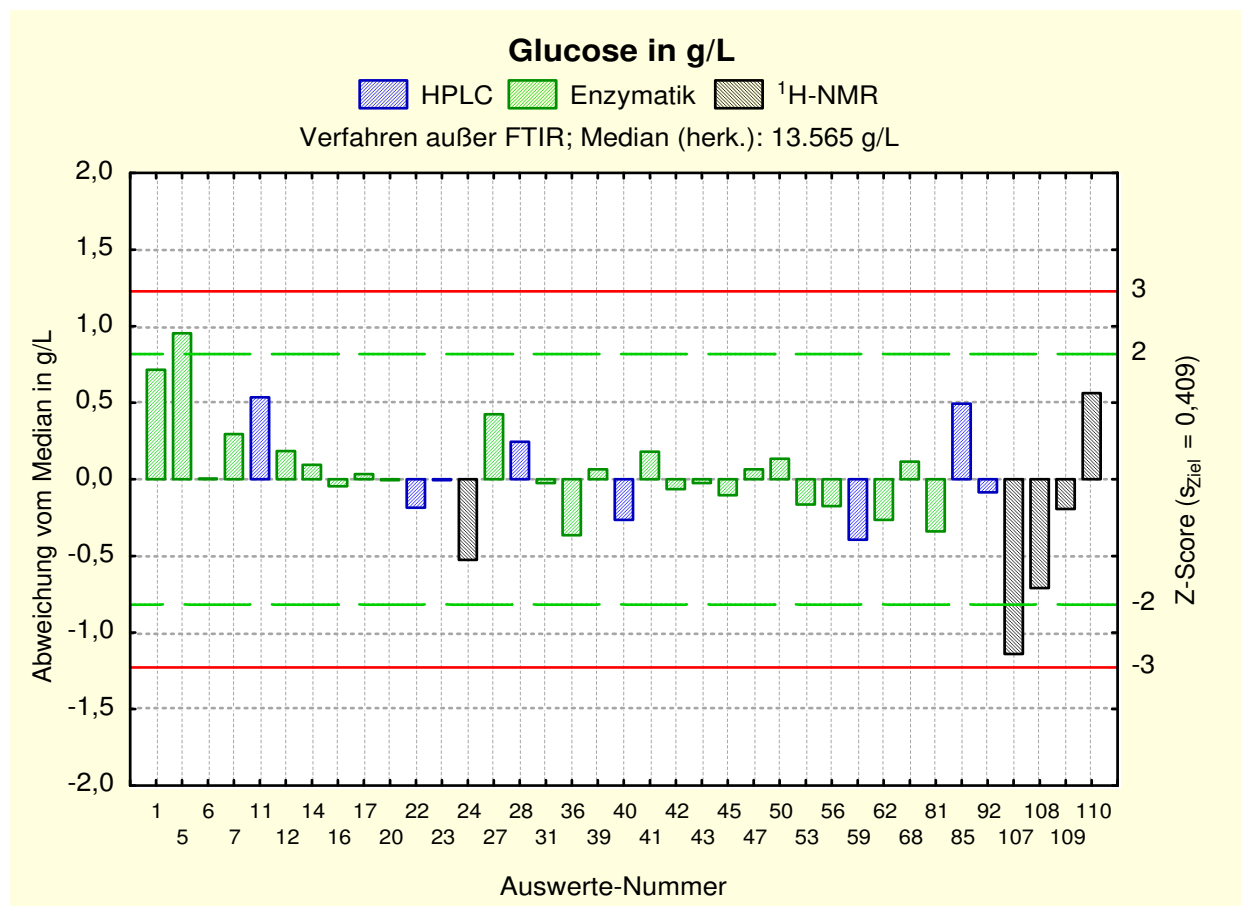
### 4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

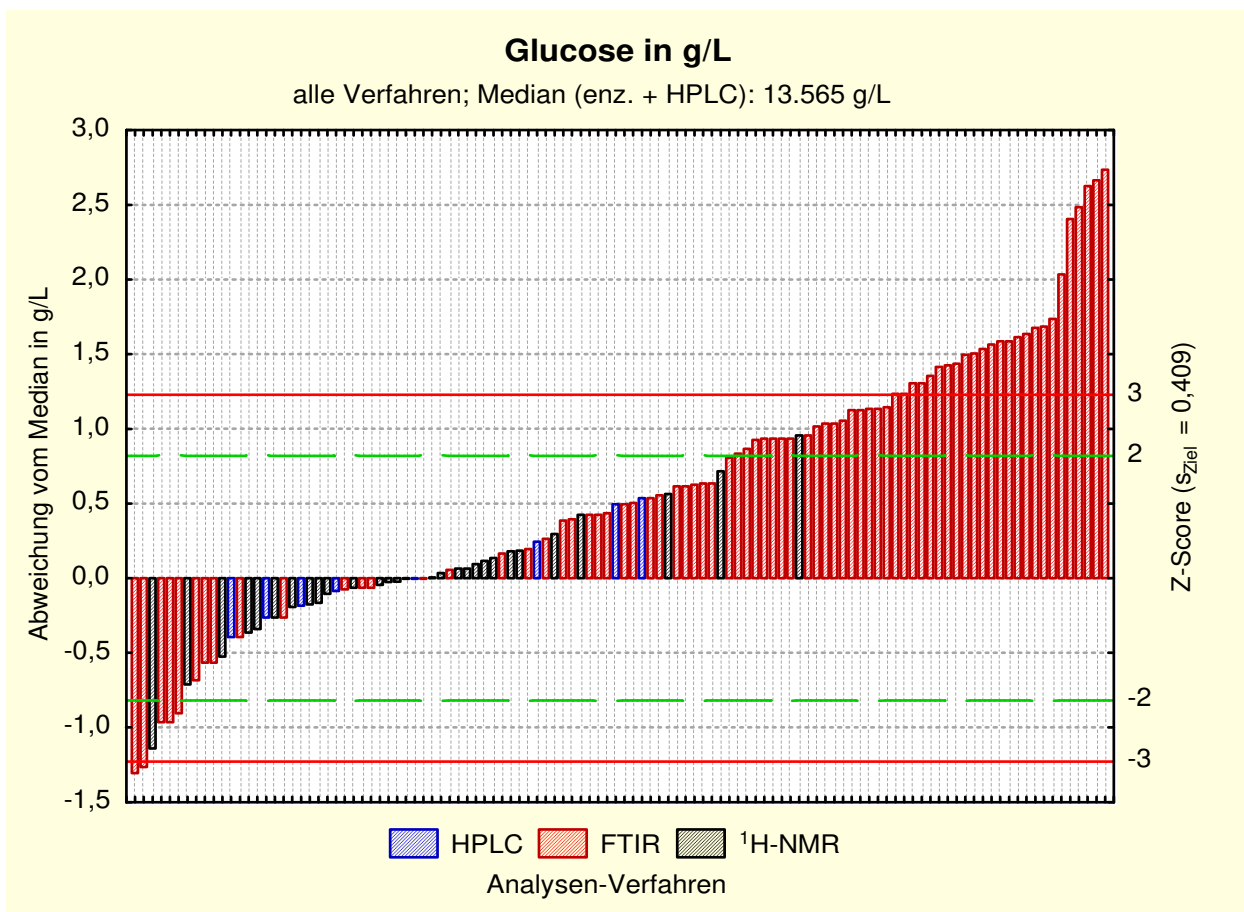
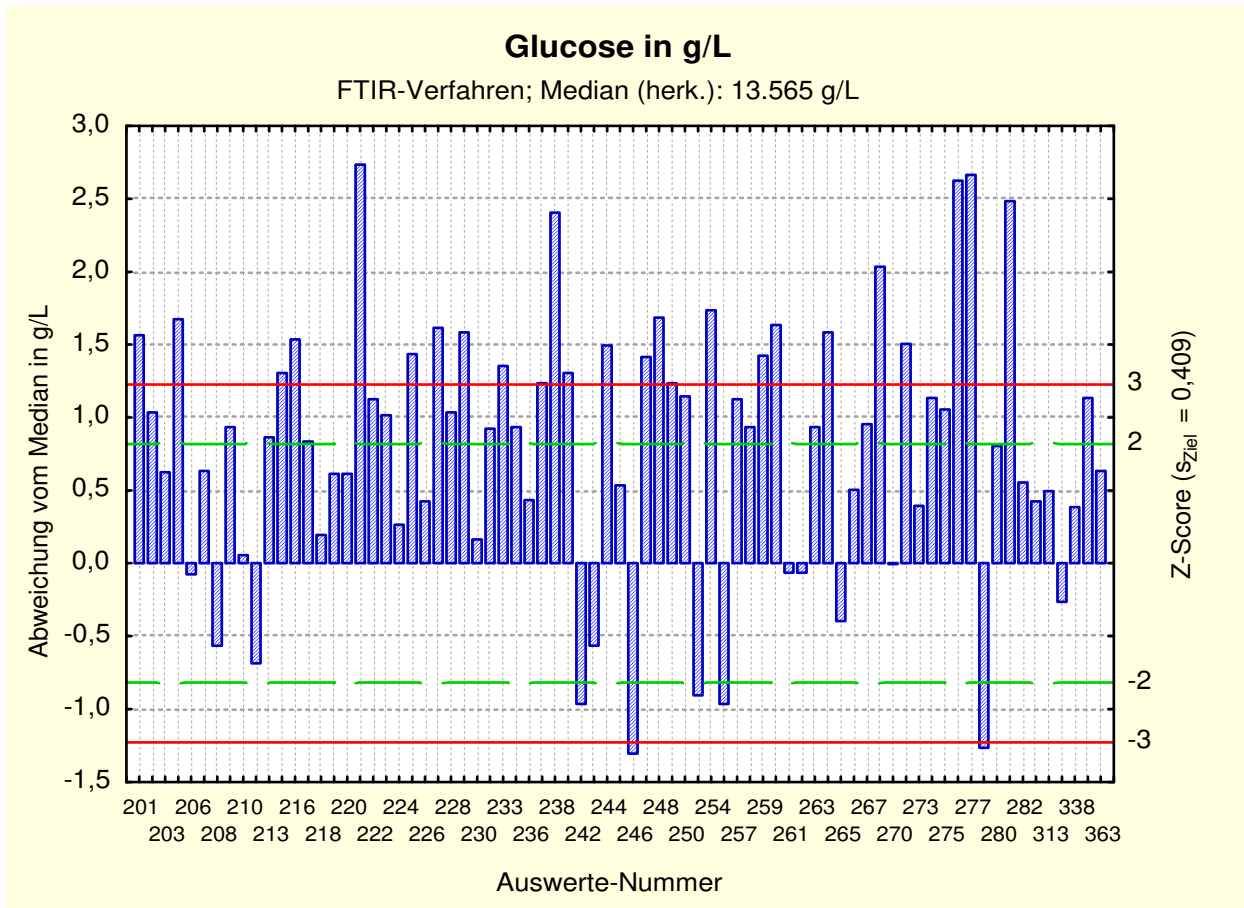
Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	32
Minimalwert	13,17
Mittelwert	13,629
Median	13,565
Maximalwert	14,52
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,308
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,054
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,518
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,409
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,408)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,59
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,75
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,75)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,13
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,13)

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

### 4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	8	13,606	0,391
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	13,581	0,170
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	13,788	0,602
	herkömmliche Verfahren	32	13,601	0,278
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	14,399	0,835
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	13,161	0,718





## 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	14,55	0,950	1,83	2,32	
05	enzymat., autom.	13,51	-0,090	-0,17	-0,22	
06	enzymat., autom.	13,32	-0,280	-0,54	-0,68	
07	enzymat. Hand	14,14	0,540	1,04	1,32	
11	HPLC	13,30	-0,300	-0,58	-0,73	
12	enzymat., autom.	13,61	0,010	0,02	0,02	
14	enzymat., autom.	13,52	-0,080	-0,15	-0,20	
16	enzymat., autom.	13,39	-0,210	-0,40	-0,51	
17	enzymat., autom.	13,70	0,100	0,19	0,24	
20	enzymat., autom.	13,25	-0,350	-0,67	-0,85	
22	HPLC	13,72	0,120	0,23	0,29	
23	HPLC	13,65	0,050	0,10	0,12	
24	NMR	12,42	-1,180	-2,27	-2,88	
27	enzymat., autom.	13,31	-0,290	-0,56	-0,71	
28	HPLC	14,39	0,790	1,52	1,93	
31	enzymat., autom.	14,27	0,670	1,29	1,63	
36	enzymat., autom.	13,70	0,100	0,19	0,24	
39	enzymat., autom.	13,87	0,270	0,52	0,66	
40	HPLC	13,70	0,100	0,19	0,24	
41	enzymat., autom.	13,75	0,153	0,29	0,37	
42	enzymat., autom.	13,64	0,040	0,08	0,10	
43	enzymat., autom.	13,65	0,051	0,10	0,12	
45	enzymat., autom.	13,38	-0,220	-0,42	-0,54	
47	enzymat., autom.	13,55	-0,050	-0,10	-0,12	
50	enzymat., autom.	13,37	-0,230	-0,44	-0,56	
53	enzymat., autom.	13,58	-0,020	-0,04	-0,05	
56	enzymat., autom.	13,20	-0,400	-0,77	-0,98	
59	HPLC	13,35	-0,250	-0,48	-0,61	
62	enzymat., autom.	12,60	-1,000	-1,93	-2,44	
68	enzymat., autom.	13,59	-0,010	-0,02	-0,02	
81	enzymat. Hand	13,05	-0,550	-1,06	-1,34	
85	HPLC	13,75	0,150	0,29	0,37	
92	HPLC	13,71	0,110	0,21	0,27	
107	NMR	12,55	-1,050	-2,02	-2,56	
108	NMR	12,83	-0,767	-1,48	-1,87	
109	NMR	13,38	-0,222	-0,43	-0,54	
110	NMR	14,36	0,764	1,47	1,86	

### 4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	14,16	0,560	1,08	1,37	
202	FTIR	14,30	0,700	1,35	1,71	
203	FTIR	13,40	-0,200	-0,39	-0,49	
204	FTIR	14,68	1,080	2,08	2,63	
206	FTIR	14,13	0,530	1,02	1,29	
207	FTIR	15,20	1,600	3,08	3,90	
208	FTIR	13,74	0,140	0,27	0,34	
209	FTIR	14,40	0,800	1,54	1,95	
210	FTIR	15,60	2,000	3,85	4,88	
212	FTIR	13,01	-0,590	-1,14	-1,44	
213	FTIR	14,62	1,020	1,96	2,49	
214	FTIR	14,37	0,770	1,48	1,88	
216	FTIR	12,90	-0,700	-1,35	-1,71	
217	FTIR	12,90	-0,700	-1,35	-1,71	
218	FTIR	12,98	-0,620	-1,19	-1,51	
219	FTIR	12,71	-0,890	-1,71	-2,17	
220	FTIR	13,66	0,060	0,12	0,15	
221	FTIR	13,90	0,300	0,58	0,73	
222	FTIR	13,67	0,070	0,13	0,17	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	15,65	2,050	3,95	5,00	(**)
224	FTIR	13,65	0,050	0,10	0,12	
225	FTIR	14,50	0,900	1,73	2,19	
226	FTIR	13,80	0,200	0,39	0,49	
227	FTIR	13,86	0,260	0,50	0,63	
228	FTIR	13,80	0,200	0,39	0,49	
229	FTIR	13,19	-0,410	-0,79	-1,00	
230	FTIR	12,94	-0,660	-1,27	-1,61	
231	FTIR	14,24	0,640	1,23	1,56	
233	FTIR	13,77	0,170	0,33	0,41	
235	FTIR	13,37	-0,230	-0,44	-0,56	
236	FTIR	10,70	-2,900	-5,58	-7,07	(**)
237	FTIR	13,10	-0,500	-0,96	-1,22	
238	FTIR	12,61	-0,990	-1,91	-2,41	
241	FTIR	13,51	-0,090	-0,17	-0,22	
242	FTIR	13,50	-0,100	-0,19	-0,24	
243	FTIR	13,90	0,300	0,58	0,73	
244	FTIR	13,46	-0,140	-0,27	-0,34	
245	FTIR	13,66	0,060	0,12	0,15	
246	FTIR	13,18	-0,420	-0,81	-1,02	
247	FTIR	13,95	0,350	0,67	0,85	
248	FTIR	14,46	0,860	1,66	2,10	
249	FTIR	14,60	1,000	1,93	2,44	
250	FTIR	14,50	0,900	1,73	2,19	
251	FTIR	13,88	0,280	0,54	0,68	
254	FTIR	13,30	-0,300	-0,58	-0,73	
256	FTIR	14,40	0,800	1,54	1,95	
257	FTIR	13,49	-0,110	-0,21	-0,27	
258	FTIR	13,60	0,000	0,00	0,00	
259	FTIR	14,87	1,270	2,45	3,10	
260	FTIR	13,30	-0,300	-0,58	-0,73	
261	FTIR	14,30	0,700	1,35	1,71	
262	FTIR	13,50	-0,100	-0,19	-0,24	
263	FTIR	14,60	1,000	1,93	2,44	
264	FTIR	14,10	0,500	0,96	1,22	
265	FTIR	13,00	-0,600	-1,16	-1,46	
266	FTIR	14,42	0,820	1,58	2,00	
267	FTIR	13,90	0,300	0,58	0,73	
269	FTIR	12,70	-0,900	-1,73	-2,19	
270	FTIR	13,96	0,360	0,69	0,88	
271	FTIR	14,99	1,390	2,68	3,39	
273	FTIR	14,59	0,990	1,91	2,41	
274	FTIR	13,40	-0,200	-0,39	-0,49	
275	FTIR	14,80	1,200	2,31	2,93	
276	FTIR	14,21	0,610	1,17	1,49	
277	FTIR	15,02	1,420	2,73	3,46	
278	FTIR	14,10	0,500	0,96	1,22	
280	FTIR	12,52	-1,080	-2,08	-2,63	
281	FTIR	13,25	-0,350	-0,67	-0,85	
282	FTIR	13,60	0,000	0,00	0,00	
283	FTIR	13,41	-0,190	-0,37	-0,46	
313	FTIR	13,30	-0,300	-0,58	-0,73	
322	FTIR	15,20	1,600	3,08	3,90	
338	FTIR	14,76	1,160	2,23	2,83	
349	FTIR	14,60	1,000	1,93	2,44	
363	FTIR	15,10	1,500	2,89	3,66	

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

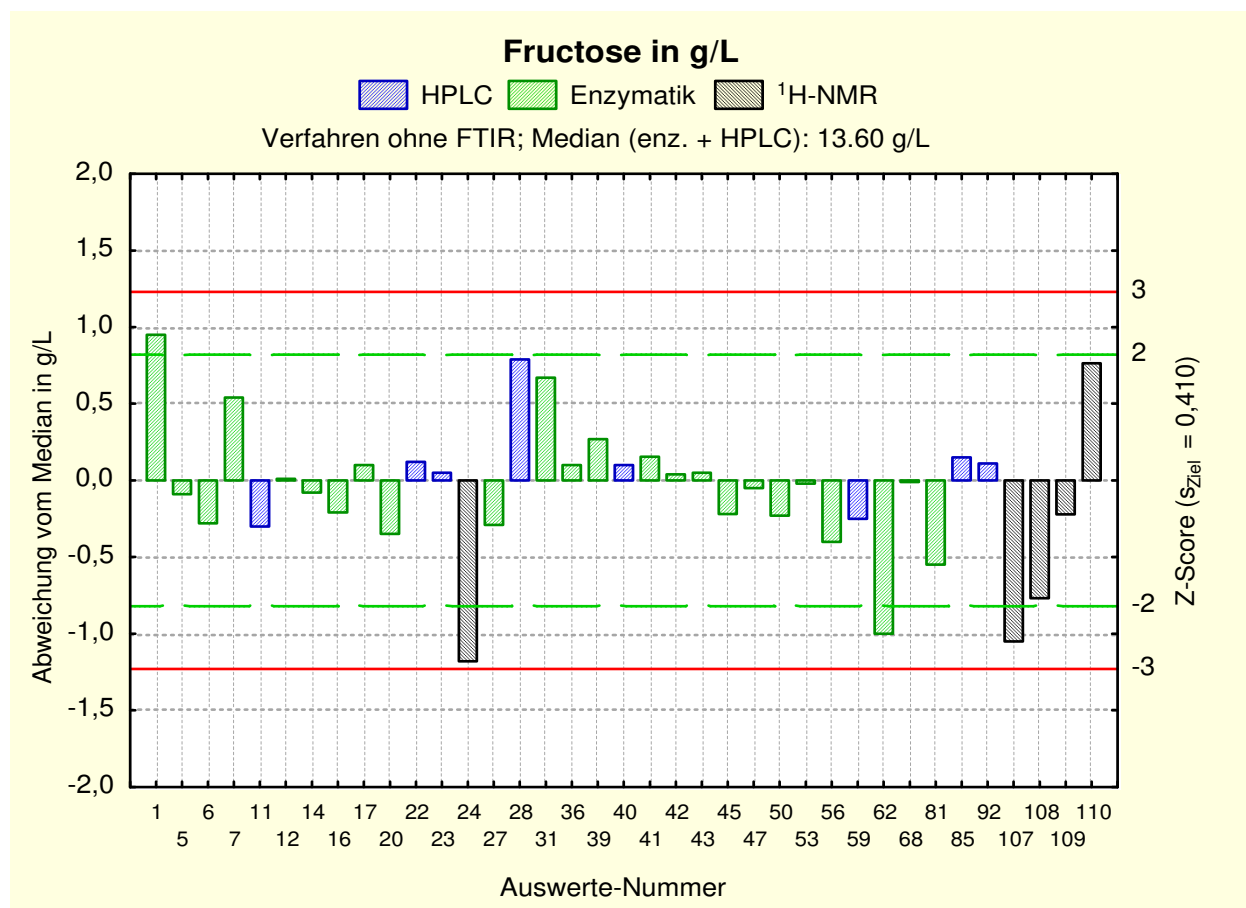
### 4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

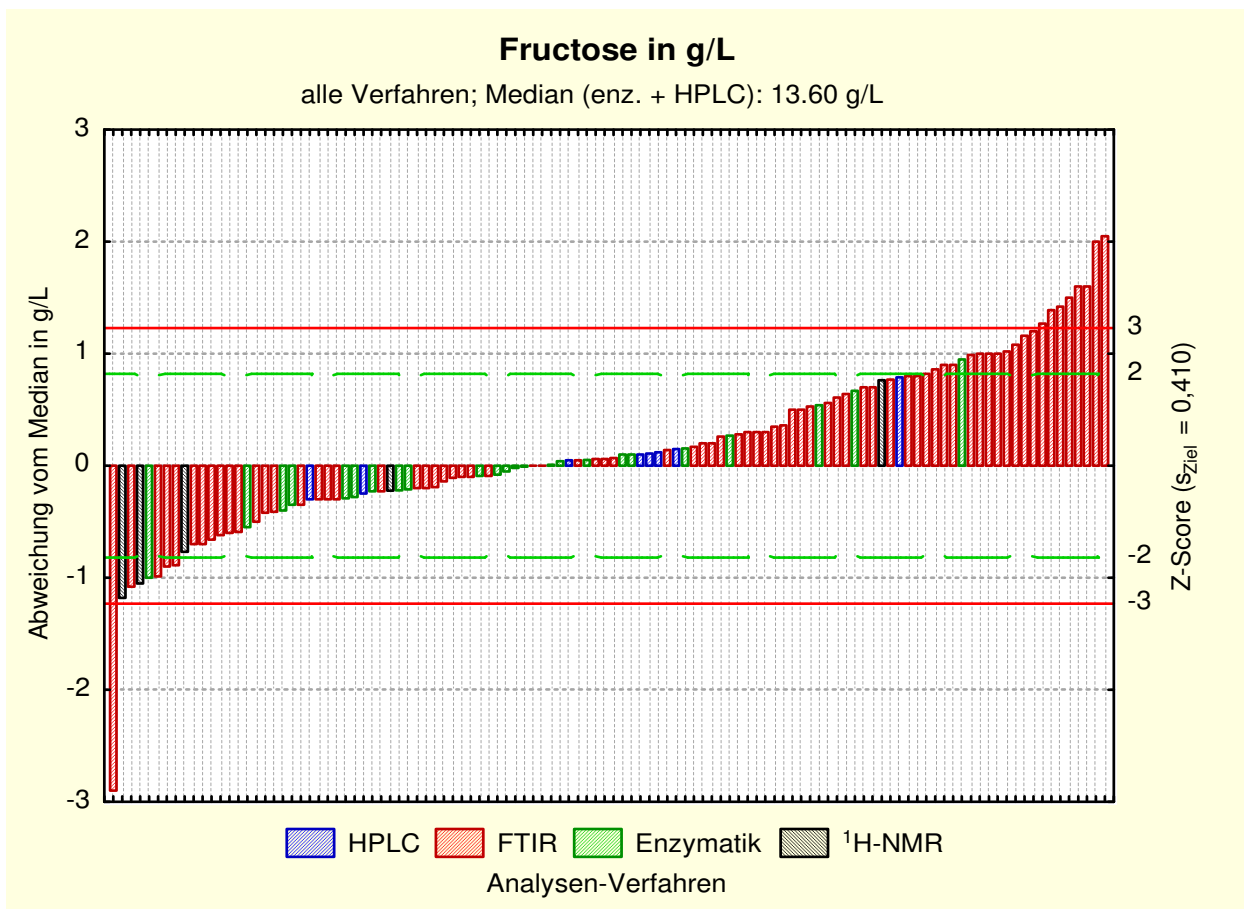
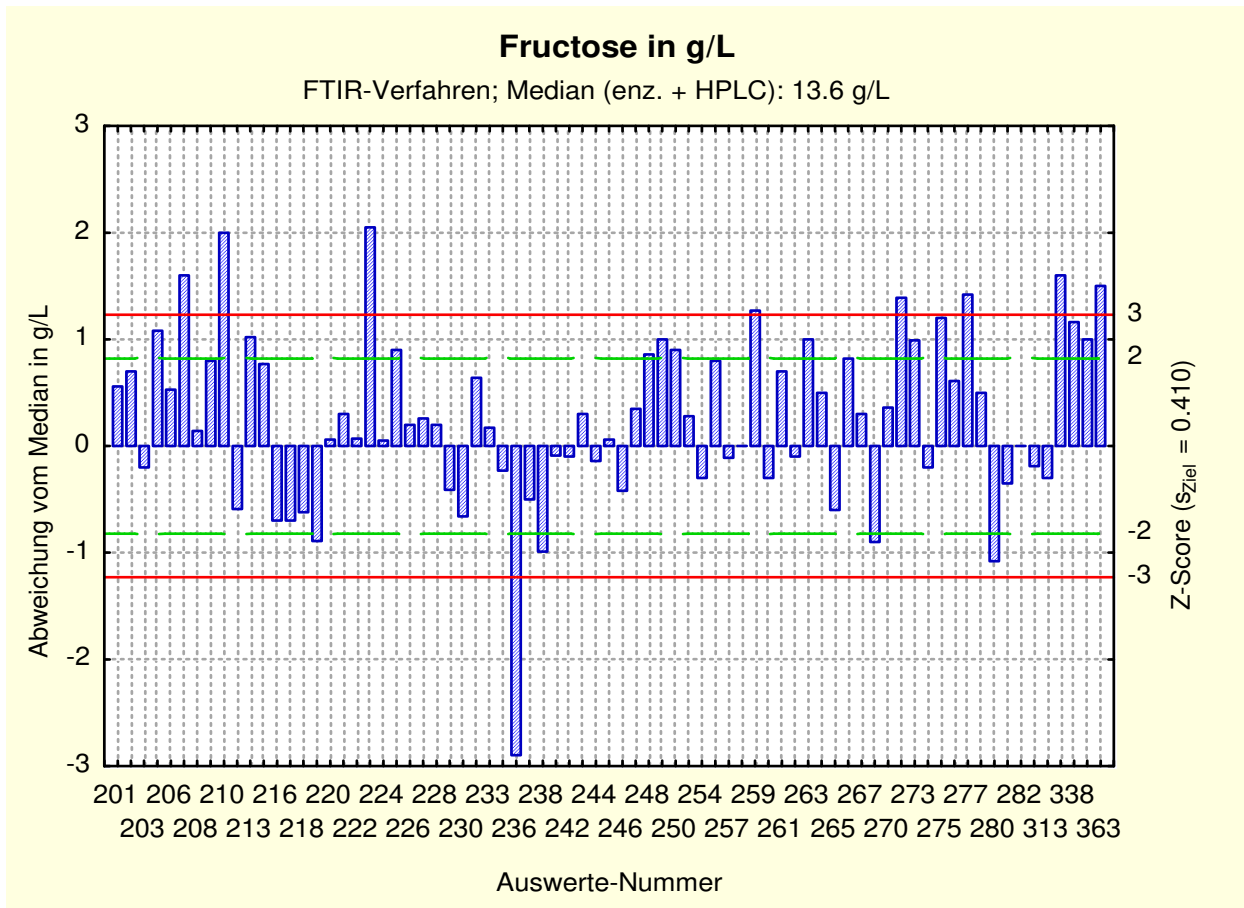
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	32
Minimalwert	12,60
Mittelwert	13,596
Median	13,600
Maximalwert	14,55
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,381
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,067
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,519
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,410
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,330)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,73
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,93
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	(1,15)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,13
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,16
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,20)

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

### 4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	8	13,658	0,262
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	13,521	0,235
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	13,973	0,767
herkömmliche Verfahren		32	13,575	0,288
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	13,883	0,785
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	13,104	0,888







## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,20	0,03	0,10	
05	enzymat. autom.	7,25	0,08	0,27	
06	enzymat. autom.	7,12	-0,05	-0,17	
07	enzymat. Hand	7,23	0,06	0,20	
11	enzymat. autom.	7,36	0,19	0,63	
12	enzymat. Hand	6,83	-0,34	-1,13	
16	enzymat. autom.	8,66	1,49	4,94	(**)
22	HPLC	7,06	-0,11	-0,36	
23	HPLC	7,13	-0,04	-0,13	
24	NMR	6,84	-0,33	-1,09	
28	HPLC	6,70	-0,47	-1,56	
40	HPLC	7,25	0,08	0,27	
45	enzymat. autom.	7,17	0,00	0,00	
56	enzymat. autom.	7,17	0,00	0,00	
59	enzymat. autom.	7,10	-0,07	-0,23	
81	enzymat. Hand	6,83	-0,34	-1,13	
85	HPLC	7,82	0,65	2,16	
90	enzymat. autom.	7,69	0,52	1,72	
92	HPLC	6,95	-0,22	-0,73	
107	NMR	7,09	-0,08	-0,26	
108	NMR	6,49	-0,68	-2,24	
109	NMR	7,23	0,06	0,20	
110	NMR	7,37	0,20	0,66	

Der mit (\*\*) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt. Er wurde im Grubbs-Test als Ausreißer identifiziert. Daher wurde  $Z_{Max}$  auf 4,5 reduziert.

### 4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,59	-0,58	-1,92	-1,67	
202	FTIR	6,13	-1,04	-3,45	-2,99	
203	FTIR	6,39	-0,78	-2,59	-2,24	
204	FTIR	6,58	-0,59	-1,96	-1,70	
206	FTIR	7,48	0,31	1,03	0,89	
207	FTIR	7,58	0,41	1,36	1,18	
208	FTIR	7,64	0,47	1,56	1,35	
209	FTIR	8,30	1,13	3,75	3,25	
210	FTIR	7,67	0,50	1,66	1,44	
212	FTIR	6,51	-0,66	-2,19	-1,90	
213	FTIR	6,71	-0,46	-1,53	-1,32	
214	FTIR	6,60	-0,57	-1,89	-1,64	
216	FTIR	6,20	-0,97	-3,22	-2,79	
217	FTIR	7,36	0,19	0,63	0,55	
218	FTIR	7,67	0,50	1,66	1,44	
219	FTIR	5,86	-1,31	-4,34	-3,76	
220	FTIR	6,69	-0,48	-1,59	-1,38	
221	FTIR	7,60	0,43	1,43	1,24	
222	FTIR	6,80	-0,37	-1,23	-1,06	
223	FTIR	7,06	-0,11	-0,36	-0,32	
224	FTIR	6,90	-0,27	-0,90	-0,78	
225	FTIR	5,80	-1,37	-4,54	-3,94	
226	FTIR	6,64	-0,53	-1,76	-1,52	
227	FTIR	6,42	-0,75	-2,49	-2,16	
228	FTIR	7,00	-0,17	-0,56	-0,49	
229	FTIR	6,58	-0,59	-1,96	-1,70	
230	FTIR	6,62	-0,55	-1,82	-1,58	
231	FTIR	6,27	-0,90	-2,98	-2,59	
233	FTIR	6,28	-0,89	-2,95	-2,56	
235	FTIR	6,99	-0,18	-0,60	-0,52	
236	FTIR	6,20	-0,97	-3,22	-2,79	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
237	FTIR	6,30	-0,87	-2,89	-2,50	
238	FTIR	7,71	0,54	1,79	1,55	
241	FTIR	6,60	-0,57	-1,89	-1,64	
242	FTIR	5,70	-1,47	-4,88	-4,22	
243	FTIR	5,20	-1,97	-6,53	-5,66	(**)
244	FTIR	5,20	-1,97	-6,53	-5,66	(**)
245	FTIR	6,66	-0,51	-1,69	-1,47	
246	FTIR	7,34	0,17	0,56	0,49	
249	FTIR	7,80	0,63	2,09	1,81	
250	FTIR	5,51	-1,66	-5,51	-4,77	
254	FTIR	6,60	-0,57	-1,89	-1,64	
256	FTIR	7,93	0,76	2,52	2,18	
257	FTIR	5,89	-1,28	-4,25	-3,68	
258	FTIR	7,30	0,13	0,43	0,37	
259	FTIR	6,64	-0,53	-1,76	-1,52	
260	FTIR	5,20	-1,97	-6,53	-5,66	(**)
261	FTIR	8,70	1,53	5,07	4,40	
262	FTIR	7,50	0,33	1,09	0,95	
265	FTIR	5,96	-1,21	-4,01	-3,48	
266	FTIR	6,91	-0,26	-0,86	-0,75	
267	FTIR	7,10	-0,07	-0,23	-0,20	
270	FTIR	5,24	-1,93	-6,40	-5,55	(**)
271	FTIR	6,49	-0,68	-2,26	-1,95	
273	FTIR	6,16	-1,01	-3,35	-2,90	
274	FTIR	6,30	-0,87	-2,89	-2,50	
276	FTIR	6,51	-0,66	-2,19	-1,90	
277	FTIR	6,40	-0,77	-2,55	-2,21	
278	FTIR	5,60	-1,57	-5,21	-4,51	
280	FTIR	8,00	0,83	2,75	2,39	
281	FTIR	6,26	-0,91	-3,02	-2,61	
282	FTIR	7,13	-0,04	-0,13	-0,11	
283	FTIR	7,11	-0,06	-0,20	-0,17	
284	FTIR	7,60	0,43	1,43	1,24	
322	FTIR	6,56	-0,61	-2,02	-1,75	
338	FTIR	6,64	-0,53	-1,76	-1,52	
349	FTIR	5,70	-1,47	-4,88	-4,22	

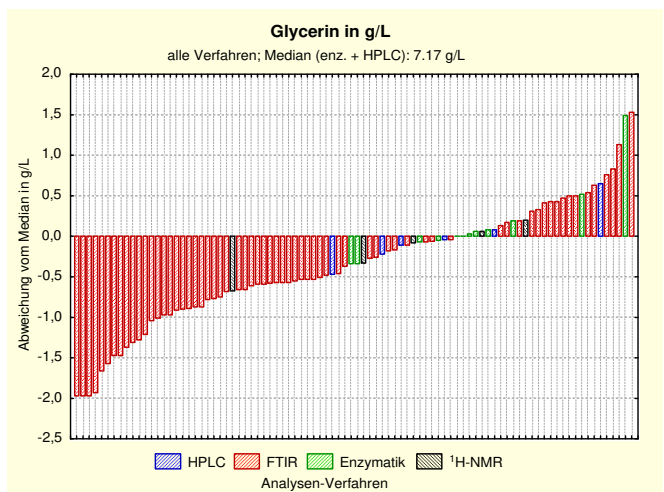
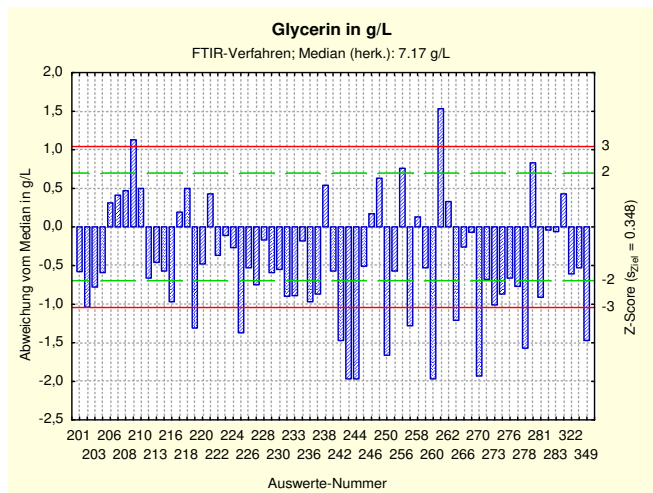
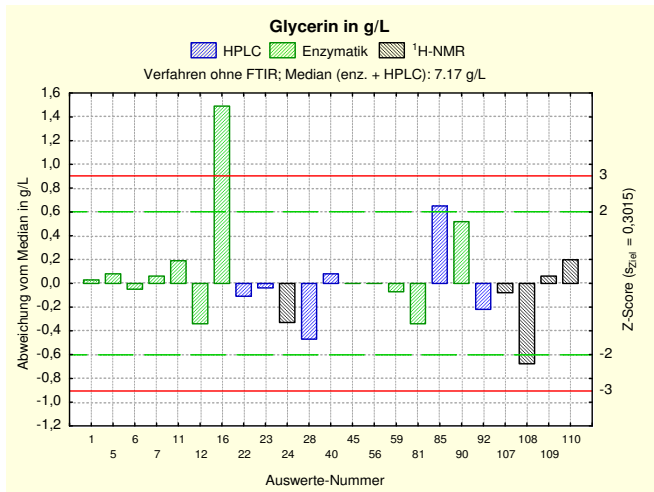
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	17
Minimalwert	6,7	6,7
Mittelwert	7,25	7,17
Median	7,17	7,17
Maximalwert	8,7	7,8
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,445	0,281
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,105	0,068
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,302	0,302
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,348	0,348
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,48	0,81
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	1,28	0,70
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,35	0,23
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,30	0,20

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	7,132	0,381
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	7,325	0,288
enzymat. autom.	ohne Ausreißer	7	7,222	0,132
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	7,023	0,252
	herkömmliche Verfahren mit Ausreißer	18	7,182	0,292
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	67	6,688	0,777
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	7,013	0,376



## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentio-	3,73	-0,020	-0,42	
03	potentio-	3,69	-0,060	-1,26	
04	potentio-	3,69	-0,060	-1,26	
05	potentio-	3,79	0,040	0,84	
06	potentio-	3,75	0,000	0,00	
07	potentio-	3,71	-0,040	-0,84	
11	potentio-	3,77	0,020	0,42	
12	potentio-	3,77	0,020	0,42	
14	potentio-	3,66	-0,090	-1,89	
16	potentio-	3,76	0,010	0,21	
17	potentio-	3,66	-0,090	-1,89	
20	potentio-	3,68	-0,069	-1,45	
22	potentio-	3,85	0,100	2,10	
23	potentio-	3,71	-0,040	-0,84	
24	potentio-	3,75	0,000	0,00	
27	potentio-	3,80	0,049	1,03	
28	potentio-	3,78	0,030	0,63	
29	potentio-	3,70	-0,050	-1,05	
30	potentio-	3,72	-0,030	-0,63	
31	potentio-	3,73	-0,020	-0,42	
33	potentio-	3,64	-0,110	-2,31	
38	potentio-	3,68	-0,070	-1,47	
39	potentio-	3,75	0,000	0,00	
40	potentio-	3,68	-0,070	-1,47	
41	potentio-	3,71	-0,040	-0,84	
42	potentio-	3,77	0,025	0,53	
43	potentio-	3,82	0,070	1,47	
45	potentio-	3,79	0,040	0,84	
47	k. A.	3,74	-0,010	-0,21	
50	potentio-	3,75	0,000	0,00	
53	potentio-	3,71	-0,040	-0,84	
55	potentio-	3,85	0,100	2,10	
56	potentio-	3,78	0,030	0,63	
59	potentio-	3,73	-0,020	-0,42	
60	potentio-	3,75	0,000	0,00	
62	potentio-	3,82	0,070	1,47	
63	potentio-	3,69	-0,060	-1,26	
66	potentio-	3,80	0,050	1,05	
68	potentio-	3,76	0,010	0,21	
75	potentio-	3,72	-0,030	-0,63	
80	potentio-	3,29	-0,460	-9,66	(**)
81	potentio-	3,75	0,000	0,00	
84	potentio-	3,78	0,030	0,63	
92	potentio-	3,90	0,150	3,15	

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

### 4.8.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,64	-0,110	-2,23	
202	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
203	FTIR	3,66	-0,090	-1,83	
204	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	
206	FTIR	3,77	0,020	0,41	
207	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
208	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
209	FTIR	3,61	-0,140	-2,84	
210	FTIR	3,71	-0,040	-0,81	
212	FTIR	3,63	-0,120	-2,43	
213	FTIR	3,53	-0,220	-4,46	
214	FTIR	3,62	-0,130	-2,64	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	3,69	-0,060	-1,22	
217	FTIR	3,72	-0,030	-0,61	
218	FTIR	3,78	0,030	0,61	
219	FTIR	3,74	-0,010	-0,20	
220	FTIR	3,61	-0,140	-2,84	
221	FTIR	3,77	0,020	0,41	
222	FTIR	3,72	-0,030	-0,61	
223	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	
224	FTIR	3,75	0,000	0,00	
225	FTIR	3,71	-0,040	-0,81	
226	FTIR	3,64	-0,110	-2,23	
227	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	
228	FTIR	3,83	0,080	1,62	
229	FTIR	3,69	-0,060	-1,22	
230	FTIR	3,63	-0,120	-2,43	
231	FTIR	3,74	-0,010	-0,20	
233	FTIR	3,64	-0,110	-2,23	
235	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
236	FTIR	3,53	-0,220	-4,46	
237	FTIR	3,65	-0,100	-2,03	
238	FTIR	3,74	-0,010	-0,20	
241	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
242	FTIR	3,73	-0,020	-0,41	
243	FTIR	3,62	-0,130	-2,64	
244	FTIR	3,56	-0,190	-3,85	
245	FTIR	3,65	-0,100	-2,03	
246	FTIR	3,62	-0,130	-2,64	
247	FTIR	3,56	-0,190	-3,85	
249	FTIR	3,65	-0,100	-2,03	
250	FTIR	3,75	0,000	0,00	
251	FTIR	3,76	0,010	0,20	
254	FTIR	3,69	-0,060	-1,22	
255	FTIR	3,60	-0,150	-3,04	
256	FTIR	3,75	0,000	0,00	
257	FTIR	3,69	-0,060	-1,22	
258	FTIR	3,56	-0,190	-3,85	
259	FTIR	3,66	-0,090	-1,83	
260	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	
261	FTIR	3,72	-0,030	-0,61	
262	FTIR	3,75	0,000	0,00	
263	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
264	FTIR	3,68	-0,070	-1,42	
265	FTIR	3,68	-0,070	-1,42	
266	FTIR	3,63	-0,120	-2,43	
267	FTIR	3,61	-0,140	-2,84	
268	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	
269	FTIR	3,50	-0,250	-5,07	(**)
270	FTIR	3,64	-0,110	-2,23	
271	FTIR	3,58	-0,170	-3,45	
273	FTIR	3,84	0,090	1,83	
274	FTIR	3,83	0,080	1,62	
275	FTIR	3,71	-0,040	-0,81	
276	FTIR	3,62	-0,130	-2,64	
277	FTIR	3,63	-0,120	-2,43	
278	FTIR	4,04	0,290	5,88	(**)
280	FTIR	3,68	-0,070	-1,42	
281	FTIR	3,54	-0,210	-4,26	
282	FTIR	3,60	-0,150	-3,04	
283	FTIR	3,56	-0,190	-3,85	
284	FTIR	3,63	-0,120	-2,43	
322	FTIR	3,54	-0,210	-4,26	
338	FTIR	3,74	-0,010	-0,20	
349	FTIR	3,70	-0,050	-1,01	
363	FTIR	3,67	-0,080	-1,62	

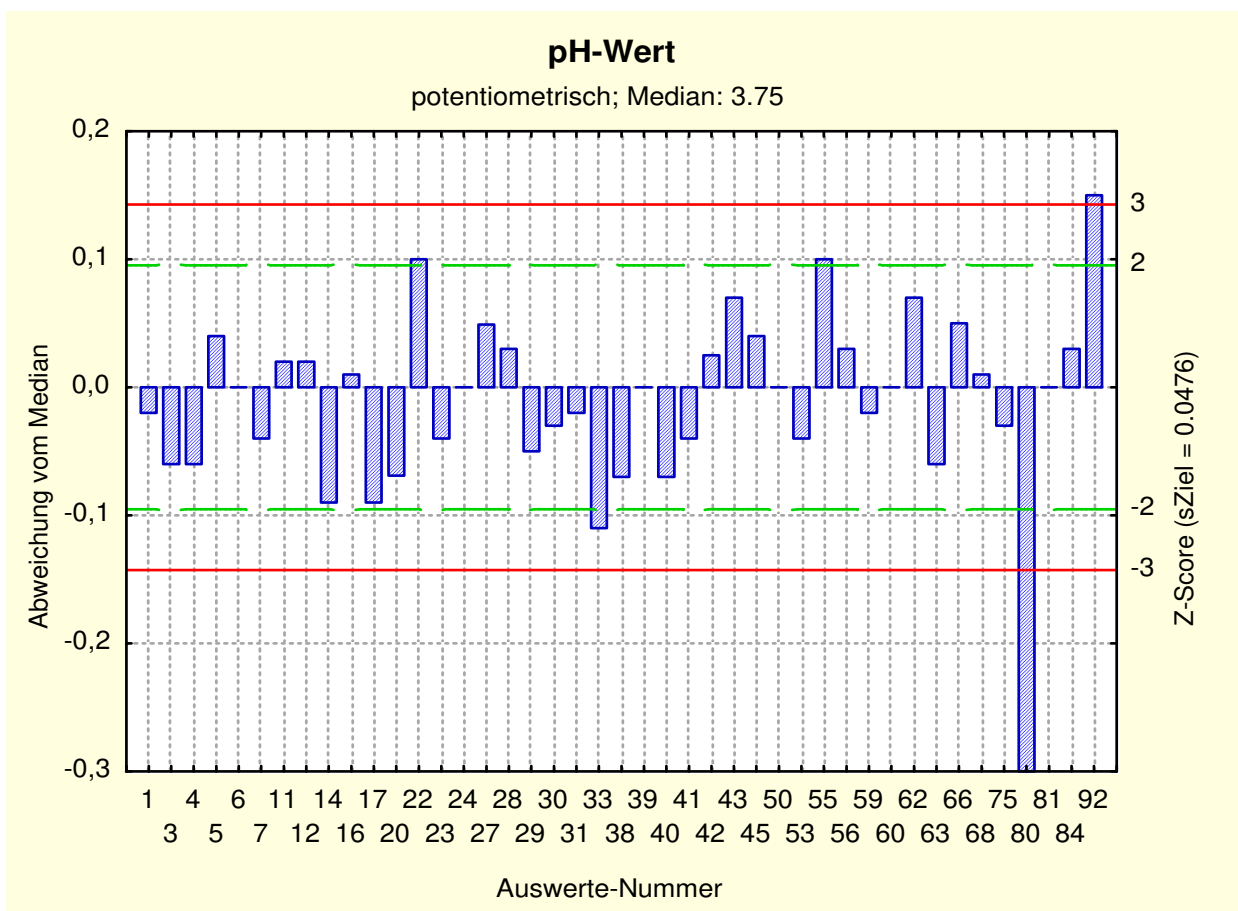
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

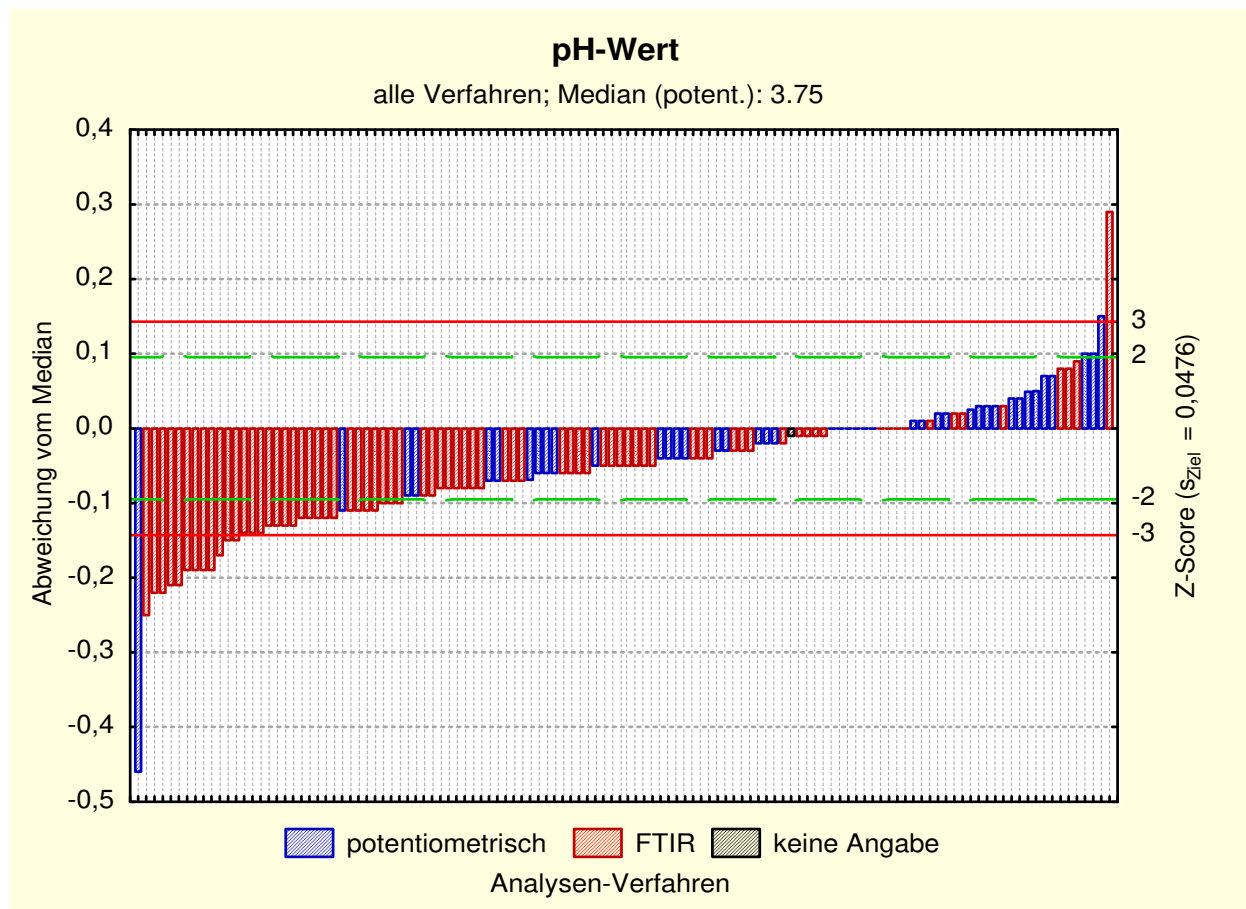
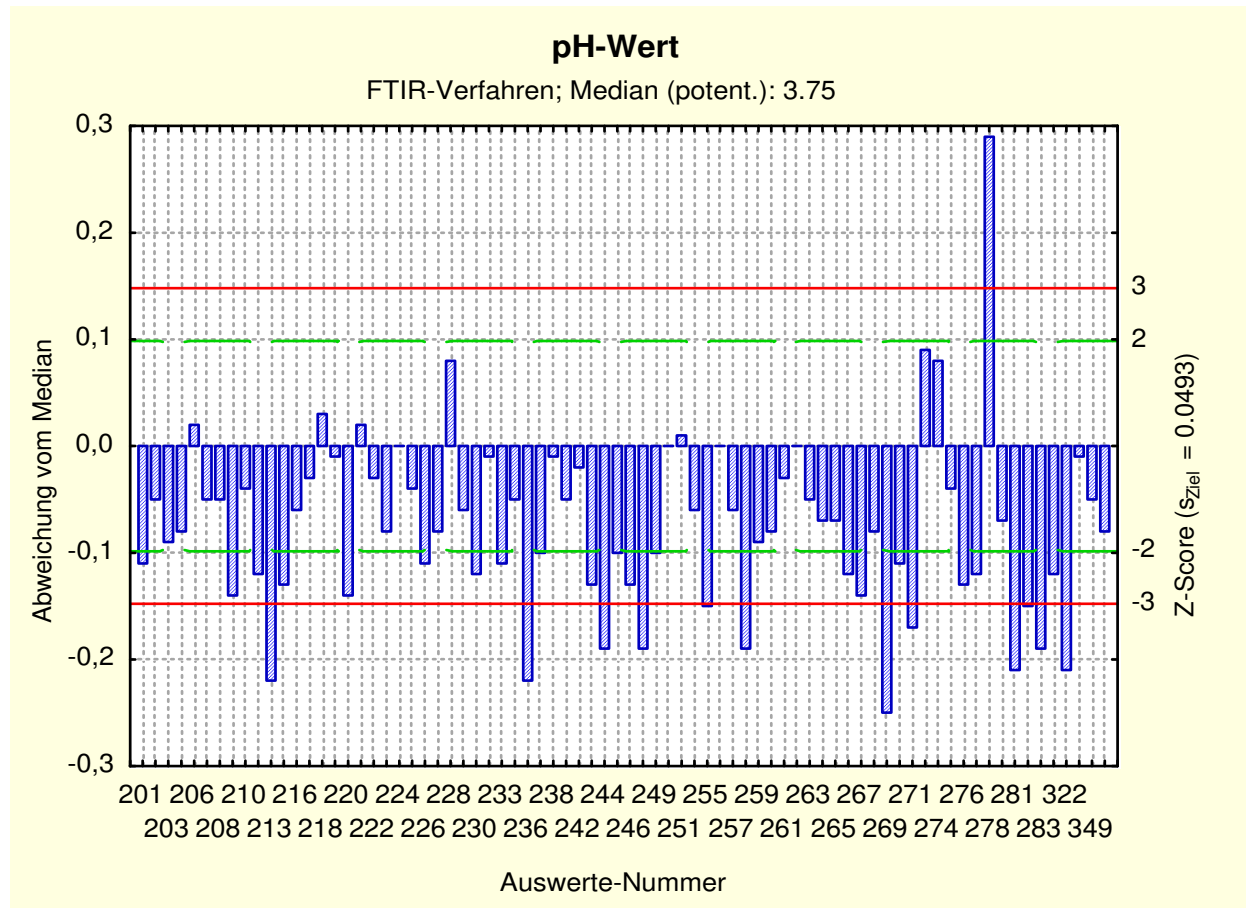
**4.8.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	43	42
Minimalwert	3,29	3,64
Mittelwert	3,735	3,746
Median	3,750	3,750
Maximalwert	3,90	3,90
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0890	0,0562
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0136	0,0087
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,87	1,18
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,81	1,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,29	0,18
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,28	0,18

**4.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	43	3,742	0,0577
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	3,671	0,0742
k. A.	Verfahrensangabe fehlt	1	3,740	





## 4.9 Gesamtsäure [g/L]

### 4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,59	-0,145	-0,58	-1,35	
03	LwK 5.2.1	5,72	-0,015	-0,06	-0,14	
05	LwK 5.2.1	5,60	-0,135	-0,54	-1,26	
06	LwK 5.1	5,63	-0,105	-0,42	-0,98	
07	LwK 5.2.1	5,71	-0,025	-0,10	-0,23	
09	LwK 5.2.1	6,22	0,485	1,94	4,53	
11	LwK 5.2.1	5,66	-0,075	-0,30	-0,70	
12	LwK 5.1	5,66	-0,075	-0,30	-0,70	
14	LwK 5.1	5,91	0,175	0,70	1,63	
16	LwK 5.1	5,90	0,165	0,66	1,54	
17	LwK 5.2.1	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
20	LwK 5.2.1	5,89	0,155	0,62	1,45	
22	LwK 5.1	5,75	0,015	0,06	0,14	
23	LwK 5.1	5,78	0,045	0,18	0,42	
24	LwK 5.1	5,90	0,165	0,66	1,54	
25	LwK 5.1	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
27	LwK 5.2.1	5,79	0,055	0,22	0,51	
28	LwK 5.1	5,79	0,050	0,20	0,47	
29	LwK 5.1	5,80	0,065	0,26	0,61	
30	LwK 5.1	5,70	-0,035	-0,14	-0,33	
31	LwK 5.2.1	5,80	0,065	0,26	0,61	
33	LwK 5.1	5,80	0,065	0,26	0,61	
35	LwK 5.2.1	5,60	-0,135	-0,54	-1,26	
38	LwK 5.1	5,81	0,075	0,30	0,70	
39	LwK 5.1	5,80	0,065	0,26	0,61	
40	LwK 5.2.1	5,84	0,105	0,42	0,98	
41	LwK 5.1	5,72	-0,015	-0,06	-0,14	
42	LwK 5.1	5,75	0,015	0,06	0,14	
43	LwK 5.1	5,68	-0,055	-0,22	-0,51	
47	LwK 5.1	5,75	0,015	0,06	0,14	
50	LwK 5.1	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
51	LwK 5.1	5,70	-0,035	-0,14	-0,33	
53	LwK 5.2.1	5,70	-0,035	-0,14	-0,33	
55	LwK 5.2.1	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
56	LwK 5.2.1	5,70	-0,035	-0,14	-0,33	
59	LwK 5.1	5,60	-0,135	-0,54	-1,26	
60	LwK 5.2.1	5,43	-0,305	-1,22	-2,85	
61	k. A.	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
62	LwK 5.2.1	5,97	0,235	0,94	2,19	
63	LwK 5.1	5,79	0,060	0,24	0,56	
66	LwK 5.1	5,20	-0,535	-2,14	-4,99	
68	LwK 5.1	5,85	0,115	0,46	1,07	
74	phot.aut.	5,30	-0,435	-1,74	-4,06	
75	LwK 5.2.2	5,50	-0,235	-0,94	-2,19	
80	LwK 5.1	5,80	0,065	0,26	0,61	
81	LwK 5.1	5,57	-0,165	-0,66	-1,54	
84	LwK 5.2.2	5,90	0,165	0,66	1,54	
92	LwK 5.1	5,80	0,065	0,26	0,61	

### 4.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	27	5,739	0,117
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01; - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	17	5,705	0,181
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	2 48	5,700 5,720	0,321 0,151
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	5,499	0,186
phot.aut.	photometrisch, automatisiert	1	5,300	
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	5,500	



## 4.9.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,40	-0,335	-1,34	-2,31	
202	LwK 5.3	5,33	-0,405	-1,62	-2,79	
203	LwK 5.3	5,44	-0,295	-1,18	-2,03	
204	LwK 5.3	5,49	-0,245	-0,98	-1,69	
206	LwK 5.3	5,51	-0,225	-0,90	-1,55	
207	LwK 5.3	5,68	-0,055	-0,22	-0,38	
208	LwK 5.3	5,44	-0,295	-1,18	-2,03	
209	LwK 5.3	4,70	-1,035	-4,15	-7,14	(**)
210	LwK 5.3	5,68	-0,055	-0,22	-0,38	
212	LwK 5.3	5,35	-0,385	-1,54	-2,66	
213	LwK 5.3	5,10	-0,635	-2,55	-4,38	
214	LwK 5.3	5,53	-0,205	-0,82	-1,41	
216	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
217	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
218	LwK 5.3	5,48	-0,255	-1,02	-1,76	
219	LwK 5.3	5,62	-0,115	-0,46	-0,79	
220	LwK 5.3	5,45	-0,285	-1,14	-1,97	
221	LwK 5.3	5,70	-0,035	-0,14	-0,24	
222	LwK 5.3	5,42	-0,315	-1,26	-2,17	
223	LwK 5.3	5,29	-0,445	-1,78	-3,07	
224	LwK 5.3	5,87	0,135	0,54	0,93	
225	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
226	LwK 5.3	5,65	-0,085	-0,34	-0,59	
227	LwK 5.3	5,48	-0,255	-1,02	-1,76	
228	LwK 5.3	5,32	-0,415	-1,66	-2,86	
229	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
230	LwK 5.3	6,06	0,325	1,30	2,24	
231	LwK 5.3	5,71	-0,025	-0,10	-0,17	
233	LwK 5.3	5,59	-0,145	-0,58	-1,00	
235	LwK 5.3	5,38	-0,355	-1,42	-2,45	
236	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
237	LwK 5.3	5,70	-0,035	-0,14	-0,24	
238	LwK 5.3	5,52	-0,215	-0,86	-1,48	
241	LwK 5.3	5,67	-0,065	-0,26	-0,45	
242	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
243	LwK 5.3	5,44	-0,295	-1,18	-2,03	
244	LwK 5.3	5,20	-0,535	-2,14	-3,69	
245	LwK 5.3	5,57	-0,165	-0,66	-1,14	
246	LwK 5.3	5,72	-0,015	-0,06	-0,10	
247	LwK 5.3	5,53	-0,205	-0,82	-1,41	
248	LwK 5.3	5,76	0,025	0,10	0,17	
249	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
250	LwK 5.3	5,47	-0,265	-1,06	-1,83	
251	LwK 5.3	5,84	0,105	0,42	0,72	
254	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
255	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
256	LwK 5.3	5,27	-0,465	-1,86	-3,21	
257	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
258	LwK 5.3	5,80	0,065	0,26	0,45	
259	LwK 5.3	4,63	-1,105	-4,43	-7,62	(**)
260	LwK 5.3	5,00	-0,735	-2,95	-5,07	(**)
261	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
262	LwK 5.3	5,80	0,065	0,26	0,45	
263	LwK 5.3	5,70	-0,035	-0,14	-0,24	
264	LwK 5.3	5,38	-0,355	-1,42	-2,45	
265	LwK 5.3	5,62	-0,115	-0,46	-0,79	
266	LwK 5.3	5,42	-0,315	-1,26	-2,17	
267	LwK 5.3	5,08	-0,655	-2,63	-4,52	
268	LwK 5.3	4,60	-1,135	-4,55	-7,83	(**)
269	LwK 5.3	5,40	-0,335	-1,34	-2,31	
270	LwK 5.3	5,46	-0,275	-1,10	-1,90	
271	LwK 5.3	5,29	-0,445	-1,78	-3,07	
273	LwK 5.3	5,25	-0,485	-1,94	-3,34	
274	LwK 5.3	5,20	-0,535	-2,14	-3,69	

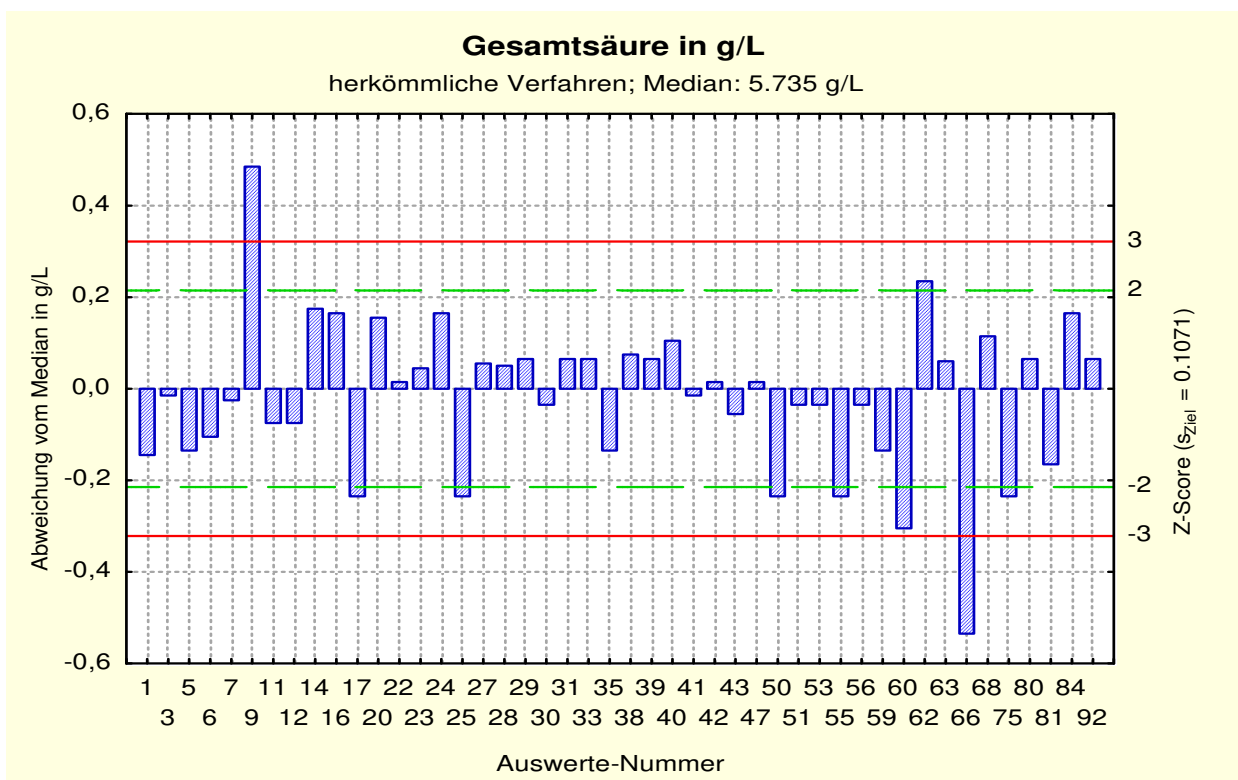
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

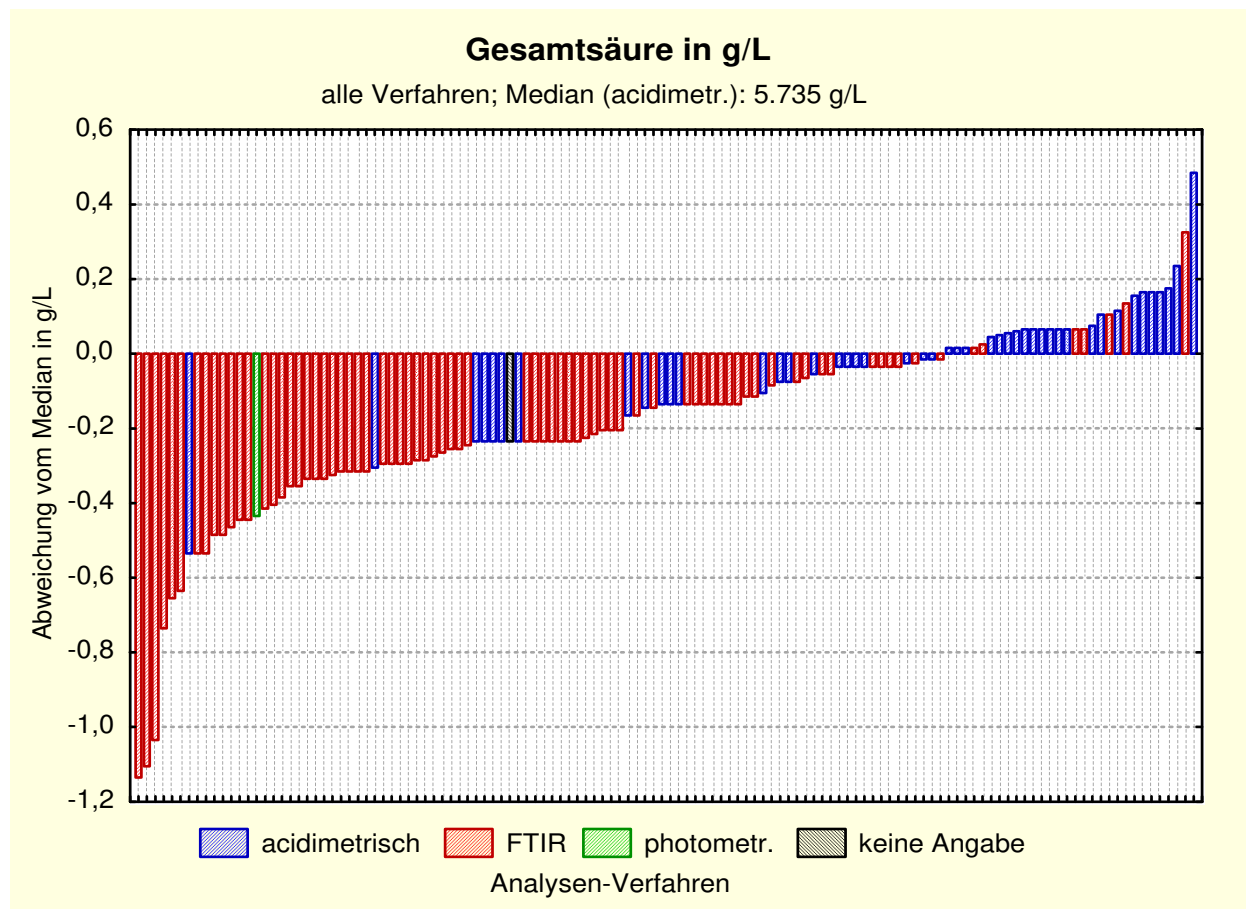
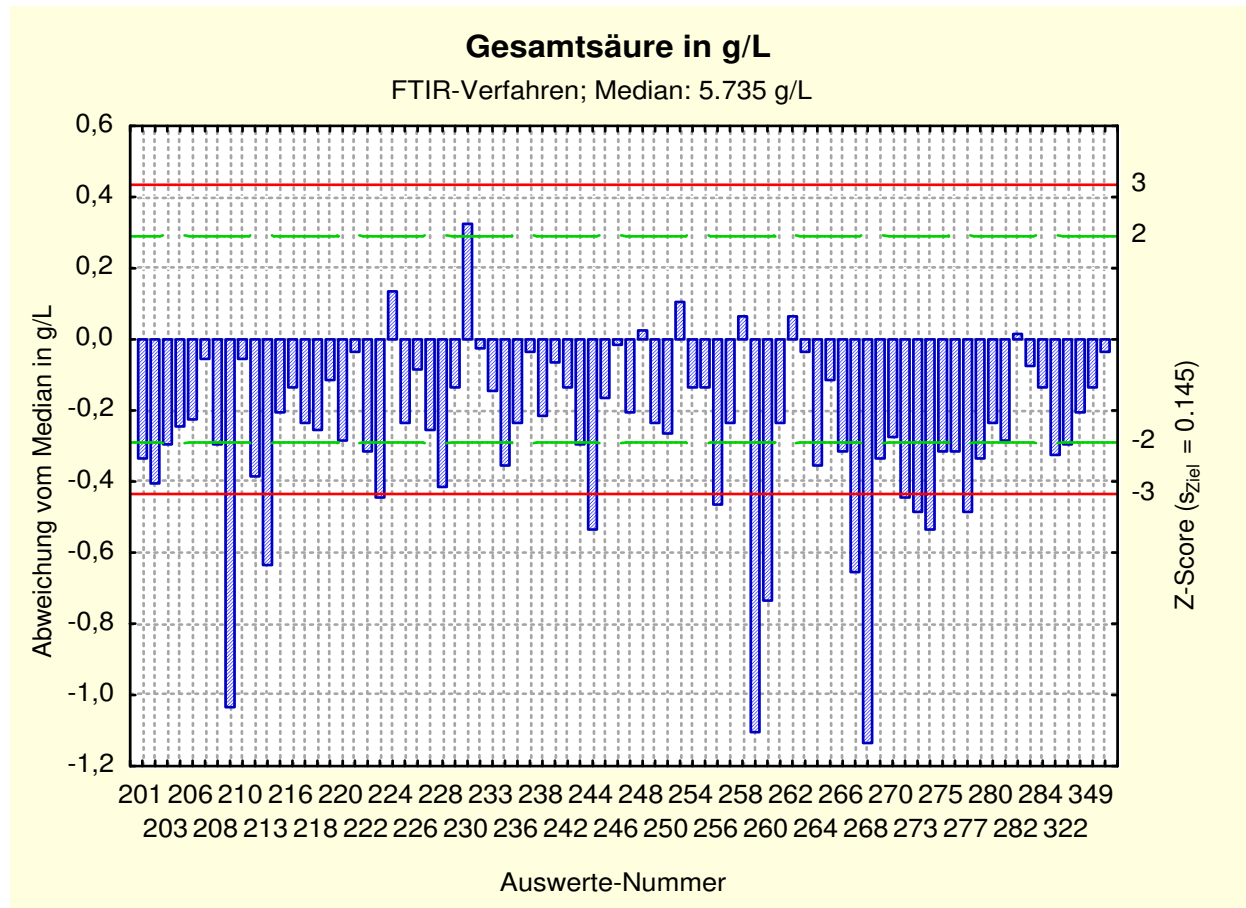
**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 5.3	5,42	-0,315	-1,26	-2,17	
276	LwK 5.3	5,42	-0,315	-1,26	-2,17	
277	LwK 5.3	5,25	-0,485	-1,94	-3,34	
278	LwK 5.3	5,40	-0,335	-1,34	-2,31	
280	LwK 5.3	5,50	-0,235	-0,94	-1,62	
281	LwK 5.3	5,45	-0,285	-1,14	-1,97	
282	LwK 5.3	5,75	0,015	0,06	0,10	
283	LwK 5.3	5,66	-0,075	-0,30	-0,52	
284	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
313	LwK 5.3	5,41	-0,325	-1,30	-2,24	
322	LwK 5.3	5,44	-0,295	-1,18	-2,03	
338	LwK 5.3	5,53	-0,205	-0,82	-1,41	
349	LwK 5.3	5,60	-0,135	-0,54	-0,93	
363	LwK 5.3	5,70	-0,035	-0,14	-0,24	

**4.9.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	46
Minimalwert	5,20
Mittelwert	5,719
Median	5,735
Maximalwert	6,22
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,168
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,249
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,67
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,57
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	1,16
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,23
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,17





## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,83	0,023	0,25	
03	HPLC	1,73	-0,081	-0,87	
05	photometr.	1,81	0,003	0,03	
06	HPLC	1,81	0,003	0,03	
07	HPLC	1,61	-0,197	-2,11	
08	IC	1,78	-0,026	-0,28	
09	HPLC	2,02	0,213	2,28	
11	photometr., autom.	1,60	-0,207	-2,21	
12	photometr.	2,16	0,353	3,78	
14	photometr., autom.	1,73	-0,077	-0,82	
17	photometr., autom.	1,48	-0,327	-3,50	
23	HPLC	1,61	-0,197	-2,11	
24	NMR	1,86	0,053	0,57	
27	photometr., autom.	1,80	-0,003	-0,03	
28	HPLC	1,94	0,133	1,42	
31	photometr., autom.	1,67	-0,137	-1,47	
39	photometr., autom.	1,95	0,143	1,53	
40	HPLC	1,73	-0,077	-0,82	
41	photometr., autom.	1,87	0,063	0,67	
42	photometr., autom.	1,60	-0,207	-2,21	
43	photometr., autom.	1,80	-0,007	-0,07	
47	photometr., autom.	1,87	0,063	0,67	
50	photometr., autom.	1,85	0,043	0,46	
56	photometr., autom.	1,89	0,083	0,89	
59	HPLC	1,79	-0,017	-0,18	
61	photometr., autom.	1,20	-0,607	-6,49	(**)
62	HPLC	2,49	0,681	7,28	(**)
68	photometr., autom.	1,82	0,013	0,14	
81	photometr.	2,47	0,663	7,09	(**)
91	HPLC	1,86	0,053	0,57	
107	NMR	1,57	-0,241	-2,57	
108	NMR	1,58	-0,228	-2,43	
109	NMR	1,68	-0,123	-1,32	
110	NMR	1,93	0,120	1,28	

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

### 4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,29	-0,520	-5,55	-2,29	
202	FTIR	1,01	-0,800	-8,54	-3,52	
203	FTIR	1,27	-0,540	-5,77	-2,38	
204	FTIR	2,24	0,430	4,59	1,89	
206	FTIR	1,47	-0,340	-3,63	-1,50	
208	FTIR	1,29	-0,520	-5,55	-2,29	
209	FTIR	1,50	-0,310	-3,31	-1,37	
210	FTIR	2,20	0,390	4,16	1,72	
212	FTIR	2,22	0,410	4,38	1,81	
213	FTIR	2,66	0,850	9,08	3,74	
214	FTIR	1,31	-0,500	-5,34	-2,20	
216	FTIR	2,00	0,190	2,03	0,84	
217	FTIR	1,27	-0,540	-5,77	-2,38	
218	FTIR	1,39	-0,420	-4,49	-1,85	
219	FTIR	1,59	-0,220	-2,35	-0,97	
220	FTIR	1,43	-0,380	-4,06	-1,67	
221	FTIR	1,60	-0,210	-2,24	-0,93	
222	FTIR	1,46	-0,350	-3,74	-1,54	
223	FTIR	1,65	-0,160	-1,71	-0,70	
224	FTIR	1,55	-0,260	-2,78	-1,15	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
225	FTIR	1,20	-0,610	-6,51	-2,69	
226	FTIR	1,49	-0,320	-3,42	-1,41	
227	FTIR	2,28	0,470	5,02	2,07	
228	FTIR	1,20	-0,610	-6,51	-2,69	
229	FTIR	1,54	-0,270	-2,88	-1,19	
230	FTIR	2,38	0,570	6,09	2,51	
231	FTIR	1,55	-0,260	-2,78	-1,15	
233	FTIR	1,30	-0,510	-5,45	-2,25	
235	FTIR	1,69	-0,120	-1,28	-0,53	
236	FTIR	2,00	0,190	2,03	0,84	
237	FTIR	1,30	-0,510	-5,45	-2,25	
238	FTIR	1,51	-0,300	-3,20	-1,32	
241	FTIR	1,37	-0,440	-4,70	-1,94	
242	FTIR	2,10	0,290	3,10	1,28	
243	FTIR	2,64	0,830	8,86	3,66	
244	FTIR	2,70	0,890	9,50	3,92	
245	FTIR	1,42	-0,390	-4,16	-1,72	
246	FTIR	1,40	-0,410	-4,38	-1,81	
247	FTIR	1,89	0,080	0,85	0,35	
249	FTIR	1,40	-0,410	-4,38	-1,81	
250	FTIR	1,73	-0,080	-0,85	-0,35	
254	FTIR	1,20	-0,610	-6,51	-2,69	
256	FTIR	1,61	-0,200	-2,14	-0,88	
257	FTIR	1,47	-0,340	-3,63	-1,50	
258	FTIR	1,72	-0,090	-0,96	-0,40	
259	FTIR	2,04	0,230	2,46	1,01	
260	FTIR	1,40	-0,410	-4,38	-1,81	
261	FTIR	1,20	-0,610	-6,51	-2,69	
263	FTIR	1,40	-0,410	-4,38	-1,81	
264	FTIR	1,21	-0,600	-6,41	-2,64	
265	FTIR	2,23	0,420	4,49	1,85	
266	FTIR	1,90	0,090	0,96	0,40	
267	FTIR	1,61	-0,200	-2,14	-0,88	
268	FTIR	2,95	1,140	12,17	5,02	(*)
269	FTIR	1,20	-0,610	-6,51	-2,69	
270	FTIR	2,44	0,630	6,73	2,78	
271	FTIR	1,38	-0,430	-4,59	-1,89	
273	FTIR	2,23	0,420	4,49	1,85	
274	FTIR	1,60	-0,210	-2,24	-0,93	
275	FTIR	1,36	-0,450	-4,81	-1,98	
276	FTIR	2,37	0,560	5,98	2,47	
277	FTIR	2,35	0,540	5,77	2,38	
278	FTIR	1,90	0,090	0,96	0,40	
280	FTIR	1,44	-0,370	-3,95	-1,63	
281	FTIR	2,19	0,380	4,06	1,67	
282	FTIR	1,50	-0,310	-3,31	-1,37	
283	FTIR	1,54	-0,270	-2,88	-1,19	
322	FTIR	1,65	-0,160	-1,71	-0,70	
338	FTIR	0,88	-0,930	-9,93	-4,10	
349	FTIR	2,00	0,190	2,03	0,84	
363	FTIR	1,60	-0,210	-2,24	-0,93	

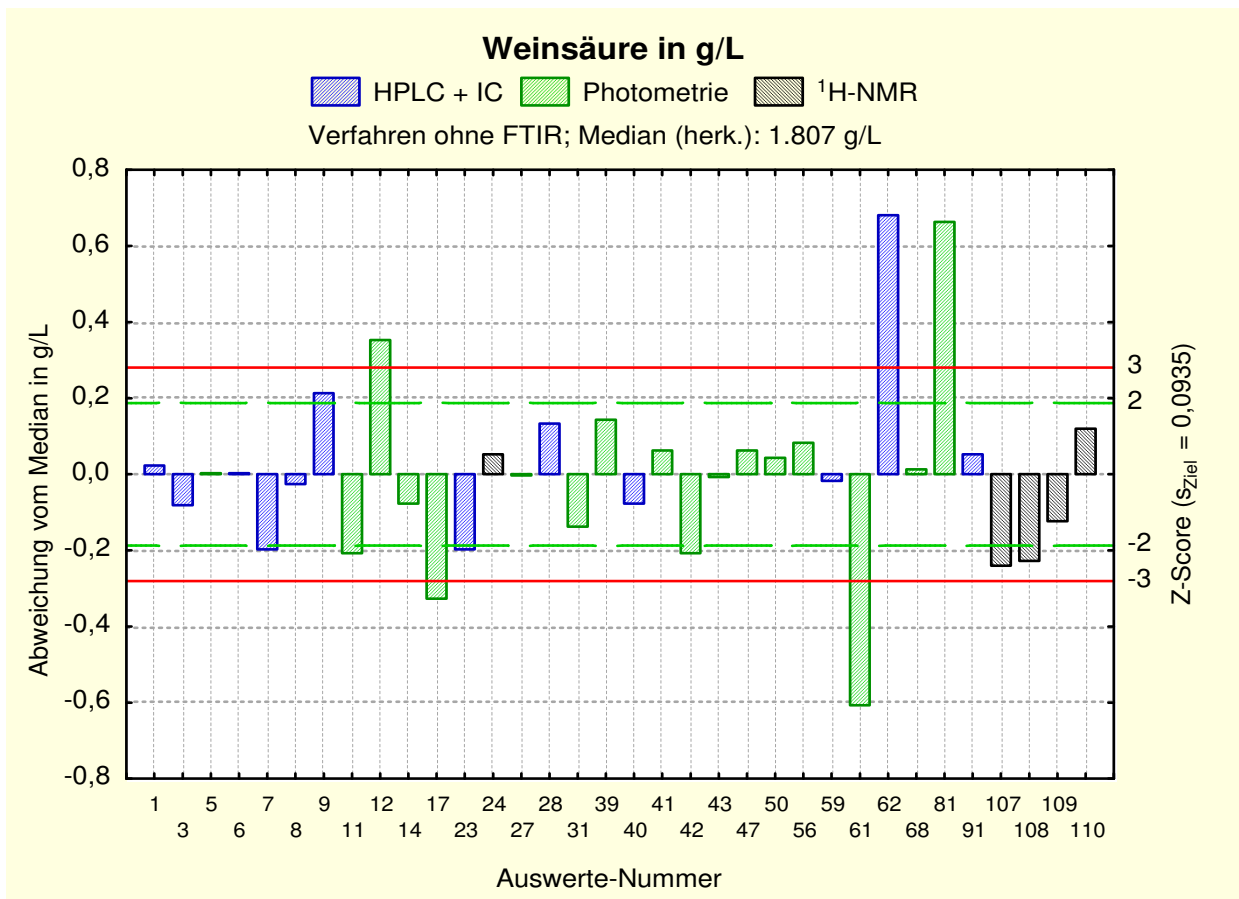
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab.

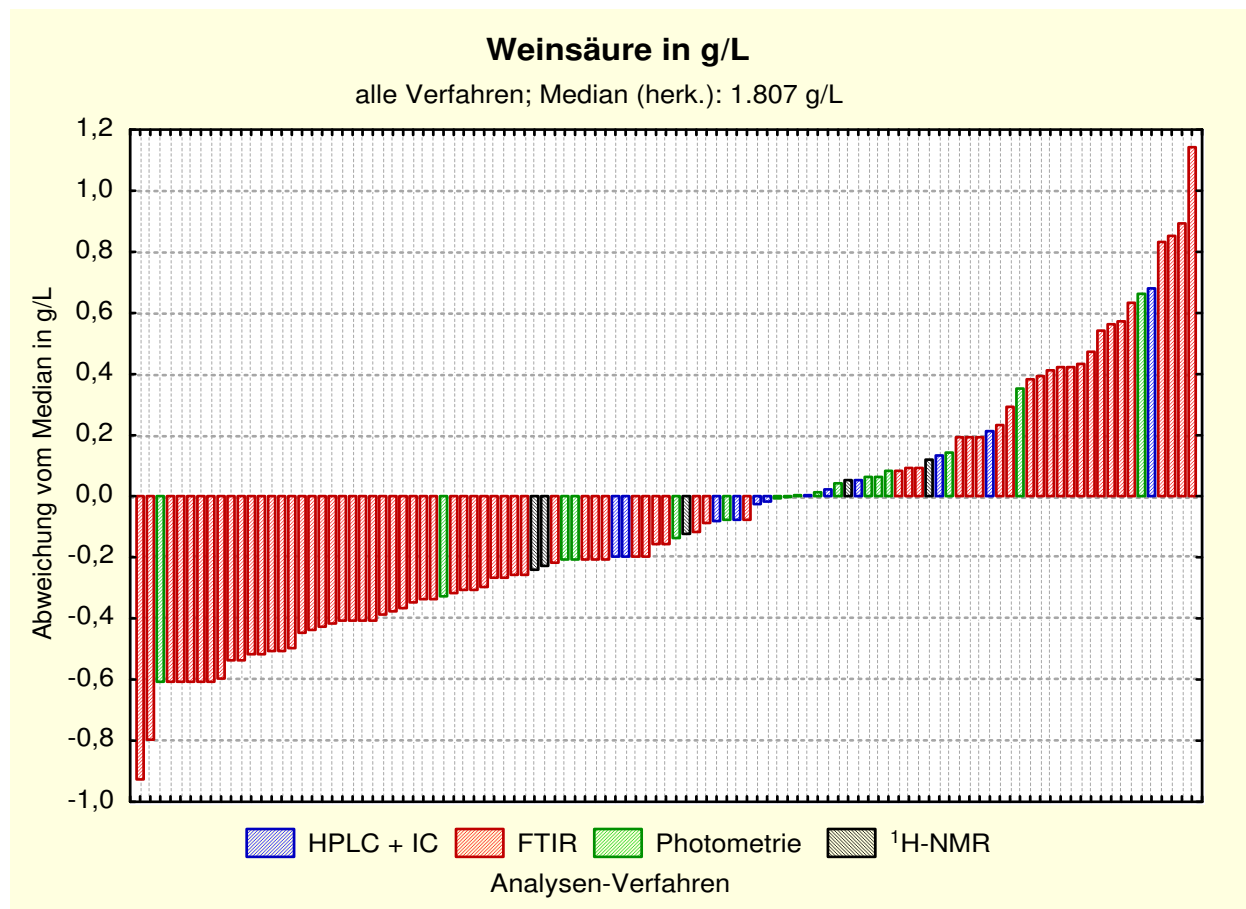
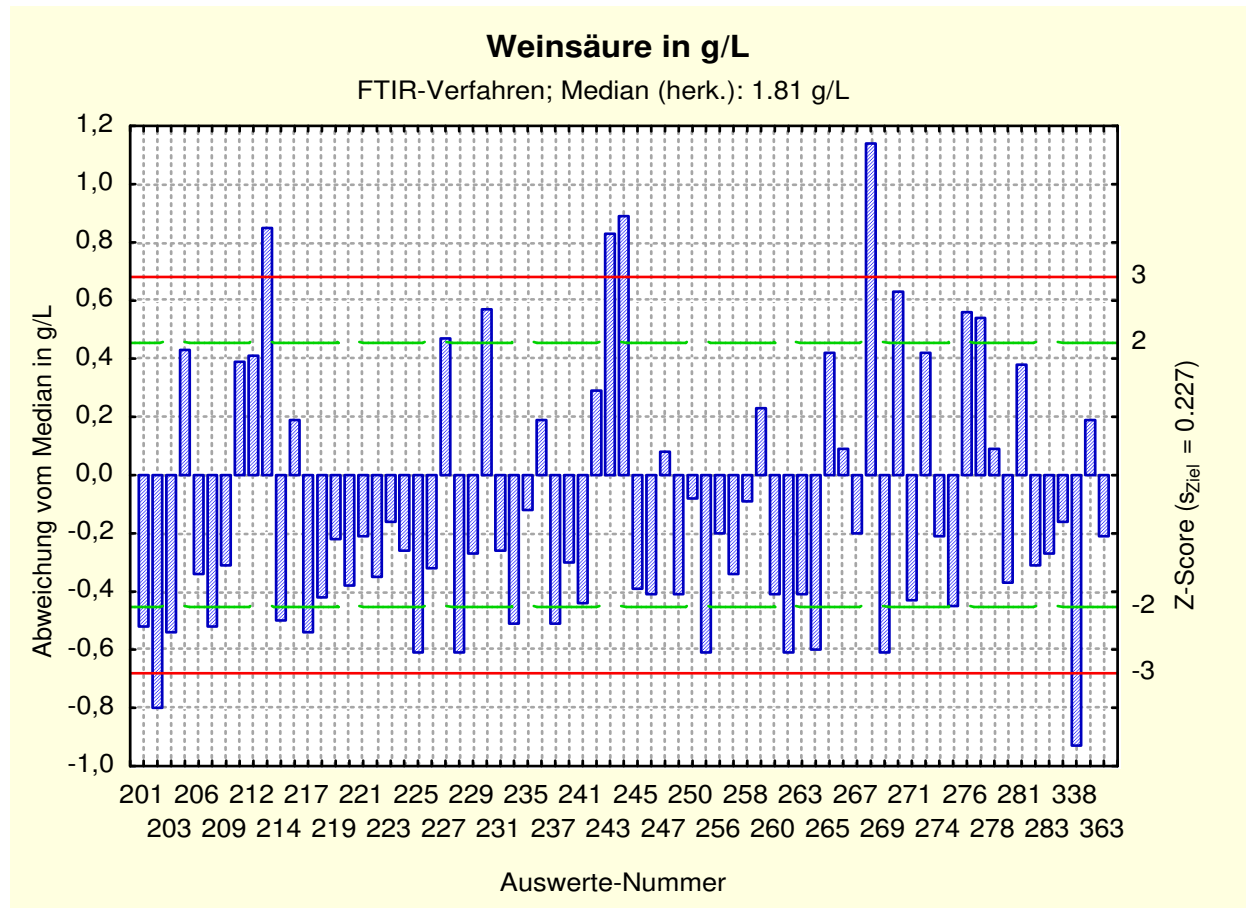
**4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC		herkömmliche Verfahren	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	11	29	26
Minimalwert	1,61	1,61	1,20	1,48
Mittelwert	1,850	1,792	1,820	1,793
Median	1,800	1,790	1,810	1,807
Maximalwert	2,49	2,02	2,49	2,16
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,233	0,124	0,254	0,146
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,067	0,038	0,047	0,029
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,093	0,093	0,094	0,094
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )				
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227	0,227	0,227	0,227
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,50	1,34	2,71	1,56
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )				
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,39	0,55	1,12	0,64
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,72	0,40	0,50	0,31
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )				
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,11	0,17	0,21	0,13

**4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	1,817	0,160
IC	Ionenchromatographie	1	1,781	
	HPLC und IC	12	1,811	0,152
photometr.	photometr. n. Rebelein	3	2,147	0,374
phot.autom.	photometr., automatisiert	14	1,752	0,161
	herkömmliche Verfahren	29	1,804	0,156
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	1,660	0,435
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,723	0,185





## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,710	0,0600	1,53	
03	OIV SO2-korr.	0,706	0,0560	1,43	
05	OIV SO2-korr.	0,680	0,0300	0,76	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,589	-0,0610	-1,55	
09	OIV sonst. mod. SO2	0,584	-0,0660	-1,68	
11	OIV SO2-korr.	0,576	-0,0740	-1,89	
12	Halbmikro SO2 unber.	0,700	0,0500	1,27	
22	Gerhardt SO2 korr.	0,700	0,0500	1,27	
23	Halbmikro SO2 unber.	0,690	0,0400	1,02	
28	Gerhardt SO2 ausg.	0,645	-0,0050	-0,13	
29	Halbmikro SO2 unber.	0,685	0,0350	0,89	
30	Wädenswil SO2 korr.	0,650	0,0000	0,00	
31	Gerhardt SO2 korr.	0,560	-0,0900	-2,29	
33	Halbmikro SO2 unber.	0,700	0,0500	1,27	
38	Halbmikro SO2 korr.	0,441	-0,2090	-5,33	(**)
39	Gerhardt SO2 korr.	0,650	0,0000	0,00	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,672	0,0220	0,56	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,638	-0,0120	-0,31	
42	Gerhardt SO2 ausg.	0,710	0,0600	1,53	
47	Halbmikro SO2 ausg.	0,472	-0,1780	-4,54	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,700	0,0500	1,27	
56	Rentschler mod. korr.	0,712	0,0620	1,58	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,561	-0,0890	-2,27	
62	Gerhardt SO2 korr.	0,740	0,0900	2,29	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,775	0,1250	3,19	
65	Wädenswil SO2 korr.	0,520	-0,1300	-3,31	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,840	0,1900	4,84	
67	Wädenswil SO2 korr.	0,550	-0,1000	-2,55	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,660	0,0100	0,25	
81	Halbmikro SO2 korr.	0,630	-0,0200	-0,51	
84	Halbmikro SO2 unber.	0,730	0,0800	2,04	
103	spezial_1	0,700	0,0500	1,27	

rot markierte Methodenkennung vom Auswerter geändert

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

### 4.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,470	-0,1775	-4,54	-1,99	
202	FTIR	0,700	0,0525	1,34	0,59	
203	FTIR	0,641	-0,0065	-0,17	-0,07	
204	FTIR	0,710	0,0625	1,60	0,70	
206	FTIR	0,610	-0,0375	-0,96	-0,42	
208	FTIR	0,565	-0,0825	-2,11	-0,93	
209	FTIR	0,360	-0,2875	-7,35	-3,23	
210	FTIR	0,603	-0,0445	-1,14	-0,50	
212	FTIR	0,610	-0,0375	-0,96	-0,42	
214	FTIR	0,590	-0,0575	-1,47	-0,65	
216	FTIR	0,620	-0,0275	-0,70	-0,31	
217	FTIR	0,250	-0,3975	-10,17	-4,46	
218	FTIR	0,210	-0,4375	-11,19	-4,91	
219	FTIR	0,400	-0,2475	-6,33	-2,78	
220	FTIR	0,390	-0,2575	-6,58	-2,89	
221	FTIR	0,620	-0,0275	-0,70	-0,31	
222	FTIR	0,400	-0,2475	-6,33	-2,78	
223	FTIR	0,750	0,1025	2,62	1,15	
225	FTIR	0,460	-0,1875	-4,79	-2,10	
226	FTIR	0,510	-0,1375	-3,52	-1,54	



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	0,606	-0,0415	-1,06	-0,47	
228	FTIR	0,560	-0,0875	-2,24	-0,98	
229	FTIR	0,550	-0,0975	-2,49	-1,09	
230	FTIR	0,470	-0,1775	-4,54	-1,99	
231	FTIR	0,692	0,0445	1,14	0,50	
233	FTIR	0,750	0,1025	2,62	1,15	
235	FTIR	0,360	-0,2875	-7,35	-3,23	
236	FTIR	0,560	-0,0875	-2,24	-0,98	
237	FTIR	0,570	-0,0775	-1,98	-0,87	
238	FTIR	0,530	-0,1175	-3,00	-1,32	
241	FTIR	0,510	-0,1375	-3,52	-1,54	
242	FTIR	0,680	0,0325	0,83	0,36	
243	FTIR	0,710	0,0625	1,60	0,70	
244	FTIR	0,530	-0,1175	-3,00	-1,32	
245	FTIR	0,530	-0,1175	-3,00	-1,32	
246	FTIR	0,770	0,1225	3,13	1,37	
247	FTIR	0,670	0,0225	0,58	0,25	
249	FTIR	0,490	-0,1575	-4,03	-1,77	
250	FTIR	0,220	-0,4275	-10,93	-4,80	
251	FTIR	0,690	0,0425	1,09	0,48	
254	FTIR	0,470	-0,1775	-4,54	-1,99	
255	FTIR	0,490	-0,1575	-4,03	-1,77	
256	FTIR	0,580	-0,0675	-1,73	-0,76	
257	FTIR	0,480	-0,1675	-4,28	-1,88	
258	FTIR	0,310	-0,3375	-8,63	-3,79	
260	FTIR	0,500	-0,1475	-3,77	-1,66	
261	FTIR	0,310	-0,3375	-8,63	-3,79	
262	FTIR	0,680	0,0325	0,83	0,36	
263	FTIR	0,600	-0,0475	-1,21	-0,53	
264	FTIR	0,680	0,0325	0,83	0,36	
265	FTIR	0,470	-0,1775	-4,54	-1,99	
266	FTIR	0,570	-0,0775	-1,98	-0,87	
267	FTIR	0,620	-0,0275	-0,70	-0,31	
268	FTIR	0,580	-0,0675	-1,73	-0,76	
269	FTIR	0,290	-0,3575	-9,14	-4,01	
270	FTIR	0,470	-0,1775	-4,54	-1,99	
271	FTIR	0,420	-0,2275	-5,82	-2,55	
273	FTIR	0,500	-0,1475	-3,77	-1,66	
274	FTIR	0,620	-0,0275	-0,70	-0,31	
275	FTIR	0,330	-0,3175	-8,12	-3,56	
276	FTIR	0,600	-0,0475	-1,21	-0,53	
277	FTIR	0,620	-0,0275	-0,70	-0,31	
278	FTIR	0,550	-0,0975	-2,49	-1,09	
280	FTIR	0,490	-0,1575	-4,03	-1,77	
281	FTIR	0,540	-0,1075	-2,75	-1,21	
282	FTIR	0,578	-0,0695	-1,78	-0,78	
284	FTIR	0,740	0,0925	2,37	1,04	
322	FTIR	0,640	-0,0075	-0,19	-0,08	
338	FTIR	0,610	-0,0375	-0,96	-0,42	
349	FTIR	0,670	0,0225	0,58	0,25	
363	FTIR	0,580	-0,0675	-1,73	-0,76	

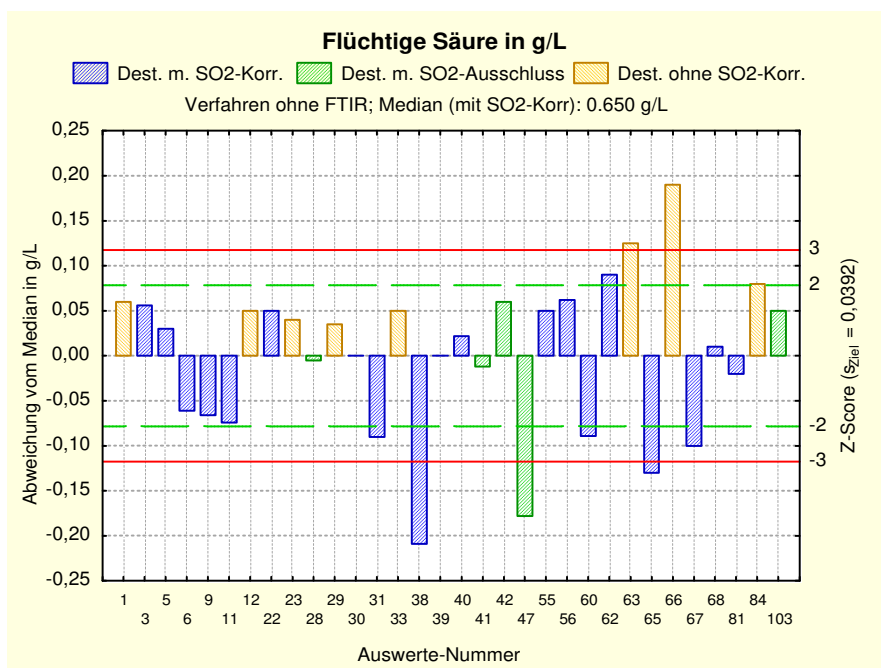
**4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren**

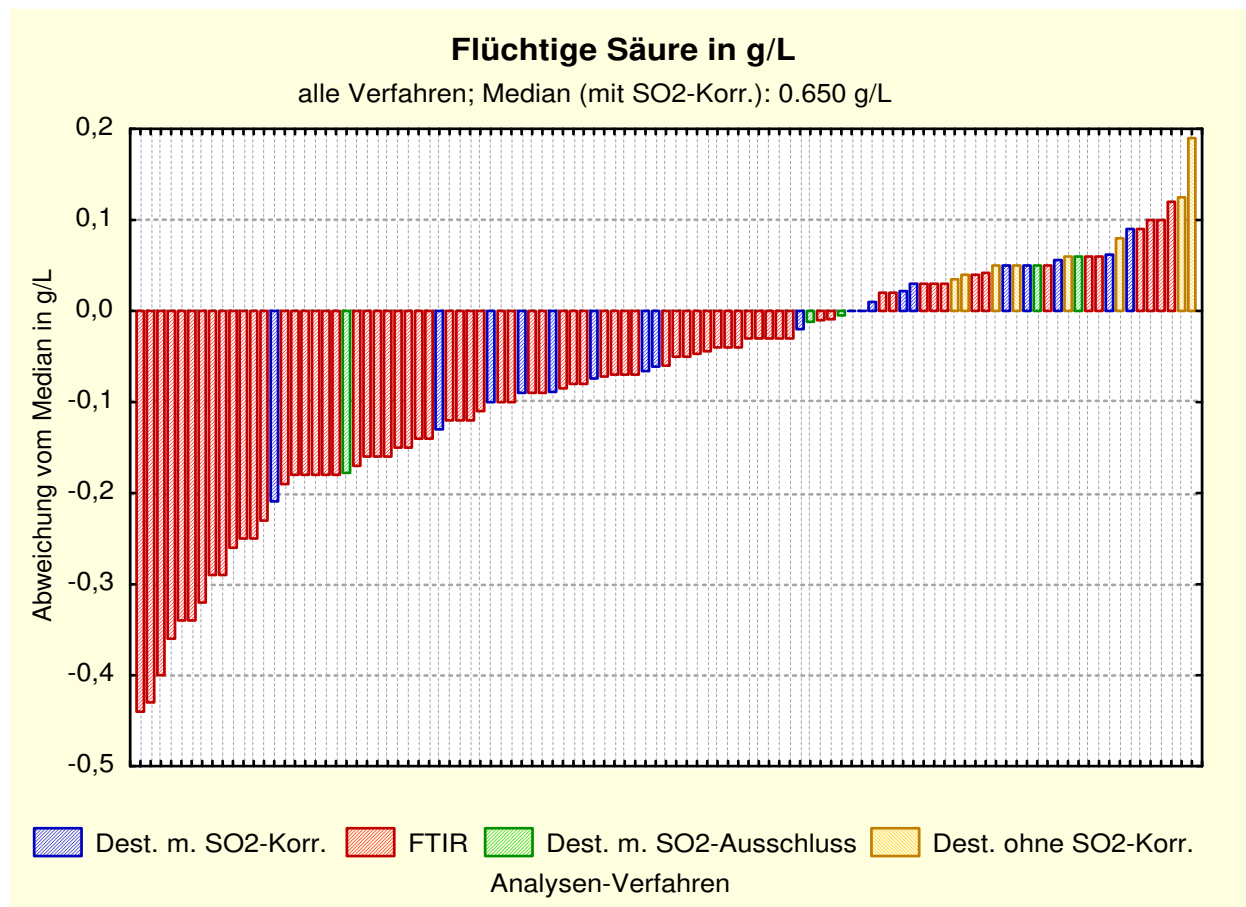
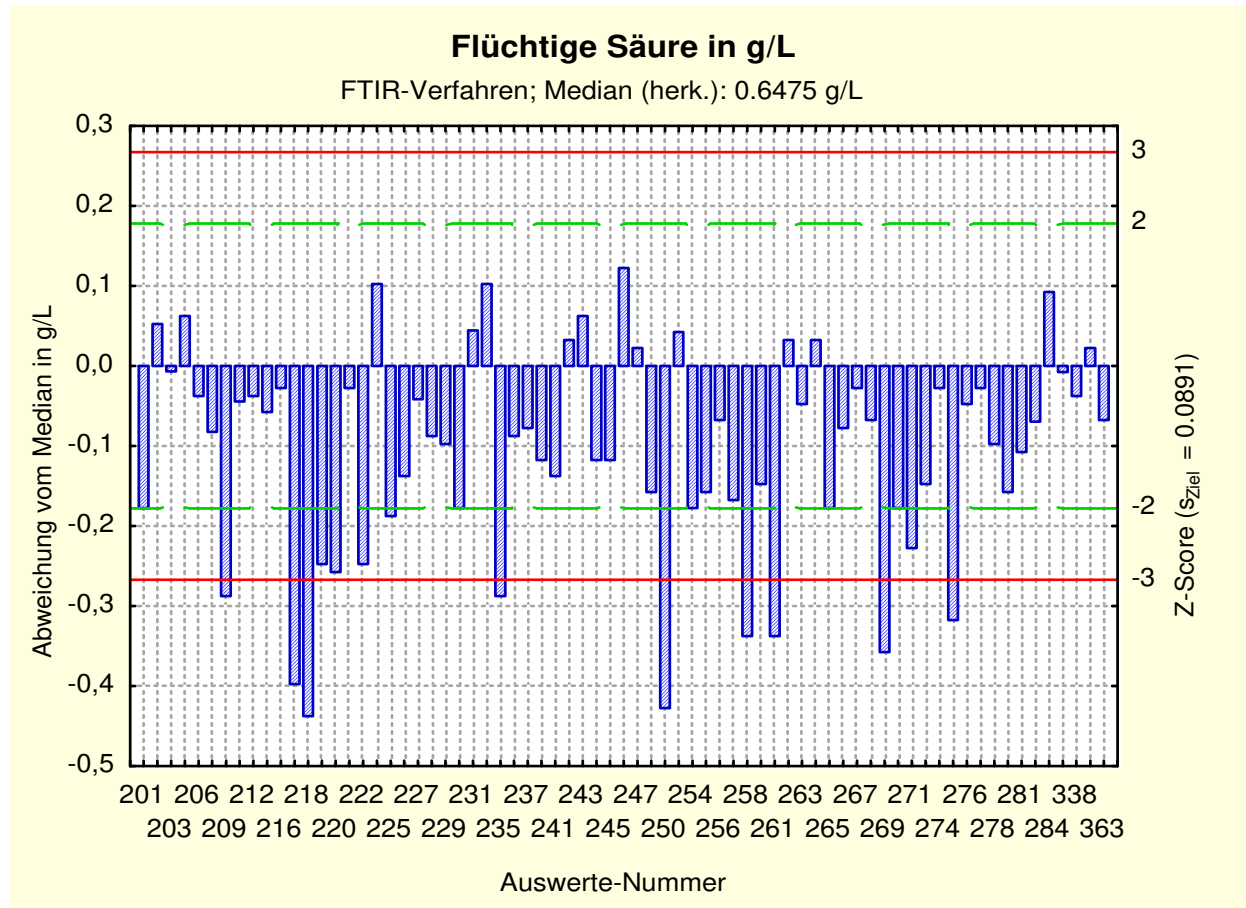
Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	23
Minimalwert	0,441	0,472
Mittelwert	0,6269	0,6350
Median	0,6475	0,6500
Maximalwert	0,740	0,740
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,080	0,071
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,016	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,039	0,039
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>*)</sup>	(0,029)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,05	1,81
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>*)</sup>	(2,76)	(2,45)
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,90	0,75
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,42	0,38
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> ) <sup>*)</sup>	(0,55)	(0,52)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,18	0,19

\*) Die Bewertung der Laboregebnisse erfolgte mit der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung.

**4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV	8	0,721	0,0418
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt			
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,472	
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,535	0,1516
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	4	0,569	0,0598
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen, z.B. mit H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3	0,662	0,0404
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	8	0,659	0,0672
OIV SO <sub>2</sub> -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	3	0,661	0,0649
OIV sonst. mod. SO <sub>2</sub> korr.	- sonstig modifiziert mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,584	
Rentschler mod korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,712	
spezial_1	Verfahrensbeschreibung siehe Teil 1	1	0,700	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	24	0,631	0,0801
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	0,550	0,1275





## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse , Teil 1

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,570	-0,060	-1,57	
03	HPLC	0,559	-0,071	-1,86	
06	enzymat. autom.	0,600	-0,030	-0,79	
07	enzymat. autom.	0,560	-0,070	-1,83	
12	enzymat. autom.	0,570	-0,060	-1,57	
14	enzymat. autom.	0,610	-0,020	-0,52	
16	enzymat. autom.	0,670	0,040	1,05	
17	enzymat. autom.	0,630	0,000	0,00	
20	enzymat. autom.	0,540	-0,090	-2,36	
24	NMR	0,540	-0,090	-2,36	
27	enzymat. autom.	0,630	0,000	0,00	
31	enzymat. autom.	0,690	0,060	1,57	
39	enzymat. autom.	0,570	-0,060	-1,57	
40	HPLC	0,660	0,030	0,79	
42	enzymat. autom.	0,630	0,000	0,00	
43	enzymat. autom.	0,680	0,050	1,31	
45	enzymat. autom.	0,630	0,000	0,00	
47	enzymat. autom.	0,680	0,050	1,31	
50	enzymat. autom.	0,590	-0,040	-1,05	
53	enzymat. autom.	0,690	0,060	1,57	
56	enzymat. autom.	0,670	0,040	1,05	
59	enzymat. autom.	0,650	0,020	0,52	
61	enzymat. autom.	0,640	0,010	0,26	
62	enzymat. autom.	0,572	-0,058	-1,52	
68	enzymat. autom.	0,620	-0,010	-0,26	
88	HPLC	0,560	-0,070	-1,83	
107	NMR	0,559	-0,071	-1,86	
108	NMR	0,584	-0,046	-1,20	
109	NMR	0,585	-0,045	-1,19	
110	NMR	0,646	0,016	0,41	
210	FTIR	0,580	-0,050	-1,31	
213	FTIR	0,590	-0,040	-1,05	
224	FTIR	0,650	0,020	0,52	
242	FTIR	0,440	-0,190	-4,97	
245	FTIR	0,530	-0,100	-2,62	
259	FTIR	1,250	0,620	16,23	(*)
260	FTIR	0,550	-0,080	-2,09	
274	FTIR	0,620	-0,010	-0,26	
283	FTIR	0,586	-0,044	-1,15	

Der mit (\*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.  
Zeilen in grauer Schrift dienen nur der Information. Gültige Z-Score für diese Laborergebnisse im Abschnitt.4.12.2.

#### 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	0,570	0,000	0,00	
03	HPLC	0,559	-0,011	-0,31	
24	NMR	0,540	-0,030	-0,85	
40	HPLC	0,660	0,090	2,56	
88	HPLC	0,560	-0,010	-0,28	
107	NMR	0,559	-0,011	-0,32	
108	NMR	0,584	0,014	0,41	
109	NMR	0,585	0,015	0,42	
110	NMR	0,646	0,076	2,16	
210	FTIR	0,580	0,010	0,28	
213	FTIR	0,590	0,020	0,57	
224	FTIR	0,650	0,080	2,28	
242	FTIR	0,440	-0,130	-3,70	
245	FTIR	0,530	-0,040	-1,14	
259	FTIR	1,250	0,680	19,38	(*)
260	FTIR	0,550	-0,020	-0,57	
274	FTIR	0,620	0,050	1,42	
283	FTIR	0,586	0,016	0,46	

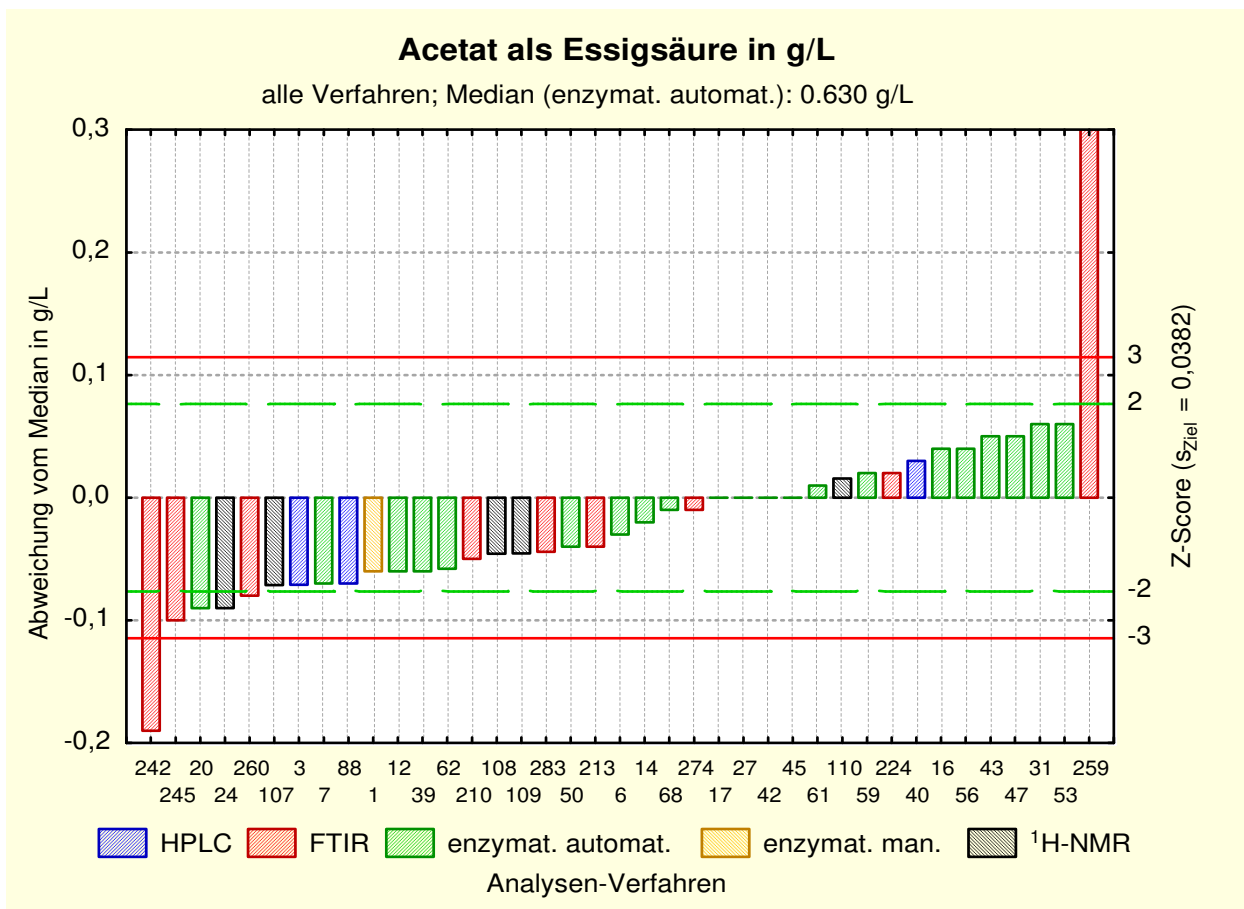
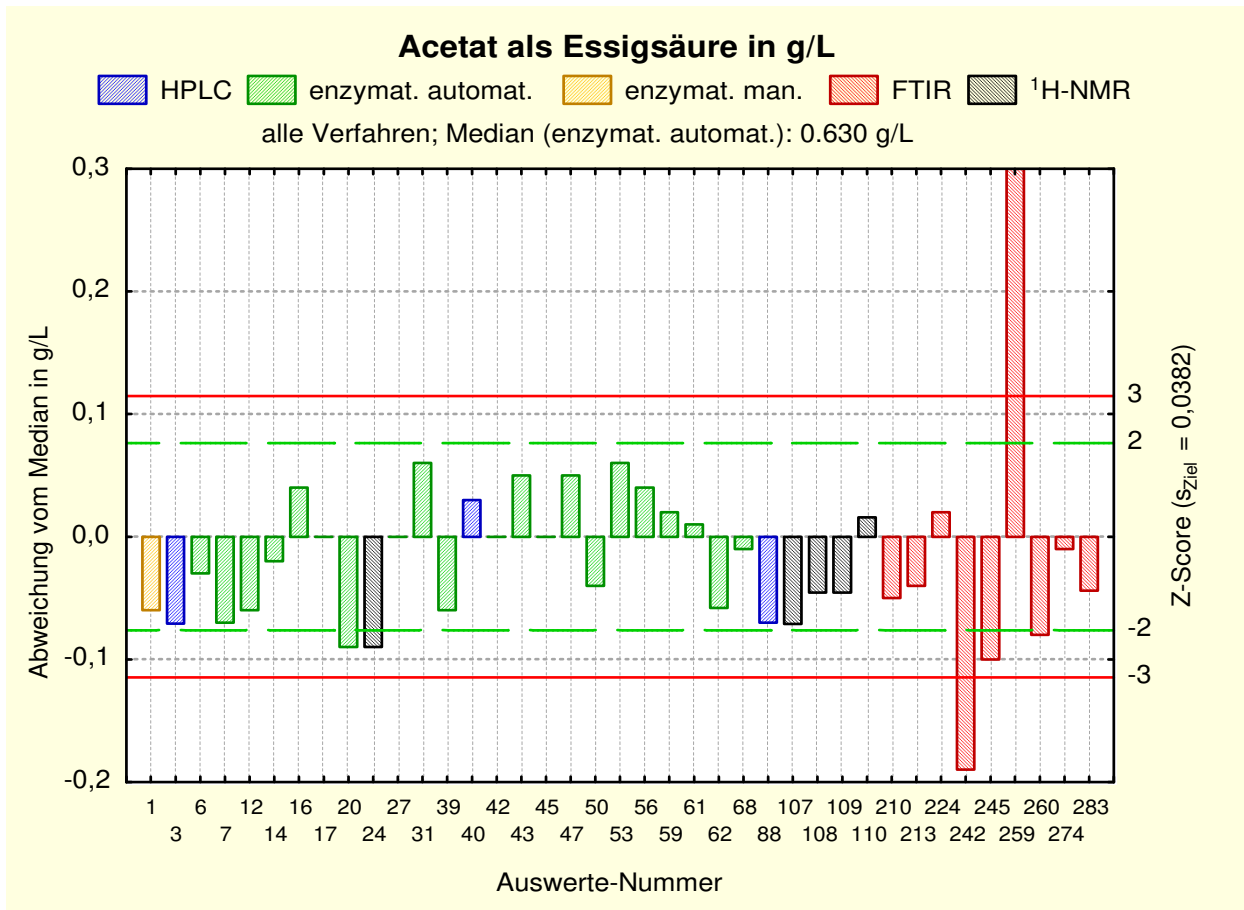
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab.

#### 4.12.3 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
Gültige Werte	21	9
Minimalwert	0,540	0,540
Mittelwert	0,625	0,585
Median	0,630	0,570
Maximalwert	0,690	0,660
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,046	0,041
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,010	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,038	0,035
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )		
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,20	1,17
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> )	0,26	0,39
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-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	21	0,6253	0,0510
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,5859	0,0520
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,5700	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	5	0,5817	0,0432
	HPLC, enzymatisch manuell + <sup>1</sup> H-NMR	9	0,5832	0,0434
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	9	0,5866	0,0751



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

#### 4.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,910	-0,025	-0,47	-0,60	
03	HPLC	0,910	-0,025	-0,47	-0,60	
06	HPLC	0,950	0,015	0,28	0,36	
07	enzymat. autom.	0,930	-0,005	-0,09	-0,12	
09	HPLC	0,920	-0,015	-0,28	-0,36	
23	HPLC	0,870	-0,065	-1,22	-1,56	
24	NMR	0,850	-0,085	-1,59	-2,04	
28	HPLC	0,940	0,005	0,09	0,12	
40	HPLC	1,040	0,105	1,97	2,52	
59	HPLC	0,944	0,009	0,17	0,22	
62	HPLC	1,520	0,585	10,95	14,05	(*)
91	HPLC	0,950	0,015	0,28	0,36	
107	NMR	0,873	-0,062	-1,15	-1,48	
108	NMR	0,927	-0,008	-0,15	-0,19	
109	NMR	0,909	-0,026	-0,49	-0,63	
110	NMR	1,029	0,094	1,76	2,25	

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

#### 4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,885	-0,065	-1,20	-1,55	
04	enz.(L-), autom.	0,905	-0,045	-0,83	-1,07	
05	enz.(L-), autom.	0,910	-0,040	-0,74	-0,95	
06	enz.(L-), autom.	0,910	-0,040	-0,74	-0,95	
07	enz.(L-), autom.	0,930	-0,020	-0,37	-0,48	
08	enz.(L-), autom.	0,981	0,031	0,57	0,74	
09	enz.(L-) Hand	0,950	0,000	0,00	0,00	
11	enz.(L-), autom.	0,816	-0,134	-2,47	-3,19	
12	enz.(L-), autom.	0,970	0,020	0,37	0,48	
14	enz.(L-), autom.	0,930	-0,020	-0,37	-0,48	
16	enz.(L-), autom.	0,990	0,040	0,74	0,95	
17	enz.(L-), autom.	0,600	-0,350	-6,46	-8,33	(**)
20	enz.(L-), autom.	0,900	-0,050	-0,92	-1,19	
27	enz.(L-), autom.	0,870	-0,080	-1,48	-1,90	
31	enz.(L-), autom.	0,968	0,018	0,33	0,43	
39	enz.(L-), autom.	0,960	0,010	0,18	0,24	
41	enz.(L-), autom.	0,900	-0,050	-0,92	-1,19	
42	enz.(L-), autom.	0,980	0,030	0,55	0,71	
43	enz.(L-), autom.	0,960	0,010	0,18	0,24	
45	enz.(L-), autom.	0,880	-0,070	-1,29	-1,67	
47	enz.(L-), autom.	1,050	0,100	1,85	2,38	
50	enz.(L-), autom.	0,980	0,030	0,55	0,71	
55	enz.(L-), autom.	1,100	0,150	2,77	3,57	
56	enz.(L-), autom.	0,870	-0,080	-1,48	-1,90	
59	enz.(L-), autom.	0,950	0,000	0,00	0,00	
61	enz.(L-), autom.	1,120	0,170	3,14	4,04	
62	enz.(L-), autom.	0,914	-0,036	-0,66	-0,86	
63	enz.(L-) Hand	0,973	0,023	0,42	0,55	
68	enz.(L-), autom.	0,970	0,020	0,37	0,48	
81	enz.(L-) Hand	0,632	-0,318	-5,88	-7,57	(**)
89	enz.(L-) Hand	1,000	0,050	0,92	1,19	

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

## 4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,720	-0,220	-4,10	-1,01	
202	FTIR	0,940	0,000	0,00	0,00	
203	FTIR	0,628	-0,312	-5,81	-1,43	
204	FTIR	-0,470	-1,410	-26,27	-6,47	(*)
206	FTIR	0,690	-0,250	-4,66	-1,15	
208	FTIR	0,640	-0,300	-5,59	-1,38	
209	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
210	FTIR	1,340	0,400	7,45	1,83	
212	FTIR	0,620	-0,320	-5,96	-1,47	
213	FTIR	1,360	0,420	7,83	1,93	
214	FTIR	0,610	-0,330	-6,15	-1,51	
216	FTIR	0,500	-0,440	-8,20	-2,02	
217	FTIR	0,750	-0,190	-3,54	-0,87	
218	FTIR	0,430	-0,510	-9,50	-2,34	
219	FTIR	0,670	-0,270	-5,03	-1,24	
220	FTIR	0,610	-0,330	-6,15	-1,51	
221	FTIR	0,500	-0,440	-8,20	-2,02	
222	FTIR	0,570	-0,370	-6,89	-1,70	
223	FTIR	1,080	0,140	2,61	0,64	
224	FTIR	0,960	0,020	0,37	0,09	
225	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
226	FTIR	0,610	-0,330	-6,15	-1,51	
227	FTIR	-0,070	-1,010	-18,82	-4,63	
228	FTIR	0,900	-0,040	-0,75	-0,18	
229	FTIR	0,500	-0,440	-8,20	-2,02	
230	FTIR	0,000	-0,940	-17,51	-4,31	
231	FTIR	0,640	-0,300	-5,59	-1,38	
233	FTIR	0,680	-0,260	-4,84	-1,19	
235	FTIR	0,710	-0,230	-4,29	-1,06	
237	FTIR	0,700	-0,240	-4,47	-1,10	
238	FTIR	0,630	-0,310	-5,78	-1,42	
241	FTIR	0,810	-0,130	-2,42	-0,60	
242	FTIR	1,000	0,060	1,12	0,28	
243	FTIR	0,210	-0,730	-13,60	-3,35	
244	FTIR	1,700	0,760	14,16	3,49	
245	FTIR	0,580	-0,360	-6,71	-1,65	
246	FTIR	0,880	-0,060	-1,12	-0,28	
247	FTIR	2,260	1,320	24,59	6,06	(*)
249	FTIR	0,800	-0,140	-2,61	-0,64	
250	FTIR	1,550	0,610	11,37	2,80	
254	FTIR	0,700	-0,240	-4,47	-1,10	
255	FTIR	0,500	-0,440	-8,20	-2,02	
256	FTIR	0,250	-0,690	-12,86	-3,17	
257	FTIR	1,030	0,090	1,68	0,41	
258	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
259	FTIR	1,600	0,660	12,30	3,03	
260	FTIR	1,500	0,560	10,43	2,57	
261	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
263	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
264	FTIR	1,730	0,790	14,72	3,62	
265	FTIR	0,540	-0,400	-7,45	-1,83	
266	FTIR	0,940	0,000	0,00	0,00	
267	FTIR	0,750	-0,190	-3,54	-0,87	
268	FTIR	0,740	-0,200	-3,73	-0,92	
269	FTIR	0,700	-0,240	-4,47	-1,10	
270	FTIR	1,320	0,380	7,08	1,74	
271	FTIR	0,560	-0,380	-7,08	-1,74	
273	FTIR	0,330	-0,610	-11,37	-2,80	
274	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
275	FTIR	0,400	-0,540	-10,06	-2,48	
276	FTIR	-0,010	-0,950	-17,70	-4,36	
277	FTIR	0,170	-0,770	-14,35	-3,53	
278	FTIR	1,200	0,260	4,84	1,19	
280	FTIR	0,800	-0,140	-2,61	-0,64	
281	FTIR	0,000	-0,940	-17,51	-4,31	

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



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

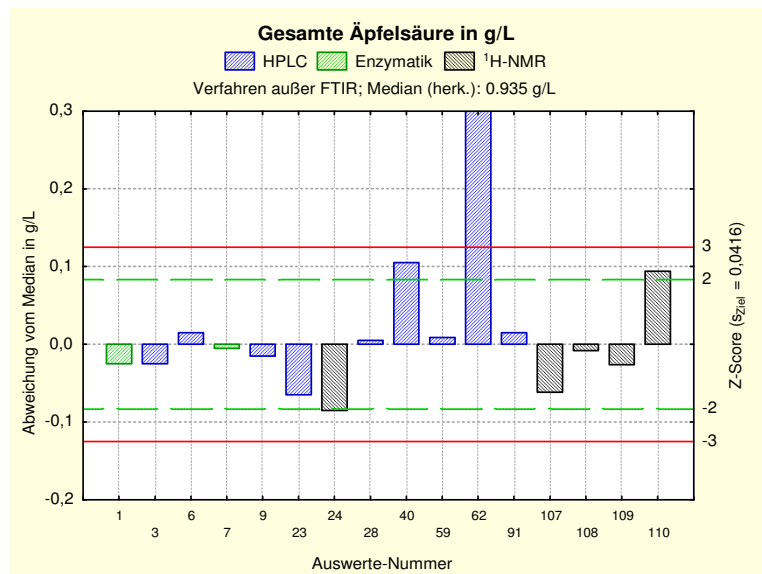
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
282	FTIR	0,700	-0,240	-4,47	-1,10	
283	FTIR	1,040	0,100	1,86	0,46	
322	FTIR	0,770	-0,170	-3,17	-0,78	
338	FTIR	0,600	-0,340	-6,33	-1,56	
349	FTIR	1,100	0,160	2,98	0,73	
363	FTIR	0,500	-0,440	-8,20	-2,02	

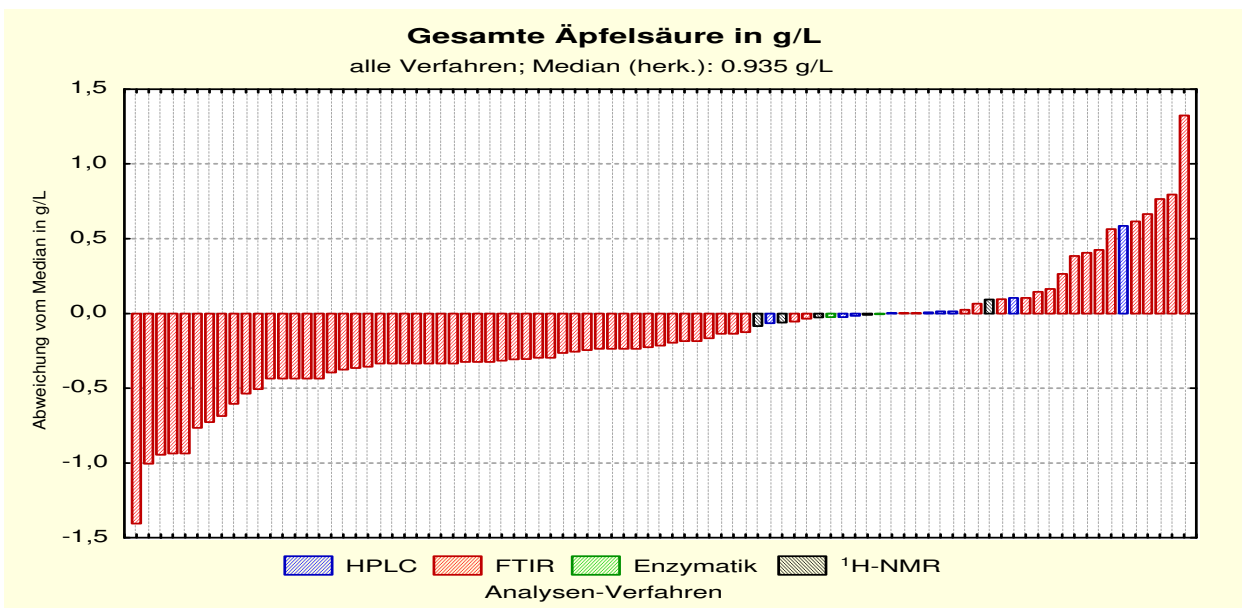
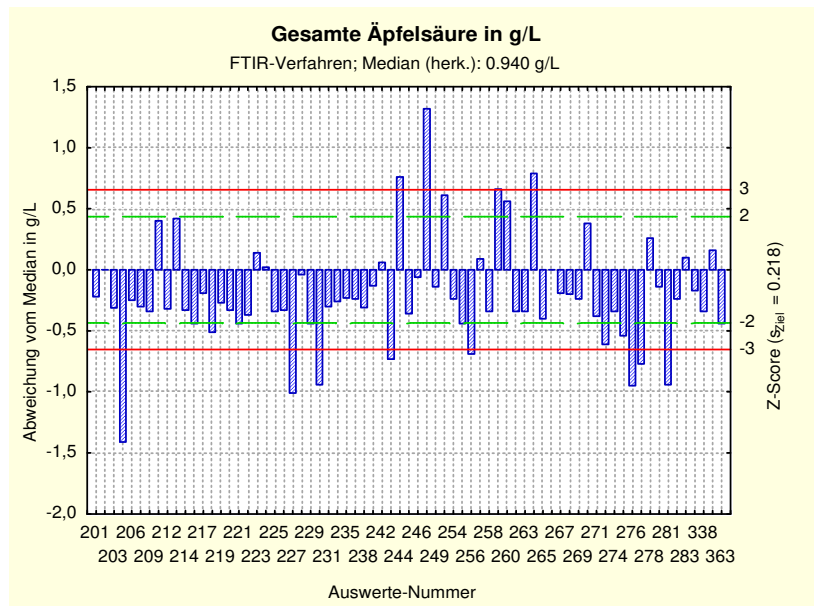
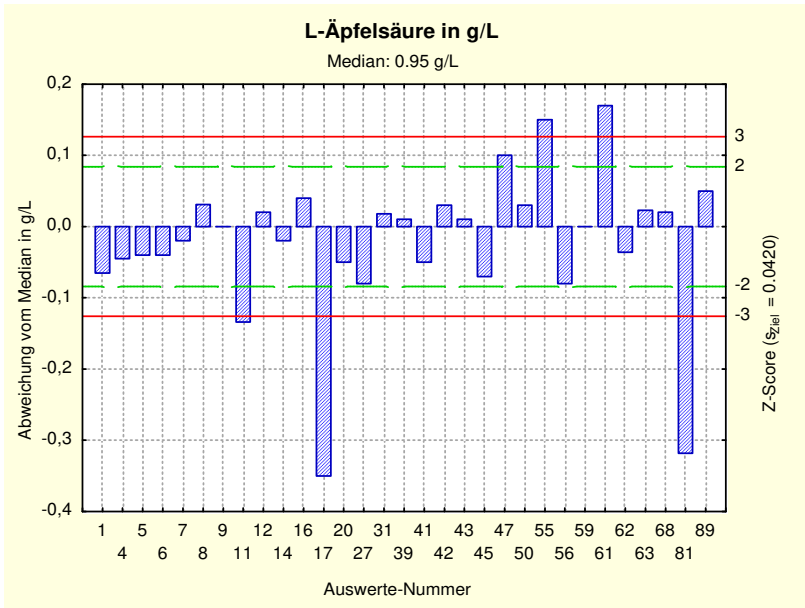
**4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten		alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	10		31	29
Minimalwert	0,87		0,60	0,82
Mittelwert	0,936		0,928	0,949
Median	0,935		0,950	0,950
Maximalwert	1,04		1,12	1,12
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,044		0,105	0,066
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,014		0,019	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,053		0,054	0,054
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,042		0,042	0,042
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,82		1,94	1,22
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,05		2,50	1,57
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,83			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,26		0,35	0,23
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,33		0,45	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,25			

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	0,951	0,063
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	0,930	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	0,910	
	herkömml. Verfahren Gesamte Äpfelsäure	11	0,941	0,048
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	0,709	0,330
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	0,917	0,077
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	26	0,939	0,062
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,894	0,154
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	31	0,937	0,063





## 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	2,54	0,062	0,51	
03	HPLC	2,36	-0,117	-0,96	
05	enzymat. autom.	2,32	-0,158	-1,29	
06	enzymat. autom.	2,49	0,008	0,07	
07	HPLC	2,39	-0,086	-0,70	
08	enzymat. autom.	2,61	0,127	1,04	
09	enzymat. Hand	2,51	0,035	0,29	
11	enzymat. autom.	2,88	0,402	3,29	
20	enzymat. autom.	2,47	-0,008	-0,07	
23	HPLC	1,93	-0,548	-4,48	
24	NMR	2,27	-0,208	-1,70	
28	HPLC	1,92	-0,558	-4,56	
40	HPLC	2,24	-0,238	-1,95	
59	enzymat. autom.	2,61	0,135	1,10	
62	enzymat. autom.	2,50	0,022	0,18	
63	enzymat. Hand	2,61	0,136	1,11	
68	enzymat. autom.	2,34	-0,138	-1,13	
81	enzymat. Hand	2,27	-0,207	-1,70	
91	HPLC	2,61	0,132	1,08	
107	NMR	2,14	-0,342	-2,80	
108	NMR	2,16	-0,317	-2,59	
109	NMR	2,25	-0,232	-1,89	
110	NMR	2,47	-0,008	-0,06	

### 4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,09	0,099	0,97	0,93	
04	enz.(L-) autom.	2,04	0,054	0,53	0,51	
05	enz.(L-) autom.	1,87	-0,121	-1,19	-1,14	
06	enz.(L-) autom.	1,98	-0,009	-0,09	-0,08	
08	enz.(L-) autom.	2,07	0,081	0,80	0,76	
09	enz.(L-) Hand	1,97	-0,020	-0,20	-0,19	
11	enz.(L-) autom.	2,41	0,419	4,13	3,94	
12	enz.(L-) autom.	2,29	0,299	2,94	2,81	
14	enz.(L-) autom.	2,20	0,205	2,02	1,93	
16	enz.(L-) autom.	1,79	-0,196	-1,93	-1,84	
17	enz.(L-) autom.	1,80	-0,191	-1,88	-1,80	
20	enz.(L-) autom.	2,00	0,009	0,09	0,08	
27	enz.(L-) autom.	1,98	-0,016	-0,16	-0,15	
28	enz.(L-) autom.	2,04	0,050	0,49	0,47	
31	enz.(L-) autom.	1,69	-0,302	-2,97	-2,84	
39	enz.(L-) autom.	1,87	-0,121	-1,19	-1,14	
42	enz.(L-) autom.	2,05	0,059	0,58	0,55	
43	enz.(L-) autom.	2,07	0,079	0,78	0,74	
45	enz.(L-) autom.	1,89	-0,106	-1,04	-1,00	
47	enz.(L-) autom.	1,91	-0,081	-0,80	-0,76	
50	enz.(L-) autom.	1,94	-0,051	-0,50	-0,48	
55	enz.(L-) autom.	2,00	0,009	0,09	0,08	
56	enz.(L-) autom.	1,88	-0,111	-1,09	-1,04	
59	enz.(L-) autom.	2,01	0,016	0,16	0,15	
61	enz.(L-) autom.	1,00	-0,991	-9,76	-9,31	(**)
62	enz.(L-) autom.	2,02	0,029	0,29	0,27	
63	enz.(L-) Hand	2,02	0,032	0,32	0,30	
68	enz.(L-) autom.	1,87	-0,121	-1,19	-1,14	
81	enz.(L-) Hand	1,95	-0,042	-0,41	-0,39	

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

**4.14.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,04	0,562	4,60	2,69	
202	FTIR	2,71	0,232	1,90	1,11	
203	FTIR	1,90	-0,576	-4,71	-2,76	
204	FTIR	2,48	0,002	0,02	0,01	
206	FTIR	2,89	0,412	3,37	1,97	
208	FTIR	2,45	-0,028	-0,23	-0,13	
209	FTIR	2,50	0,022	0,18	0,11	
210	FTIR	2,30	-0,178	-1,46	-0,85	
212	FTIR	2,63	0,152	1,24	0,73	
213	FTIR	1,81	-0,668	-5,46	-3,20	
214	FTIR	1,74	-0,738	-6,04	-3,53	
216	FTIR	2,90	0,422	3,45	2,02	
217	FTIR	2,30	-0,178	-1,46	-0,85	
218	FTIR	2,25	-0,228	-1,86	-1,09	
219	FTIR	3,03	0,552	4,51	2,64	
220	FTIR	2,85	0,372	3,04	1,78	
221	FTIR	2,20	-0,278	-2,27	-1,33	
222	FTIR	2,95	0,472	3,86	2,26	
223	FTIR	2,43	-0,048	-0,39	-0,23	
224	FTIR	2,20	-0,278	-2,27	-1,33	
225	FTIR	2,60	0,122	1,00	0,58	
226	FTIR	1,56	-0,918	-7,51	-4,39	
227	FTIR	2,37	-0,108	-0,88	-0,52	
228	FTIR	1,70	-0,778	-6,36	-3,72	
229	FTIR	2,53	0,052	0,43	0,25	
230	FTIR	2,90	0,422	3,45	2,02	
231	FTIR	3,03	0,552	4,51	2,64	
233	FTIR	2,70	0,222	1,82	1,06	
235	FTIR	3,21	0,732	5,99	3,50	
237	FTIR	1,50	-0,978	-8,00	-4,68	
238	FTIR	2,21	-0,268	-2,19	-1,28	
241	FTIR	2,64	0,162	1,32	0,78	
242	FTIR	1,90	-0,578	-4,73	-2,77	
243	FTIR	3,01	0,532	4,35	2,55	
245	FTIR	1,65	-0,828	-6,77	-3,96	
246	FTIR	2,32	-0,158	-1,29	-0,76	
247	FTIR	2,86	0,382	3,12	1,83	
249	FTIR	2,70	0,222	1,82	1,06	
250	FTIR	2,48	0,002	0,02	0,01	
254	FTIR	2,70	0,222	1,82	1,06	
255	FTIR	2,60	0,122	1,00	0,58	
256	FTIR	2,28	-0,198	-1,62	-0,95	
257	FTIR	2,79	0,312	2,55	1,49	
258	FTIR	2,10	-0,378	-3,09	-1,81	
259	FTIR	2,61	0,132	1,08	0,63	
260	FTIR	1,40	-1,078	-8,82	-5,16	(**)
261	FTIR	2,60	0,122	1,00	0,58	
263	FTIR	2,60	0,122	1,00	0,58	
264	FTIR	2,06	-0,418	-3,42	-2,00	
265	FTIR	2,52	0,042	0,34	0,20	
266	FTIR	1,90	-0,578	-4,73	-2,77	
267	FTIR	2,43	-0,048	-0,39	-0,23	
268	FTIR	2,09	-0,388	-3,17	-1,86	
269	FTIR	2,30	-0,178	-1,46	-0,85	
270	FTIR	2,00	-0,478	-3,91	-2,29	
271	FTIR	2,71	0,232	1,90	1,11	
273	FTIR	2,12	-0,358	-2,93	-1,71	
274	FTIR	2,50	0,022	0,18	0,11	
275	FTIR	2,55	0,072	0,59	0,34	
276	FTIR	2,77	0,292	2,39	1,40	
277	FTIR	2,89	0,412	3,37	1,97	
280	FTIR	2,02	-0,458	-3,75	-2,19	
281	FTIR	2,26	-0,218	-1,78	-1,04	
282	FTIR	2,07	-0,408	-3,34	-1,95	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

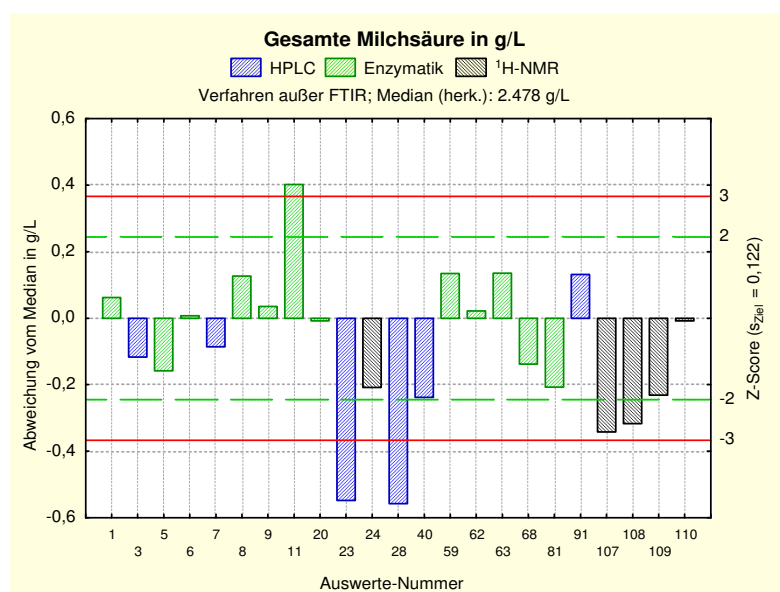
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
283	FTIR	1,86	-0,617	-5,05	-2,95	
322	FTIR	2,40	-0,078	-0,64	-0,37	
338	FTIR	1,55	-0,928	-7,59	-4,44	
349	FTIR	2,10	-0,378	-3,09	-1,81	
363	FTIR	1,80	-0,678	-5,54	-3,24	

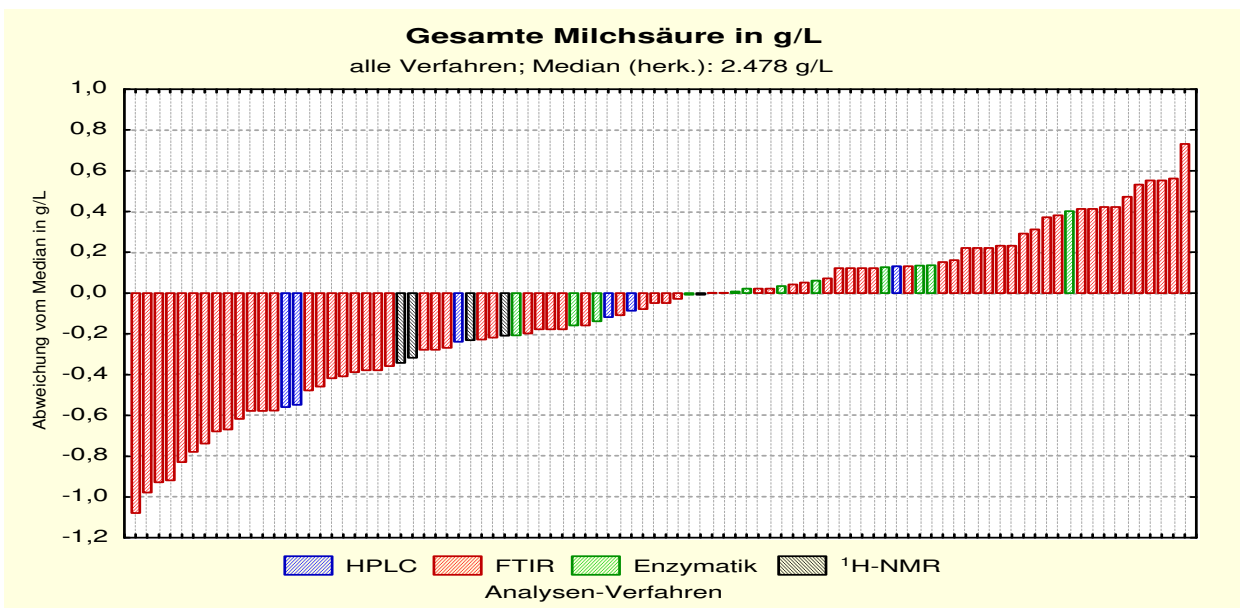
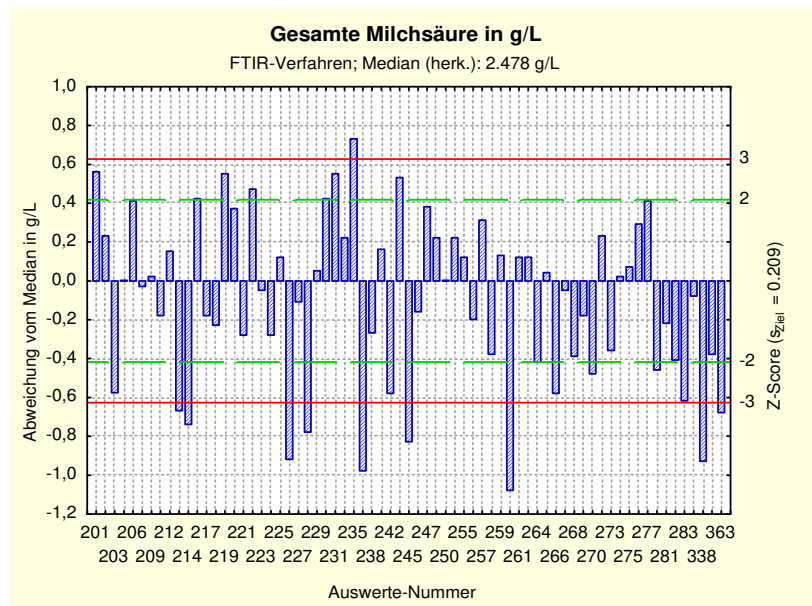
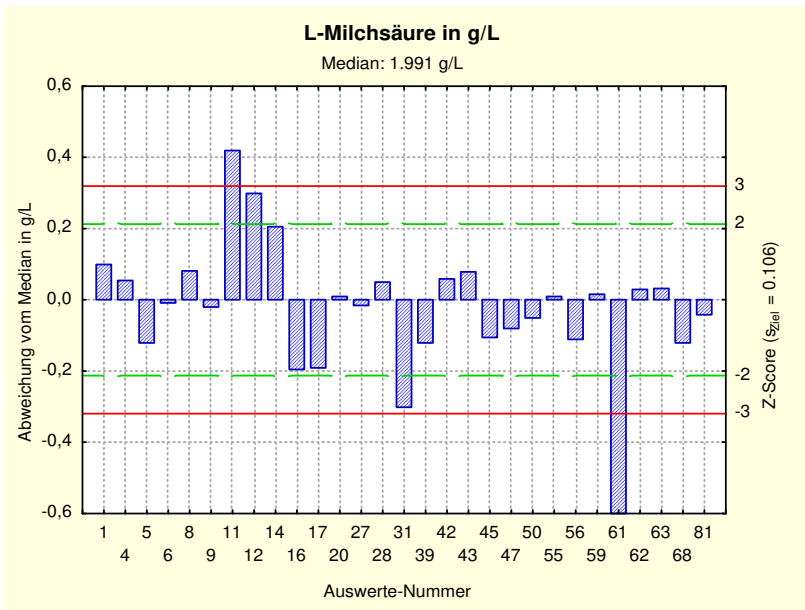
**4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	29	28	
Minimalwert	1,92	1,00	1,69	
Mittelwert	2,422	1,955	1,989	
Median	2,478	1,982	1,991	
Maximalwert	2,88	2,41	2,41	
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,237	0,234	0,147	
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,056	0,043	0,028	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,122	0,101	0,102	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )		0,106	0,106	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,209			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,94	2,31	1,45	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )		2,21	1,38	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,14			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,46	0,43	0,27	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		0,41	0,26	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,27			

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	2,242	0,310
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	8	2,512	0,166
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	2,485	0,167
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	18	2,439	0,193
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	2,387	0,458
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,256	0,147
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	25	1,965	0,142
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	2,006	0,066
	alle Verfahren L-Milchsäure	29	1,971	0,127





## 4.15 Reduktone [mg/L]

### 4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	11,0	-7,50	-3,93	
06	Acetaldehyd/potent.	5,0	-13,50	-7,08	(*)
16	Glyoxal/potentiometr.	19,0	0,50	0,26	
17	Glyoxal/Stärke	24,0	5,50	2,88	
19	Glyoxal/Stärke	22,0	3,50	1,83	
20	Glyoxal/potentiometr.	17,2	-1,30	-0,68	
22	Glyoxal/Stärke	20,0	1,50	0,79	
23	Glyoxal/potentiometr.	26,0	7,50	3,93	
24	Glyoxal/Stärke	22,0	3,50	1,83	
25	Glyoxal/Stärke	21,0	2,50	1,31	
27	Glyoxal/potentiometr.	11,6	-6,94	-3,64	
28	Propionaldehyd/Stärke	22,0	3,50	1,83	
30	Glyoxal/Stärke	27,0	8,50	4,46	
31	Glyoxal/Stärke	14,0	-4,50	-2,36	
33	Propionaldehyd/Stärke	20,0	1,50	0,79	
35	Glyoxal/Stärke	17,0	-1,50	-0,79	
37	Glyoxal/Stärke	20,0	1,50	0,79	
38	Glyoxal/potentiometr.	18,0	-0,50	-0,26	
39	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-11,50	-6,03	(*)
40	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-11,50	-6,03	(*)
41	Glyoxal/Stärke	12,5	-6,00	-3,14	
42	Glyoxal/Stärke	19,0	0,50	0,26	
43	Glyoxal/Stärke	25,0	6,50	3,41	
50	Glyoxal/Stärke	16,0	-2,50	-1,31	
51	Glyoxal/Stärke	14,0	-4,50	-2,36	
56	Glyoxal/MTT	8,0	-10,50	-5,50	(*)
59	Acetaldehyd/potent.	16,4	-2,10	-1,10	
60	Glyoxal/potentiometr.	15,0	-3,50	-1,83	
61	photometr.	15,0	-3,50	-1,83	
63	Glyoxal/Stärke	17,0	-1,50	-0,79	
64	Glyoxal/Stärke	16,0	-2,50	-1,31	
65	Glyoxal/potentiometr.	21,0	2,50	1,31	
66	Glyoxal/Stärke	18,0	-0,50	-0,26	
67	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-9,50	-4,98	
68	Glyoxal/potentiometr.	20,4	1,92	1,01	
70	Glyoxal/Stärke	26,0	7,50	3,93	
75	Glyoxal/Stärke	25,0	6,50	3,41	
76	Glyoxal/potentiometr.	16,0	-2,50	-1,31	
78	Glyoxal/potentiometr.	23,0	4,50	2,36	
81	Acetaldehyd/Stärke	32,0	13,50	7,08	(*)
92	Glyoxal/Stärke	18,0	-0,50	-0,26	

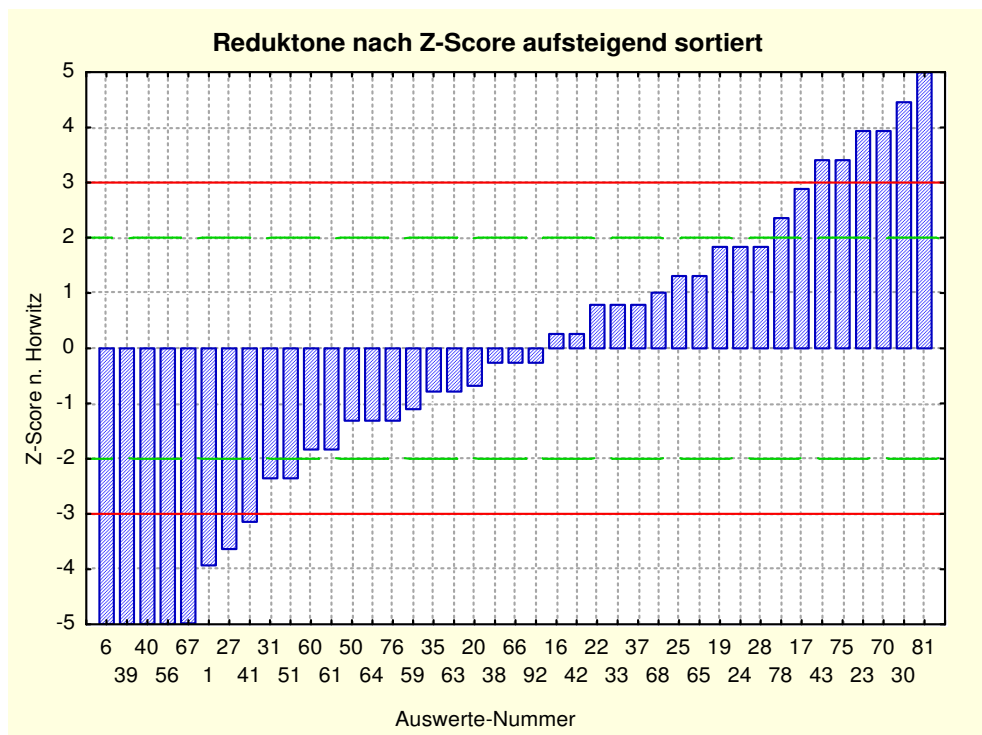
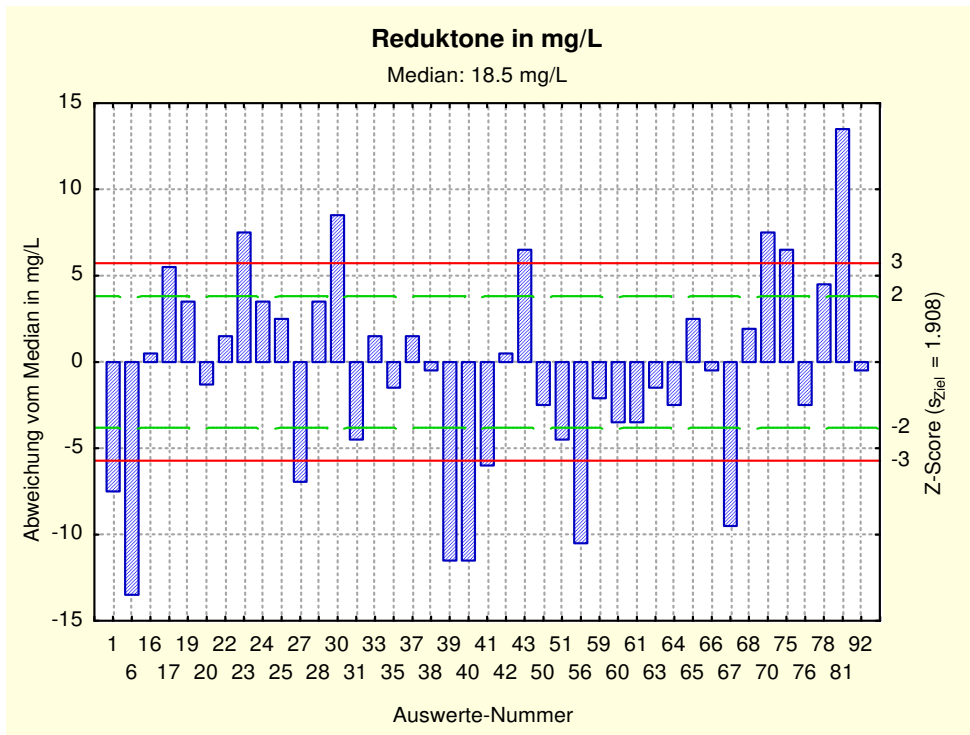
(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median und bleiben unberücksichtigt.

### 4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	9,0
Mittelwert	18,72
Median	18,50
Maximalwert	27,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	4,485
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,747
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,908
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,35
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,39
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	

**4.15.3 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	32,00	
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	10,70	9,14
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	2	21,00	1,60
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	21	19,27	5,07
Glyoxal/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	13	16,44	6,38
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	8,00	
photometr.	Photometrie mit MTT (Angabe zur SO <sub>2</sub> -Bindung fehlt)	1	15,00	
	alle Verfahren	41	17,97	6,03





## 4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

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

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
03	LwK 6.2	55,0	3,80	0,84	
05	LwK 6.2	58,1	6,91	1,53	
06	LwK 6.2	44,0	-7,20	-1,59	
07	LwK 6.2	50,9	-0,30	-0,07	
11	LwK 6.2	51,5	0,30	0,07	
12	LwK 6.3	34,0	-17,20	-3,80	
14	LwK 6.3	36,0	-15,20	-3,36	
29	LwK 6.2	53,3	2,08	0,46	
40	LwK 6.2	55,0	3,80	0,84	
42	LwK 6.3	44,0	-7,20	-1,59	
47	LwK 6.3	58,0	6,80	1,50	
53	LwK 6.3	46,0	-5,20	-1,15	
55	LwK 6.4	40,0	-11,20	-2,47	
56	LwK 6.4	48,1	-3,10	-0,68	
61	LwK 6.3	40,0	-11,20	-2,47	
62	IFU 7 gek.	54,0	2,85	0,63	
91	LwK 6.2	55,6	4,40	0,97	
103	LwK 6.2	51,7	0,50	0,11	
203	LwK 6.5	55,0	3,76	0,83	
206	LwK 6.5	38,0	-13,20	-2,91	
207	LwK 6.5	46,0	-5,19	-1,15	
208	LwK 6.5	40,1	-11,10	-2,45	
210	LwK 6.5	48,9	-2,30	-0,51	
212	LwK 6.5	42,0	-9,20	-2,03	
214	LwK 6.5	37,0	-14,20	-3,13	
220	LwK 6.5	43,0	-8,20	-1,81	
226	LwK 6.5	52,0	0,80	0,18	
238	LwK 6.5	41,0	-10,20	-2,25	
245	LwK 6.5	39,0	-12,20	-2,69	
251	LwK 6.5	46,0	-5,20	-1,15	
258	LwK 6.5	55,0	3,80	0,84	
262	LwK 6.5	46,0	-5,20	-1,15	
264	LwK 6.5	59,0	7,80	1,72	
280	LwK 6.5	48,0	-3,20	-0,71	
284	LwK 6.5	41,0	-10,20	-2,25	
338	LwK 6.5	43,0	-8,20	-1,81	
349	LwK 6.5	48,0	-3,20	-0,71	
363	LwK 6.5	46,0	-5,20	-1,15	

### 4.16.2 Laborergebnisse jodometrisch mitgeteilt einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	0,50	0,10	
17	LwK 6.1 (incl.Red.)	54,0	-3,50	-0,70	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,0	-2,50	-0,50	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	4,50	0,90	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	0,50	0,10	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	4,50	0,90	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	0,50	0,10	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,5	-8,02	-1,60	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	-17,50	-3,50	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,0	-2,50	-0,50	
33	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-1,50	-0,30	
35	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	3,50	0,70	
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	54,8	-2,75	-0,55	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,5	1,00	0,20	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	7,50	1,50	

**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrisch mitgeteilt einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
51	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	-6,50	-1,30	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	-1,50	-0,30	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	59,0	1,50	0,30	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	61,5	4,00	0,80	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	4,50	0,90	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	57,0	-0,50	-0,10	
75	LwK 6.1(incl.Red.)	57,0	-0,50	-0,10	
76	LwK 6.1(incl.Red.)	54,0	-3,50	-0,70	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	54,0	-3,50	-0,70	
80	LwK 6.1(incl.Red.)	51,2	-6,30	-1,26	
81	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	4,50	0,90	
84	LwK 6.1(incl.Red.)	59,0	1,50	0,30	
92	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	0,50	0,10	

**4.16.3 Laborergebnisse jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1(excl.Red.)	47,0	9,00	2,56	1,80	
16	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-12,00	-3,41	-2,40	
17	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	-8,00	-2,27	-1,60	
19	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	-5,00	-1,42	-1,00	
22	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	4,00	1,14	0,80	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	-6,00	-1,71	-1,20	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	2,00	0,57	0,40	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	-0,20	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	37,9	-0,08	-0,02	-0,02	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	59,0	21,00	5,97	4,20	
30	LwK 6.1(excl.Red.)	13,0	-25,00	-7,11	-5,00	(*)
31	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	3,00	0,85	0,60	
33	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	-0,40	
35	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	6,00	1,71	1,20	
37	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	2,00	0,57	0,40	
38	LwK 6.1(excl.Red.)	36,8	-1,25	-0,36	-0,25	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	3,00	0,85	0,60	
41	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	8,00	2,27	1,60	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	3,00	0,85	0,60	
50	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	11,00	3,13	2,20	
51	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	-0,20	
59	LwK 6.1(excl.Red.)	23,6	-14,40	-4,09	-2,88	
60	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	6,00	1,71	1,20	
63	LwK 6.1(excl.Red.)	44,5	6,50	1,85	1,30	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	8,00	2,27	1,60	
65	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	-0,40	
66	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	0,00	0,00	0,00	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	53,0	15,00	4,27	3,00	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	35,6	-2,43	-0,69	-0,49	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	0,00	0,00	0,00	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	-6,00	-1,71	-1,20	
76	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	0,00	0,00	0,00	
78	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	-7,00	-1,99	-1,40	
81	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	-8,00	-2,27	-1,60	
92	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	2,00	0,57	0,40	

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

Methodenkodename **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt

Methodenkodename **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet

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

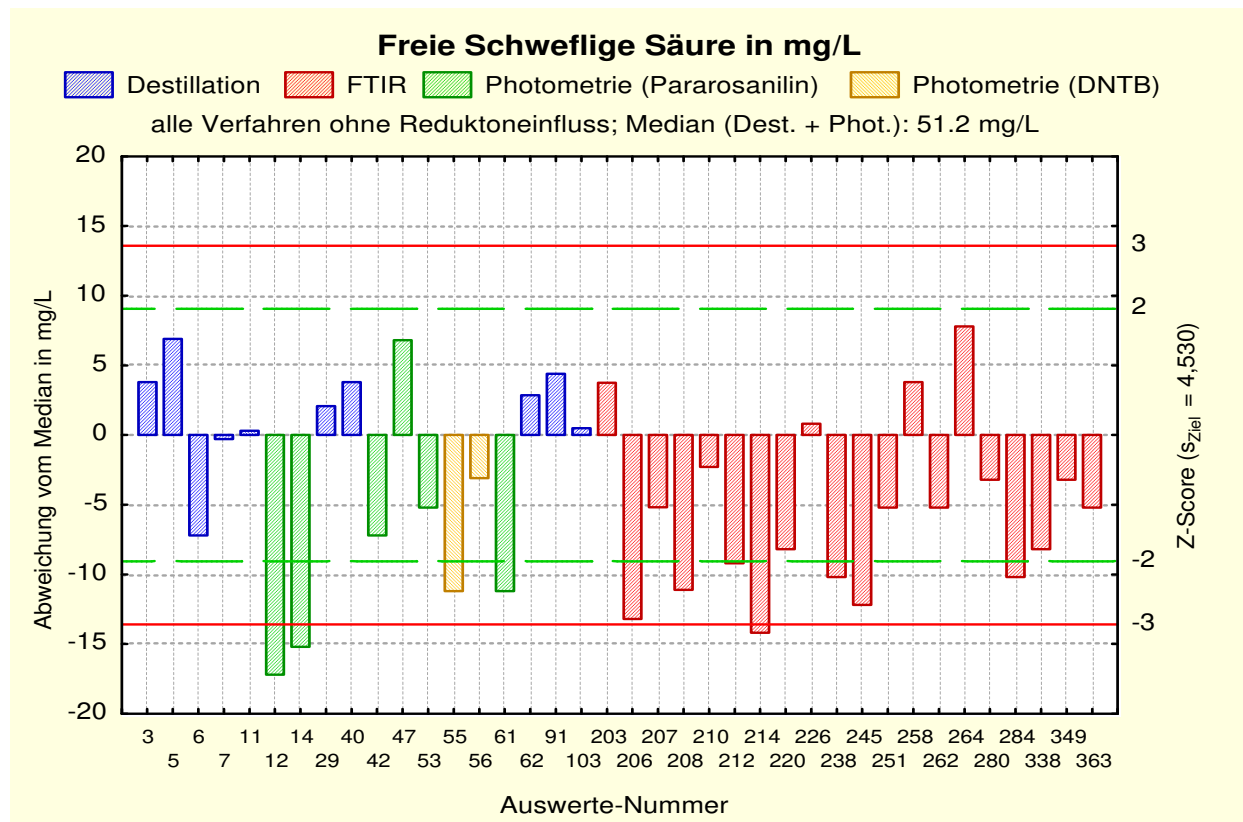
**4.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

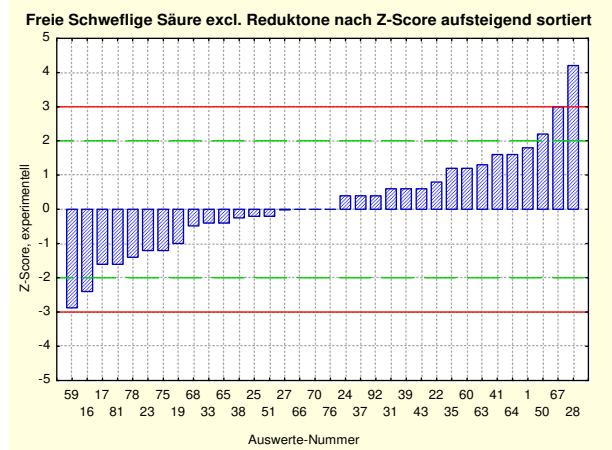
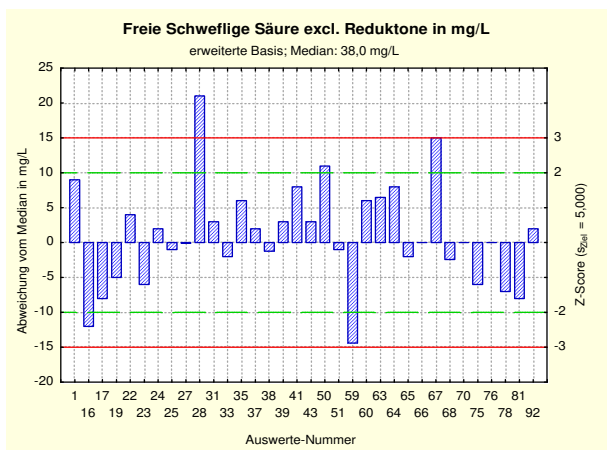
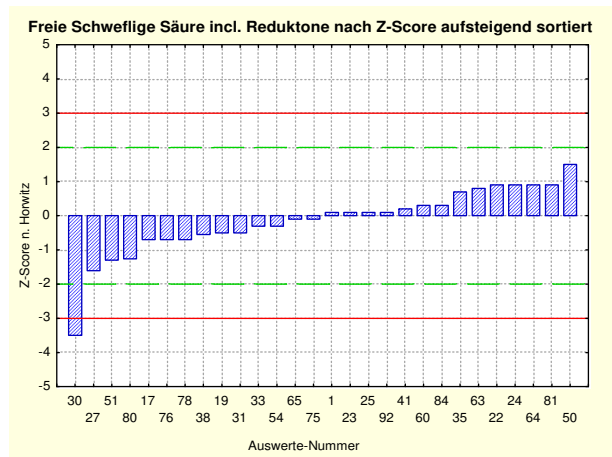
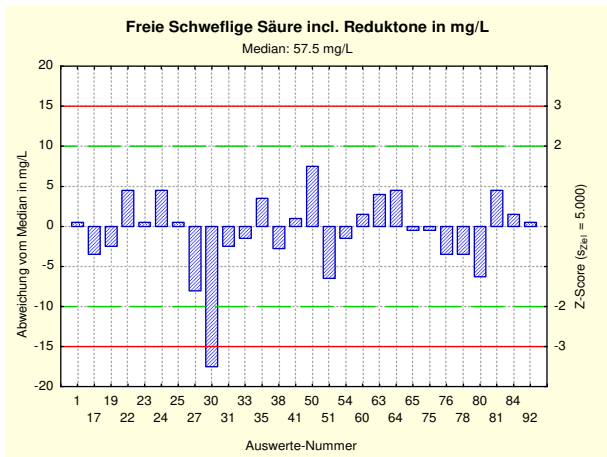
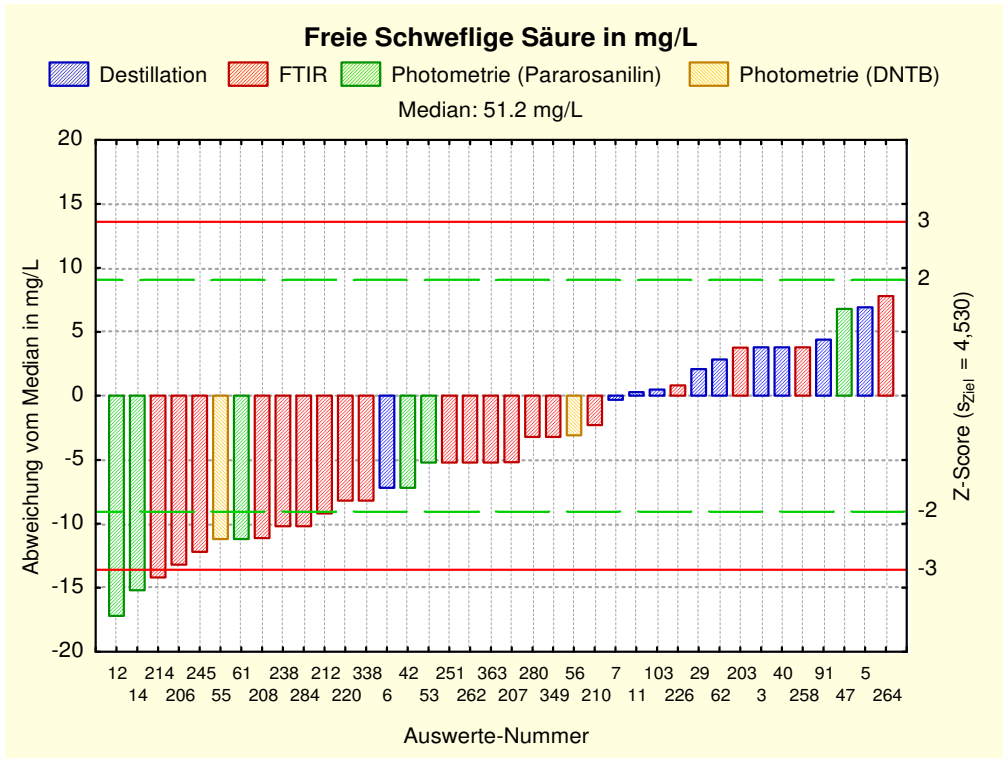
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation	Destillation, Photometrie	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	10	18	28	34
Minimalwert	44,0	34,0	40,0	23,6
Mittelwert	52,91	48,62	56,73	38,98
Median	53,66	51,20	57,50	38,00
Maximalwert	58,1	58,1	65,0	59,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	3,820	7,490	4,980	7,335
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,208	1,765	0,941	1,258
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	4,715	4,530	5,000	3,517
- n. Horwitz incl. Reduktone <sup>*)</sup> (s <sub>H incl. Red.</sub> )				5,000
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,81	1,65	1,00	2,09
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )				1,47
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,26	0,39	0,19	0,36
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )				0,25

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

**4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl.Red.)	- ohne Abzug der Reduktone	28	57,10	4,28
(excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	10	39,32	11,28
Basis erweit.	- mit Abzug der Reduktone einschl. nachberechnete Werte	35	38,43	7,15
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	53,24	3,38
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	6	42,80	9,33
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	2	44,05	6,50
IFU 7 gek.	Verfahren nach IFU Nr. 7 mit Kühlung	1	54,05	
	Destillations- und photometrische Verfahren	18	48,91	7,92
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	20	45,50	6,40
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	38	47,12	7,64





## 4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 4.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	113,0	24,00	3,31	4,48	
03	LwK 7.3	88,3	-0,70	-0,10	-0,13	
05	LwK 7.3	101,1	12,12	1,67	2,26	
06	LwK 7.3	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
07	LwK 7.3	90,4	1,40	0,19	0,26	
11	LwK 7.3	86,7	-2,30	-0,32	-0,43	
12	LwK 7.4.2	87,0	-2,00	-0,28	-0,37	
14	LwK 7.4.2	89,0	0,00	0,00	0,00	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	78,0	-11,00	-1,52	-2,05	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	-9,00	-1,24	-1,68	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,0	2,00	0,28	0,37	
22	LwK 7.4.2	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	19,00	2,62	3,55	
24	LwK 7.4.2m	90,0	1,00	0,14	0,19	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,4	8,40	1,16	1,57	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	8,00	1,10	1,49	
29	LwK 7.3	99,7	10,69	1,48	2,00	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,0	8,00	1,10	1,49	
31	LwK 7.4.1	90,0	1,00	0,14	0,19	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	14,00	1,93	2,61	
35	LwK 7.4.1	87,0	-2,00	-0,28	-0,37	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	11,00	1,52	2,05	
38	LwK 7.4.1	82,2	-6,80	-0,94	-1,27	
39	LwK 7.7	96,0	7,00	0,97	1,31	
40	LwK 7.4.2	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
41	LwK 7.4.1	89,0	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 7.7	100,0	11,00	1,52	2,05	
43	LwK 7.4.2	93,0	4,00	0,55	0,75	
45	LwK 7.4.2	95,0	6,00	0,83	1,12	
47	LwK 7.4.2	100,0	11,00	1,52	2,05	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	-4,00	-0,55	-0,75	
52	LwK 7.4.1	90,0	1,00	0,14	0,19	
53	LwK 7.7	103,0	14,00	1,93	2,61	
54	LwK 7.8	100,0	11,00	1,52	2,05	
55	LwK 7.7	93,0	4,00	0,55	0,75	
56	LwK 7.7	85,9	-3,10	-0,43	-0,58	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,9	5,90	0,81	1,10	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	99,0	10,00	1,38	1,87	
61	LwK 7.6	99,0	10,00	1,38	1,87	
62	IFU 7	86,4	-2,60	-0,36	-0,49	
63	LwK 7.4.2	94,5	5,50	0,76	1,03	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	90,0	1,00	0,14	0,19	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	14,00	1,93	2,61	
66	LwK 7.4.2	93,0	4,00	0,55	0,75	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	8,00	1,10	1,49	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	87,5	-1,47	-0,20	-0,27	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	79,0	-10,00	-1,38	-1,87	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	5,00	0,69	0,93	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	92,0	3,00	0,41	0,56	
80	LwK 7.2	79,0	-10,00	-1,38	-1,87	
81	LwK 7.4.1	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	112,0	23,00	3,17	4,29	
88	LwK 7.4.2	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
91	LwK 7.3	87,6	-1,40	-0,19	-0,26	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	-1,00	-0,14	-0,19	
93	LwK 7.4.2	84,0	-5,00	-0,69	-0,93	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	89,0	0,00	0,00	0,00	
99	LwK 7.4.2	90,0	1,00	0,14	0,19	
101	LwK 7.4.2	105,0	16,00	2,21	2,99	
102	LwK 7.4.1	100,0	11,00	1,52	2,05	

**Fortsetzung Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis sind die Werte aus Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
103	LwK 7.3	86,2	-2,80	-0,39	-0,52	
203	LwK 7.8	82,0	-6,95	-0,96	-1,30	
206	LwK 7.8	93,0	4,00	0,55	0,75	
207	LwK 7.8	87,5	-1,49	-0,21	-0,28	
208	LwK 7.8	84,6	-4,41	-0,61	-0,82	
209	FTIR(direkt)	86,0	-3,00	-0,41	-0,56	
210	LwK 7.8	95,0	6,00	0,83	1,12	
212	LwK 7.8	91,0	2,00	0,28	0,37	
214	LwK 7.8	92,0	3,00	0,41	0,56	
220	LwK 7.8	85,0	-4,00	-0,55	-0,75	
226	LwK 7.8	102,0	13,00	1,79	2,43	
238	LwK 7.8	77,0	-12,00	-1,66	-2,24	
245	LwK 7.8	80,0	-9,00	-1,24	-1,68	
251	LwK 7.8	81,0	-8,00	-1,10	-1,49	
258	LwK 7.8	106,0	17,00	2,35	3,17	
262	LwK 7.8	81,0	-8,00	-1,10	-1,49	
264	LwK 7.8	96,0	7,00	0,97	1,31	
280	LwK 7.8	66,0	-23,00	-3,17	-4,29	
284	LwK 7.8	130,0	41,00	5,66	7,65	(**)
338	LwK 7.8	78,0	-11,00	-1,52	-2,05	
349	LwK 7.8	93,0	4,00	0,55	0,75	
363	LwK 7.8	99,0	10,00	1,38	1,87	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert aus Destillationsverfahren ab.  
Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score<sub>Horwitz</sub> gültig. Die Z-Score<sub>exper.</sub> in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

**4.17.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	-12,00	-1,61	-2,24	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,0	-1,00	-0,13	-0,19	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	16,00	2,15	2,99	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,4	5,40	0,72	1,01	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,0	5,00	0,67	0,93	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	11,00	1,48	2,05	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	-7,00	-0,94	-1,31	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	99,0	7,00	0,94	1,31	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	90,0	-2,00	-0,27	-0,37	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	11,00	1,48	2,05	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	0,00	0,00	0,00	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	2,00	0,27	0,37	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	92,0	0,00	0,00	0,00	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	112,0	20,00	2,68	3,73	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	-4,00	-0,54	-0,75	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	89,0	-3,00	-0,40	-0,56	

**4.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	78,0	-0,50	-0,08	-0,09	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	56,0	-22,50	-3,45	-4,20	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	69,0	-9,50	-1,46	-1,77	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	3,50	0,54	0,65	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	71,0	-7,50	-1,15	-1,40	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	85,8	7,34	1,13	1,37	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	18,50	2,84	3,45	
30	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-8,50	-1,31	-1,59	

**Fortsetzung Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
33	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	4,50	0,69	0,84	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	21,50	3,30	4,01	
51	LwK 7.5.1(excl. Red.)	71,0	-7,50	-1,15	-1,40	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,9	16,40	2,52	3,06	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	84,0	5,50	0,84	1,03	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	74,0	-4,50	-0,69	-0,84	
65	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	3,50	0,54	0,65	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	18,50	2,84	3,45	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	87,5	9,03	1,39	1,69	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	79,0	0,50	0,08	0,09	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	67,0	-11,50	-1,77	-2,15	
76	LwK 7.5.1(excl. Red.)	78,0	-0,50	-0,08	-0,09	
78	LwK 7.5.3(excl. Red.)	69,0	-9,50	-1,46	-1,77	
92	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-8,50	-1,31	-1,59	

Methodenkodename **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt

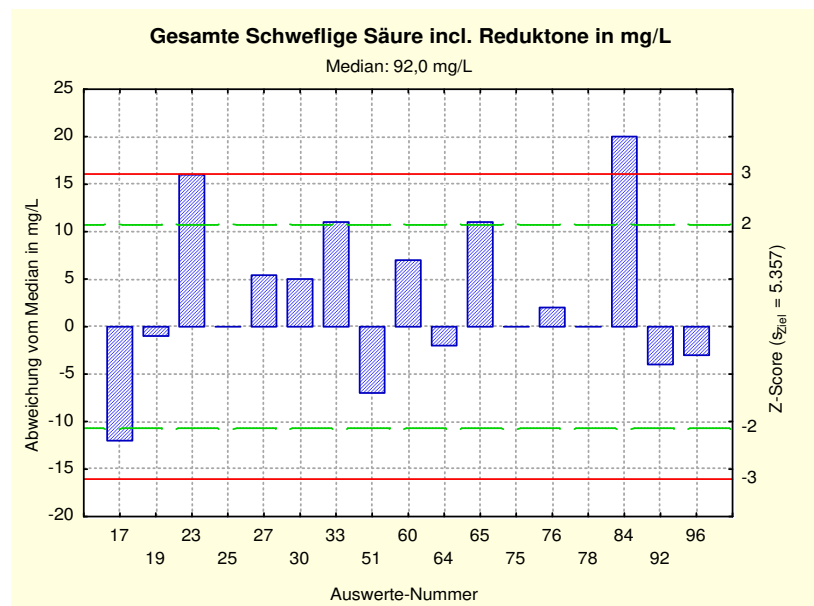
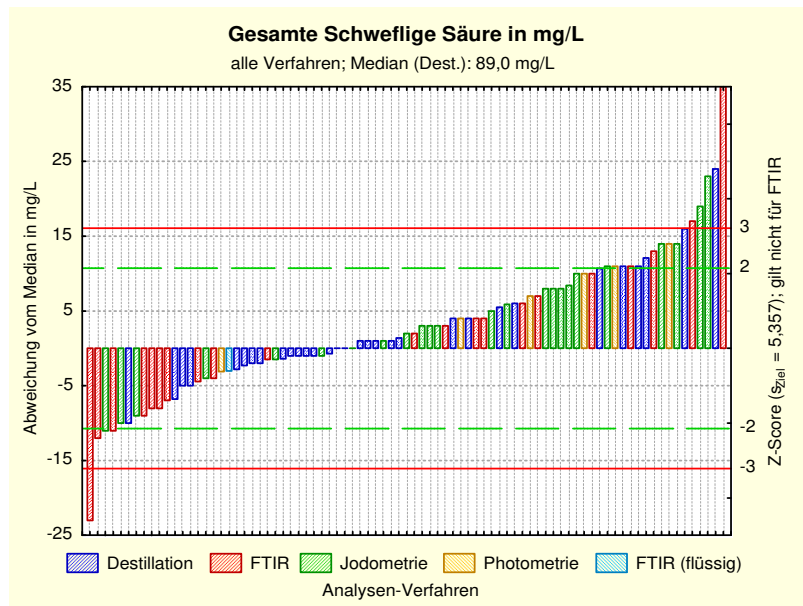
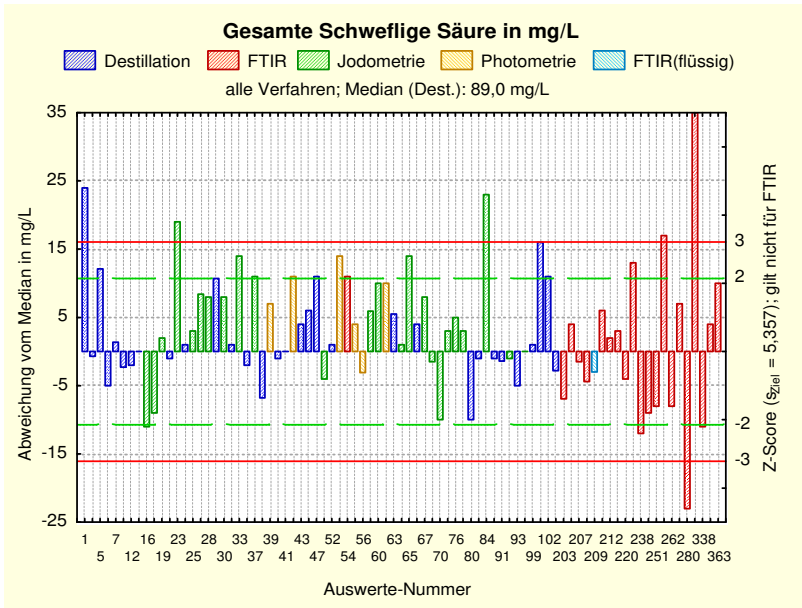
Methodenkodename **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet

**4.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

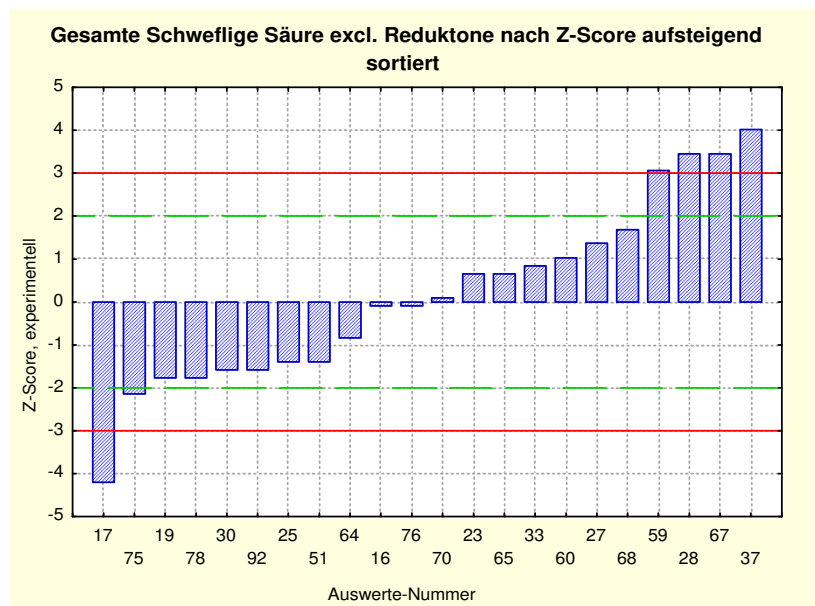
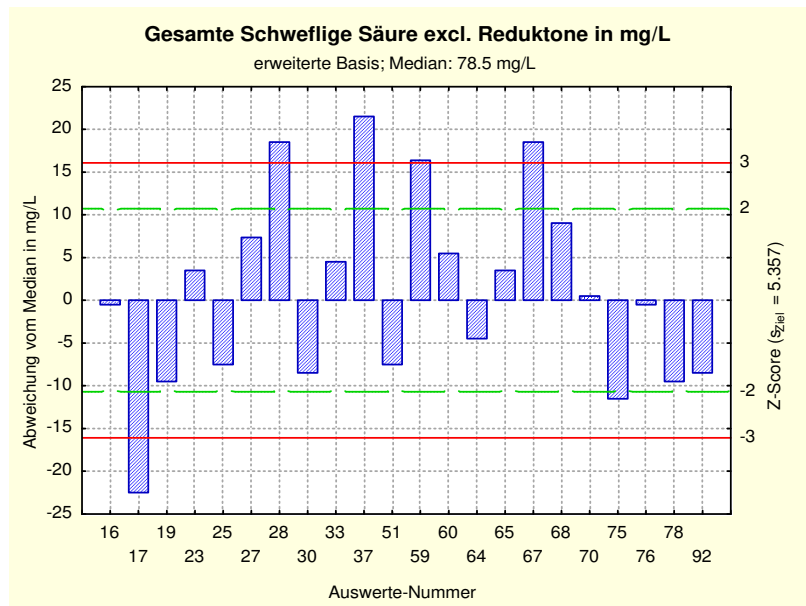
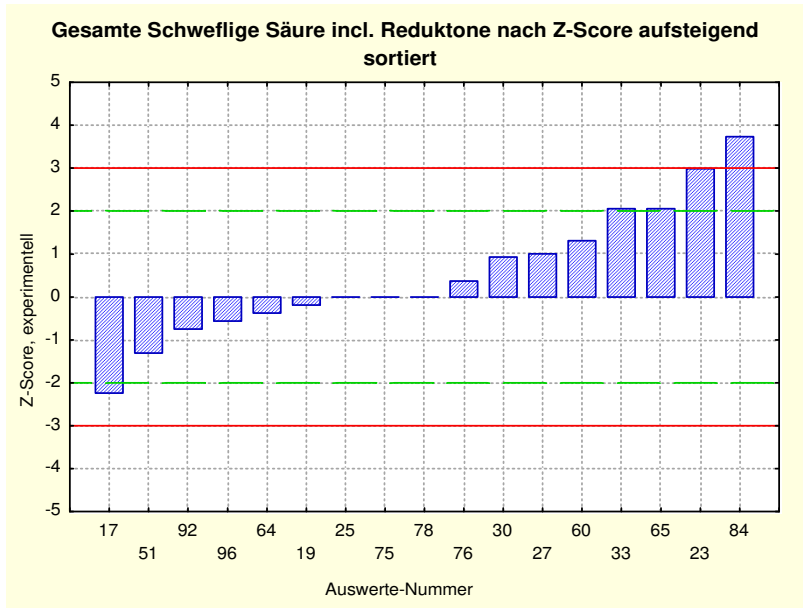
Ergebnisse für	Destillation alle Daten	incl. Reduktone alle Daten	excl. Reduktone alle Daten
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]			
Gültige Werte	32	17	22
Minimalwert	79,0	80,0	56,0
Mittelwert	91,03	94,85	79,33
Median	89,00	92,00	78,50
Maximalwert	113,0	112,0	100,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	7,042	8,255	11,356
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,245	2,002	2,421
Zielstandardabweichung			
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	7,246	7,453	6,513
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,97	1,11	1,74
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,31	1,54	2,12
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,17	0,27	0,37
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,23	0,37	0,45

**4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.2	Methode n. Tanner	1	79,00	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	90,35	6,96
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	7	88,85	4,58
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	92,34	6,43
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	90,00	
IFU 7	Internationale Fruchtsaftunion Nr. 7	1	86,40	
	alle Destillationsverfahren	32	90,39	6,01
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	13	93,76	8,40
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	1	99,00	
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	96,85	11,55
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	17	94,64	8,34
	wie mitgeteilt			
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	6	93,00	8,09
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	79,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	7	90,98	9,41
	Basis erweitert			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	18	80,19	13,37
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	1	84,00	
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	3	74,00	5,67
	Basis erweitert: jodometrisch mit Reduktonabzug	22	79,39	11,94
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	1	99,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	5	95,82	7,01
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	21	89,64	11,10
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	86,00	







## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P03

### 5.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 5.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	1,00126	-0,000105	-0,80	
02	LwK 8.1	1,00136	-0,000005	-0,04	
04	LwK 8.4	1,00137	0,000005	0,04	
05	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
06	LwK 8.4	1,00149	0,000125	0,95	
07	LwK 8.4	1,00142	0,000055	0,42	
08	LwK 8.1	1,00160	0,000235	1,78	
10	LwK 8.1	1,00133	-0,000035	-0,27	
11	LwK 8.4	1,00142	0,000055	0,42	
12	LwK 8.4	1,00151	0,000145	1,10	
13	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
14	LwK 8.4	1,00136	-0,000005	-0,04	
16	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
17	LwK 8.4	1,00137	0,000005	0,04	
19	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
20	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
21	LwK 8.4	1,00170	0,000335	2,54	
22	LwK 8.4	1,00132	-0,000045	-0,34	
23	LwK 8.4	1,00160	0,000235	1,78	
24	LwK 8.4	1,00122	-0,000145	-1,10	
25	LwK 8.4	1,00137	0,000005	0,04	
27	LwK 8.4	1,00132	-0,000045	-0,34	
28	LwK 8.4	1,00120	-0,000165	-1,25	
29	LwK 8.4	1,00131	-0,000055	-0,42	
31	LwK 8.4	1,00138	0,000015	0,11	
35	LwK 8.4	1,00140	0,000035	0,27	
37	LwK 8.4	1,00140	0,000035	0,27	
38	LwK 8.3	1,00118	-0,000185	-1,40	
39	LwK 8.4	1,00140	0,000035	0,27	
40	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
41	LwK 8.4	1,00130	-0,000065	-0,49	
42	LwK 8.4	1,00150	0,000135	1,02	
43	LwK 8.4	1,00135	-0,000015	-0,11	
44	LwK 8.4	1,00129	-0,000075	-0,57	
45	LwK 8.4	1,00150	0,000135	1,02	
48	LwK 8.4	1,00150	0,000135	1,02	
50	LwK 8.4	1,00132	-0,000045	-0,34	
53	LwK 8.4	1,00160	0,000235	1,78	
55	LwK 8.4	1,00143	0,000065	0,49	
56	LwK 8.4	1,00127	-0,000095	-0,72	
60	LwK 8.4	1,00100	-0,000365	-2,77	
61	LwK 8.4	1,00160	0,000235	1,78	
62	LwK 8.4	1,00132	-0,000045	-0,34	
63	LwK 8.4	1,00140	0,000035	0,27	
64	LwK 8.4	1,00160	0,000235	1,78	
66	LwK 8.4	1,00120	-0,000165	-1,25	
68	LwK 8.4	1,00140	0,000035	0,27	
74	LwK 8.4	1,00160	0,000235	1,78	
80	LwK 8.4	1,00129	-0,000075	-0,57	
81	LwK 8.4	1,00281	0,001445	10,95	(**)
84	LwK 8.2	0,99950	-0,001865	-14,13	(**)
86	LwK 8.4	1,00153	0,000165	1,25	
92	LwK 8.4	1,00133	-0,000035	-0,27	
98	LwK 8.4	1,00150	0,000135	1,02	

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

**5.1.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
202	FTIR	1,00119	-0,000175	-0,92	
203	FTIR	1,00086	-0,000505	-2,66	
204	FTIR	1,00148	0,000115	0,61	
206	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
207	FTIR	1,00135	-0,000015	-0,08	
208	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
209	FTIR	1,00100	-0,000365	-1,92	
210	FTIR	1,00112	-0,000245	-1,29	
212	FTIR	1,00121	-0,000155	-0,82	
213	FTIR	1,00170	0,000335	1,76	
214	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
216	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
217	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
218	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
219	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
220	FTIR	1,00125	-0,000115	-0,61	
221	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
222	FTIR	1,00100	-0,000365	-1,92	
223	FTIR	1,00102	-0,000345	-1,82	
224	FTIR	1,00085	-0,000515	-2,71	
225	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
226	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
227	FTIR	1,00136	-0,000005	-0,03	
228	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
229	FTIR	1,00127	-0,000095	-0,50	
230	FTIR	1,00070	-0,000665	-3,50	
231	FTIR	1,00094	-0,000425	-2,24	
233	FTIR	1,00130	-0,000065	-0,34	
235	FTIR	1,00107	-0,000295	-1,55	
236	FTIR	1,00170	0,000335	1,76	
237	FTIR	1,00142	0,000055	0,29	
238	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
241	FTIR	1,00107	-0,000295	-1,55	
242	FTIR	1,00050	-0,000865	-4,55	
243	FTIR	1,00144	0,000075	0,39	
244	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
245	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
246	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
247	FTIR	1,00090	-0,000465	-2,45	
249	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
250	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
251	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
254	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
255	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
256	FTIR	1,00079	-0,000575	-3,03	
257	FTIR	1,00110	-0,000265	-1,39	
258	FTIR	1,00080	-0,000565	-2,97	
259	FTIR	1,00152	0,000155	0,82	
260	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
261	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
262	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
263	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
264	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	
265	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
266	FTIR	1,00116	-0,000205	-1,08	
267	FTIR	1,00100	-0,000365	-1,92	
268	FTIR	1,00116	-0,000205	-1,08	
269	FTIR	1,00190	0,000535	2,82	
270	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
271	FTIR	1,00138	0,000015	0,08	
273	FTIR	1,00141	0,000045	0,24	
274	FTIR	1,00070	-0,000665	-3,50	
275	FTIR	1,00100	-0,000365	-1,92	
276	FTIR	1,00160	0,000235	1,24	
277	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
280	FTIR	1,00010	-0,001265	-6,66	(**)
281	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
282	FTIR	1,00120	-0,000165	-0,87	
283	FTIR	1,00195	0,000585	3,08	
284	FTIR	0,99960	-0,001765	-9,29	(**)
322	FTIR	1,00140	0,000035	0,18	
338	FTIR	1,00170	0,000335	1,76	
349	FTIR	1,00130	-0,000065	-0,34	
363	FTIR	1,00150	0,000135	0,71	

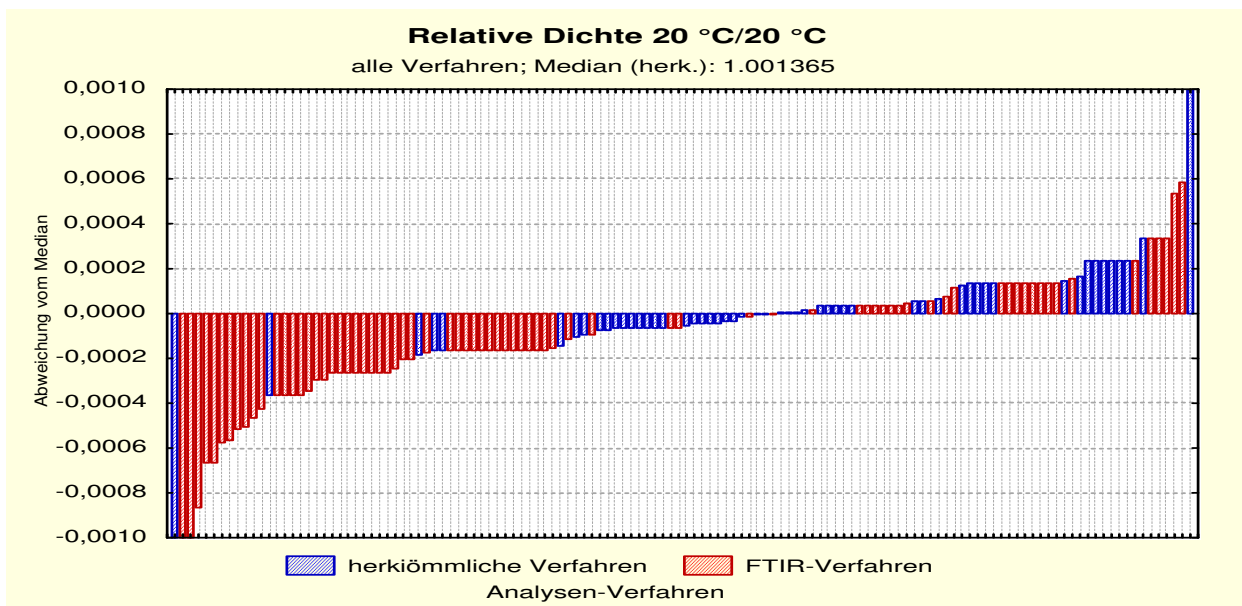
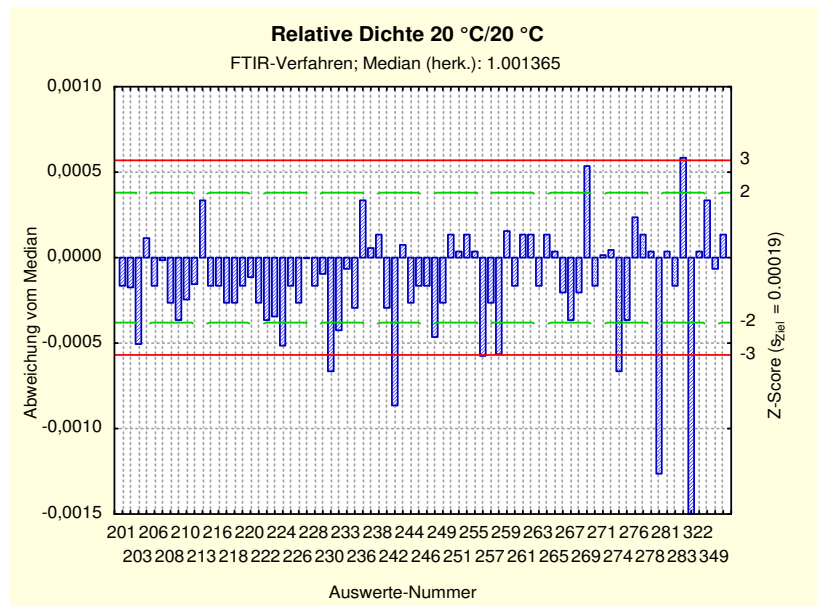
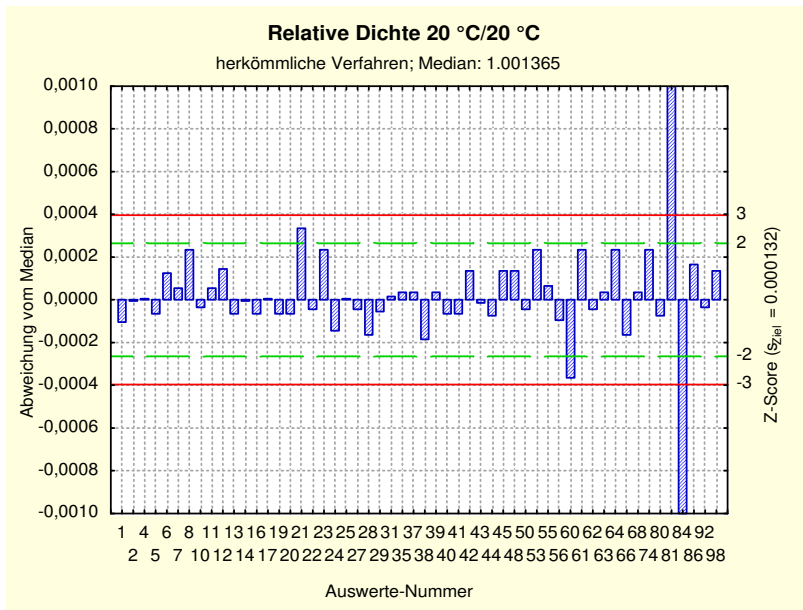
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Bewertungsbasis ab.

**5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	54	52
Minimalwert	0,99950	1,00100
Mittelwert	1,001375	1,001383
Median	1,001365	1,001365
Maximalwert	1,00281	1,00170
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,000350	0,000133
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000048	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 ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,65	1,01
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,84	0,70
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,36	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,25	0,10

**5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	4	1,00139	0,000165
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99950	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,00118	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	48	1,00139	0,000132
	herkömmliche Verfahren	54	1,00138	0,000138
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	1,00123	0,000264



## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Laborergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	83,60	-0,900	-0,37	-1,68	
02	LwK 2.1	85,30	0,800	0,33	1,50	
04	LwK 2.9	86,61	2,110	0,86	3,94	
05	LwK 2.1	84,05	-0,446	-0,18	-0,83	
06	LwK 2.4	84,38	-0,120	-0,05	-0,22	
07	LwK 2.9	85,64	1,140	0,47	2,13	
08	LwK 2.4	83,19	-1,310	-0,53	-2,45	
10	LwK 2.4	85,40	0,900	0,37	1,68	
11	LwK 2.1	85,64	1,140	0,47	2,13	
12	LwK 2.1	85,50	1,000	0,41	1,87	
13	LwK 2.1	85,80	1,300	0,53	2,43	
14	LwK 2.1	83,80	-0,700	-0,29	-1,31	
16	LwK 2.9	86,03	1,530	0,62	2,86	
17	LwK 2.9	86,00	1,500	0,61	2,80	
19	LwK 2.9	86,30	1,800	0,73	3,36	
20	LwK 2.1	87,06	2,560	1,04	4,79	
21	LwK 2.9	85,50	1,000	0,41	1,87	
22	LwK 2.7	85,11	0,610	0,25	1,14	
23	LwK 2.7	86,09	1,590	0,65	2,97	
24	LwK 2.9	85,70	1,200	0,49	2,24	
25	LwK 2.5	85,10	0,600	0,24	1,12	
27	LwK 2.1	85,22	0,720	0,29	1,35	
28	LwK 2.4	85,10	0,600	0,24	1,12	
29	LwK 2.5	84,70	0,200	0,08	0,37	
31	LwK 2.1	84,91	0,410	0,17	0,77	
36	LwK 2.9	86,50	2,000	0,82	3,74	
38	LwK 2.2	85,80	1,300	0,53	2,43	
39	LwK 2.9	86,60	2,100	0,86	3,93	
40	LwK 2.1	84,20	-0,300	-0,12	-0,56	
41	LwK 2.4	84,95	0,450	0,18	0,84	
42	LwK 2.5	84,87	0,370	0,15	0,69	
44	LwK 2.9	86,40	1,900	0,78	3,55	
45	LwK 2.1	84,10	-0,400	-0,16	-0,75	
48	LwK 2.5	85,67	1,170	0,48	2,19	
50	LwK 2.9	85,90	1,400	0,57	2,62	
53	LwK 2.9	84,60	0,100	0,04	0,19	
55	LwK 2.1	84,48	-0,020	-0,01	-0,04	
56	LwK 2.9	85,90	1,400	0,57	2,62	
60	LwK 2.1	84,50	0,000	0,00	0,00	
61	LwK 2.9	85,50	1,000	0,41	1,87	
62	LwK 2.1	83,11	-1,390	-0,57	-2,60	
63	LwK 2.5	85,80	1,300	0,53	2,43	
64	LwK 2.9	85,60	1,100	0,45	2,06	
66	LwK 2.1	85,30	0,800	0,33	1,50	
68	LwK 2.9	86,21	1,710	0,70	3,20	
72	LwK 2.1	81,98	-2,520	-1,03	-4,71	
74	LwK 2.9	85,56	1,060	0,43	1,98	
75	LwK 2.4	83,69	-0,813	-0,33	-1,52	
81	LwK 2.1	84,50	0,000	0,00	0,00	
84	LwK 2.2	87,50	3,000	1,22	5,61	(**)
86	LwK 2.5	84,54	0,040	0,02	0,07	
88	LwK 2.4	84,35	-0,150	-0,06	-0,28	
92	LwK 2.7	84,69	0,190	0,08	0,36	
94	LwK 2.5	85,40	0,900	0,37	1,68	
96	LwK 2.9	86,13	1,630	0,66	3,05	
98	LwK 2.9	85,40	0,900	0,37	1,68	
100	LwK 2.9	85,30	0,800	0,33	1,50	
102	LwK 2.4	83,62	-0,880	-0,36	-1,64	
106	LwK 2.4	86,13	1,630	0,66	3,05	
107	NMR	83,59	-0,909	-0,37	-1,70	

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

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

**Fortsetzung: herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
108	NMR	83,03	-1,468	-0,60	-2,74	
109	NMR	81,96	-2,542	-1,04	-4,75	
110	NMR	82,99	-1,511	-0,62	-2,82	

**5.2.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	85,62	1,120	0,46	1,26	
202	LwK 2.8	86,14	1,640	0,67	1,85	
203	LwK 2.8	86,72	2,220	0,91	2,51	
204	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
206	LwK 2.8	86,81	2,310	0,94	2,61	
207	LwK 2.8	85,41	0,910	0,37	1,03	
208	LwK 2.8	87,78	3,280	1,34	3,70	
209	LwK 2.8	84,50	0,000	0,00	0,00	
210	LwK 2.8	85,87	1,370	0,56	1,55	
212	LwK 2.8	84,20	-0,300	-0,12	-0,34	
213	LwK 2.8	88,00	3,500	1,43	3,95	
214	LwK 2.8	87,09	2,590	1,06	2,92	
216	LwK 2.8	87,20	2,700	1,10	3,05	
217	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
218	LwK 2.8	87,35	2,850	1,16	3,22	
219	LwK 2.8	89,80	5,300	2,16	5,98	(**)
220	LwK 2.8	87,20	2,700	1,10	3,05	
221	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
222	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
223	LwK 2.8	85,17	0,670	0,27	0,76	
224	LwK 2.8	85,46	0,960	0,39	1,08	
225	LwK 2.8	85,60	1,100	0,45	1,24	
226	LwK 2.8	87,00	2,500	1,02	2,82	
227	LwK 2.8	85,70	1,200	0,49	1,35	
228	LwK 2.8	87,30	2,800	1,14	3,16	
229	LwK 2.8	86,37	1,870	0,76	2,11	
230	LwK 2.8	85,50	1,000	0,41	1,13	
231	LwK 2.8	87,03	2,530	1,03	2,86	
233	LwK 2.8	87,00	2,500	1,02	2,82	
235	LwK 2.8	86,40	1,900	0,78	2,14	
236	LwK 2.8	85,20	0,700	0,29	0,79	
237	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
238	LwK 2.8	85,51	1,010	0,41	1,14	
241	LwK 2.8	87,00	2,500	1,02	2,82	
242	LwK 2.8	84,90	0,400	0,16	0,45	
243	LwK 2.8	85,50	1,000	0,41	1,13	
244	LwK 2.8	85,70	1,200	0,49	1,35	
245	LwK 2.8	87,02	2,520	1,03	2,84	
246	LwK 2.8	85,90	1,400	0,57	1,58	
247	LwK 2.8	85,75	1,250	0,51	1,41	
248	LwK 2.8	82,90	-1,600	-0,65	-1,81	
249	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
250	LwK 2.8	86,92	2,420	0,99	2,73	
251	LwK 2.8	86,10	1,600	0,65	1,81	
254	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
255	LwK 2.8	84,80	0,300	0,12	0,34	
256	LwK 2.8	86,60	2,100	0,86	2,37	
257	LwK 2.8	84,80	0,300	0,12	0,34	
258	LwK 2.8	85,60	1,100	0,45	1,24	
259	LwK 2.8	87,63	3,130	1,28	3,53	
260	LwK 2.8	84,50	0,000	0,00	0,00	
261	LwK 2.8	87,20	2,700	1,10	3,05	
262	LwK 2.8	86,20	1,700	0,69	1,92	
263	LwK 2.8	85,90	1,400	0,57	1,58	
264	LwK 2.8	86,66	2,160	0,88	2,44	
265	LwK 2.8	85,17	0,670	0,27	0,76	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
266	LwK 2.8	86,31	1,810	0,74	2,04	
267	LwK 2.8	85,90	1,400	0,57	1,58	
268	LwK 2.8	85,74	1,240	0,51	1,40	
269	LwK 2.8	90,30	5,800	2,37	6,55	(**)
270	LwK 2.8	84,10	-0,400	-0,16	-0,45	
271	LwK 2.8	85,02	0,520	0,21	0,59	
273	LwK 2.8	86,60	2,100	0,86	2,37	
274	LwK 2.8	86,90	2,400	0,98	2,71	
275	LwK 2.8	85,58	1,082	0,44	1,22	
276	LwK 2.8	85,30	0,800	0,33	0,90	
277	LwK 2.8	84,70	0,200	0,08	0,23	
278	LwK 2.8	86,80	2,300	0,94	2,60	
280	LwK 2.8	89,42	4,921	2,01	5,55	(**)
281	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
282	LwK 2.8	85,24	0,740	0,30	0,84	
283	LwK 2.8	84,43	-0,070	-0,03	-0,08	
284	LwK 2.8	86,87	2,370	0,97	2,67	
313	LwK 2.8	86,00	1,500	0,61	1,69	
322	LwK 2.8	86,30	1,800	0,73	2,03	
338	LwK 2.8	85,40	0,900	0,37	1,02	
349	LwK 2.8	89,30	4,800	1,96	5,42	(**)
363	LwK 2.8	85,50	1,000	0,41	1,13	

Rot markierte Werte wurden mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet  
 (\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

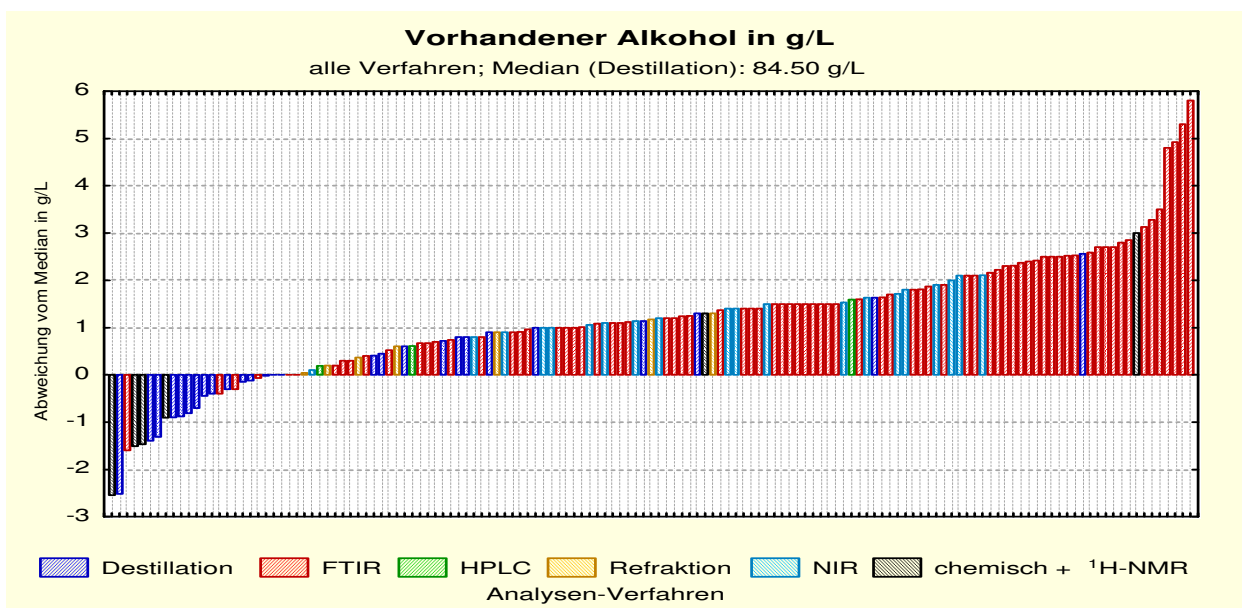
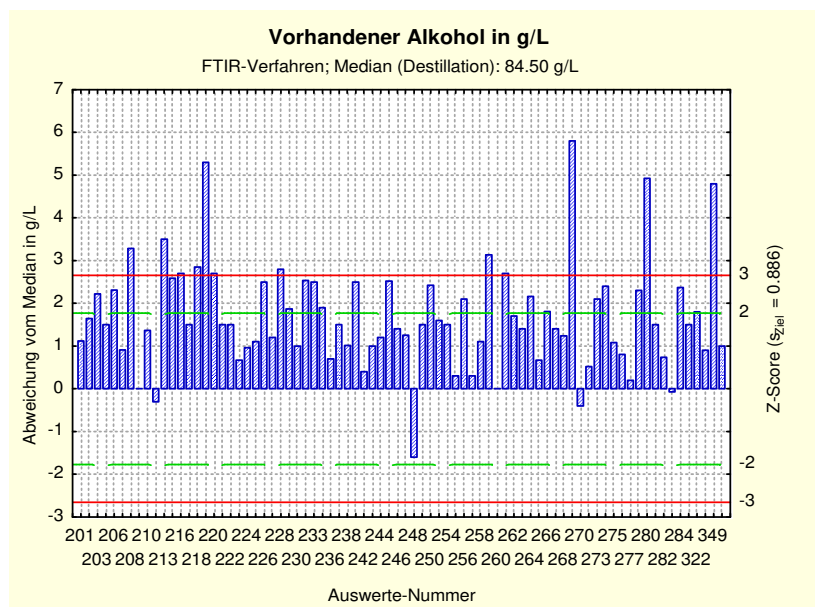
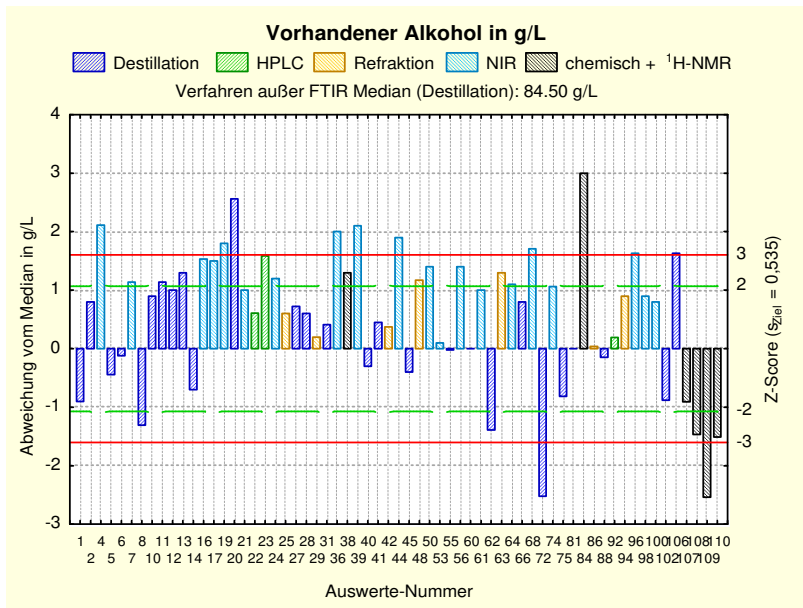
**5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	27
Minimalwert	81,98
Mittelwert	84,587
Median	84,500
Maximalwert	87,06
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,066
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,205
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,451
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,43
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,99
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	1,20
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,38
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,23

**5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	18	84,626	1,038
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	9 27	84,534 84,593	1,075 1,029
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	86,650	1,363
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	7	85,154	0,550
LwK 2.7	HPLC z.B. nach Heidger	3	85,281	0,786
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	86,093	1,029
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	20	85,896	0,505
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	4	82,933	0,689





### 5.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	39,1	-1,75	-1,32	-2,95	
02	LwK 3.3	40,9	0,07	0,05	0,12	
04	LwK 3.3	41,5	0,65	0,49	1,09	
06	LwK 3.3	40,8	-0,05	-0,04	-0,08	
07	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
08	LwK 3.1	40,5	-0,35	-0,26	-0,59	
10	LwK 3.1	40,8	-0,05	-0,04	-0,08	
11	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
12	LwK 3.3	41,3	0,45	0,34	0,76	
13	LwK 3.2	40,9	0,05	0,04	0,08	
14	LwK 3.3	40,3	-0,55	-0,42	-0,93	
16	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
17	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
19	LwK 3.3	41,0	0,15	0,11	0,25	
20	LwK 3.2	41,4	0,55	0,42	0,93	
21	LwK 3.3	41,8	0,95	0,72	1,60	
22	LwK 3.3	40,7	-0,15	-0,11	-0,25	
23	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
24	LwK 3.3	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
25	LwK 3.3	40,8	-0,05	-0,04	-0,08	
27	LwK 3.3	40,7	-0,15	-0,11	-0,25	
28	LwK 3.3	40,5	-0,35	-0,26	-0,59	
29	LwK 3.3	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
31	LwK 3.2	40,7	-0,15	-0,11	-0,25	
36	LwK 3.3	42,2	1,35	1,02	2,27	
38	LwK 3.3	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
39	LwK 3.3	41,4	0,55	0,42	0,93	
40	LwK 3.3	40,5	-0,35	-0,26	-0,59	
41	LwK 3.3	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
42	LwK 3.3	41,0	0,15	0,11	0,25	
43	LwK 3.3	41,1	0,25	0,19	0,42	
44	LwK 3.2	41,1	0,25	0,19	0,42	
45	LwK 3.3	40,5	-0,35	-0,26	-0,59	
48	LwK 3.3	41,2	0,35	0,26	0,59	
50	LwK 3.3	40,9	0,05	0,04	0,08	
53	LwK 3.3	41,2	0,35	0,26	0,59	
55	LwK 3.2	40,7	-0,15	-0,11	-0,25	
56	LwK 3.3	40,8	-0,05	-0,04	-0,08	
60	LwK 3.2	39,6	-1,25	-0,95	-2,10	
62	LwK 3.2	40,0	-0,90	-0,68	-1,52	
63	FTIR	41,2	0,35	0,26	0,59	
66	LwK 3.2	40,2	-0,65	-0,49	-1,09	
80	LwK 3.2	40,0	-0,85	-0,64	-1,43	
81	LwK 3.3	42,6	1,75	1,32	2,95	
84	LwK 3.3	37,8	-3,05	-2,31	-5,13	(**)
86	LwK 3.3	41,0	0,13	0,10	0,22	
92	LwK 3.3	40,5	-0,35	-0,26	-0,59	
98	LwK 3.3	41,2	0,35	0,26	0,59	

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

#### 5.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	39,9	-0,92	-0,70	-1,55	
202	FTIR (gemessen)	41,0	0,18	0,14	0,30	
203	FTIR (gemessen)	41,0	0,19	0,14	0,32	
204	FTIR (gemessen)	42,8	1,95	1,47	3,28	
206	FTIR (gemessen)	40,0	-0,87	-0,66	-1,46	
208	FTIR (gemessen)	41,2	0,31	0,23	0,52	
210	FTIR (gemessen)	39,9	-0,95	-0,72	-1,60	
212	FTIR (gemessen)	40,4	-0,45	-0,34	-0,76	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
217	FTIR (gemessen)	40,4	-0,45	-0,34	-0,76	
218	FTIR (gemessen)	42,3	1,41	1,07	2,37	
219	FTIR (gemessen)	42,5	1,65	1,25	2,78	
220	FTIR (gemessen)	41,4	0,55	0,42	0,93	
221	FTIR (gemessen)	41,9	1,05	0,79	1,77	
222	FTIR (gemessen)	40,8	-0,05	-0,04	-0,08	
223	FTIR (gemessen)	43,9	3,05	2,31	5,13	(**)
224	FTIR-Basis	39,5	-1,35	-1,02	-2,27	
225	FTIR (gemessen)	41,2	0,35	0,26	0,59	
227	FTIR (gemessen)	41,5	0,62	0,47	1,04	
228	FTIR (gemessen)	42,1	1,25	0,95	2,10	
229	FTIR (gemessen)	41,9	1,05	0,79	1,77	
230	FTIR (gemessen)	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
231	FTIR (gemessen)	41,6	0,74	0,56	1,25	
233	FTIR (gemessen)	41,3	0,49	0,37	0,82	
237	FTIR (gemessen)	41,1	0,25	0,19	0,42	
238	FTIR (gemessen)	42,0	1,13	0,85	1,90	
241	FTIR (gemessen)	41,7	0,85	0,64	1,43	
247	FTIR (gemessen)	41,4	0,55	0,42	0,93	
249	FTIR (gemessen)	41,7	0,85	0,64	1,43	
251	FTIR (gemessen)	42,0	1,15	0,87	1,94	
254	FTIR (gemessen)	42,1	1,25	0,95	2,10	
255	FTIR-Basis	42,0	1,15	0,87	1,94	
258	LwK 3.3	58,2	17,35	13,12	29,21	(**)
259	FTIR-Basis	42,1	1,26	0,95	2,12	
260	FTIR-Basis	40,1	-0,75	-0,57	-1,26	
261	FTIR (gemessen)	40,9	0,05	0,04	0,08	
262	FTIR (gemessen)	41,3	0,45	0,34	0,76	
263	FTIR (gemessen)	41,2	0,35	0,26	0,59	
265	FTIR (gemessen)	39,7	-1,15	-0,87	-1,94	
266	FTIR (gemessen)	40,6	-0,23	-0,17	-0,39	
267	FTIR (gemessen)	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
268	FTIR (gemessen)	40,7	-0,17	-0,13	-0,29	
269	FTIR (gemessen)	42,0	1,15	0,87	1,94	
270	FTIR (gemessen)	41,0	0,15	0,11	0,25	
271	FTIR (gemessen)	41,3	0,40	0,30	0,67	
273	FTIR (gemessen)	42,2	1,35	1,02	2,27	
274	FTIR (gemessen)	41,3	0,45	0,34	0,76	
276	FTIR (gemessen)	40,4	-0,45	-0,34	-0,76	
277	FTIR (gemessen)	40,6	-0,25	-0,19	-0,42	
278	FTIR (gemessen)	42,2	1,35	1,02	2,27	
281	FTIR (gemessen)	41,3	0,45	0,34	0,76	
284	FTIR (gemessen)	42,0	1,15	0,87	1,94	
322	FTIR (gemessen)	40,7	-0,15	-0,11	-0,25	
338	FTIR (gemessen)	42,4	1,54	1,16	2,59	

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

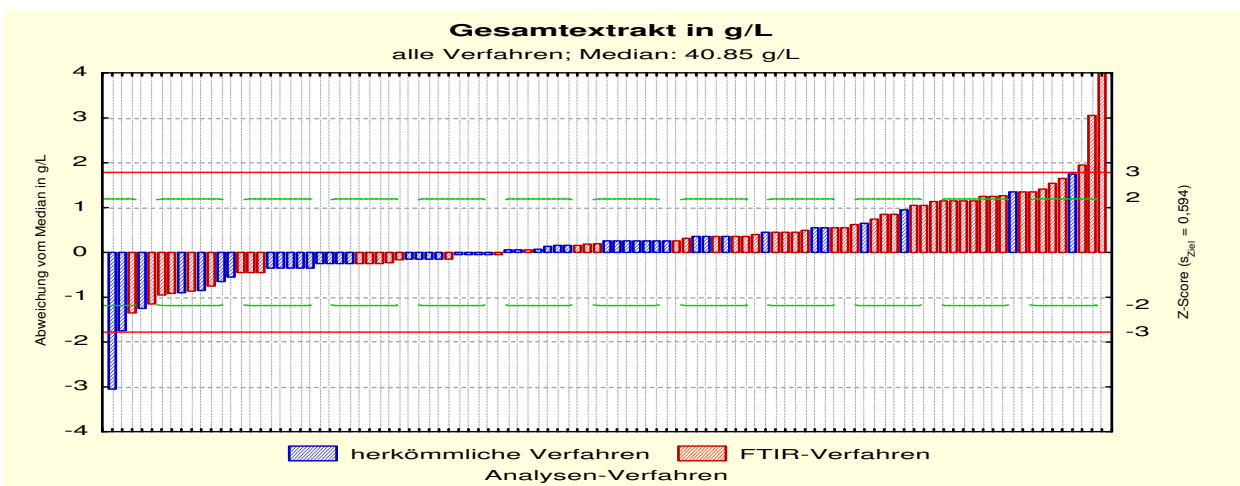
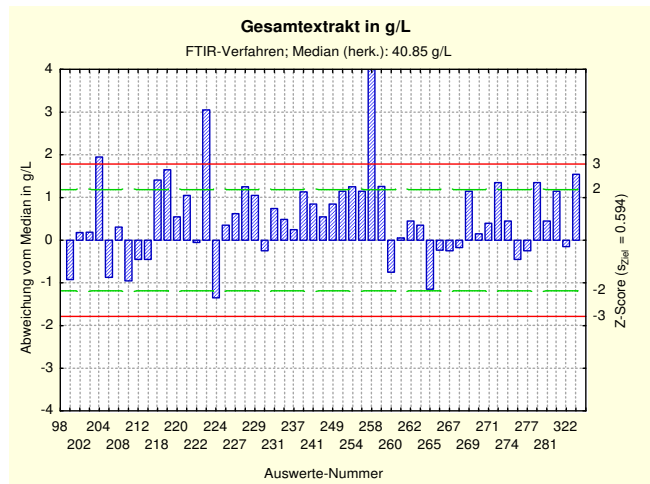
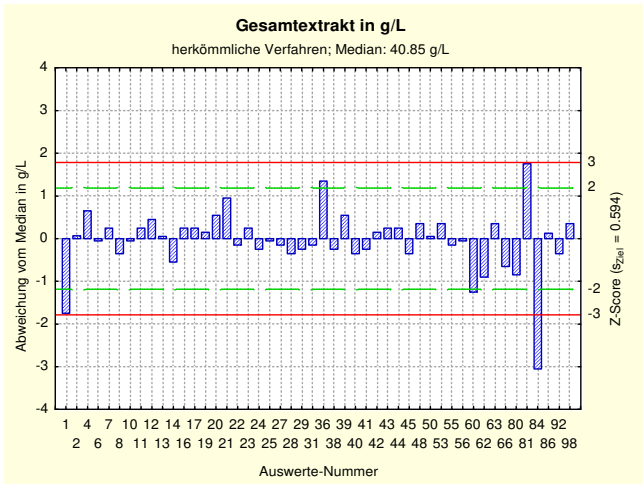
**5.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	47	46
Minimalwert	37,8	39,1
Mittelwert	40,79	40,85
Median	40,80	40,85
Maximalwert	42,6	42,6
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,735	0,591
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,107	0,087
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,321	1,322
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,56	0,45
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,24	1,00
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	(1,30)	(1,05)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08	0,07
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,18	0,15
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,19)	(0,15)

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

**5.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	40,650	0,241
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	10	40,373	0,797
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	36	40,956	0,424
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	49	41,314	0,802
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	4	40,928	1,503



## 5.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 5.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 4.5	18,60	0,000	0,00	0,00	
07	LwK 4.5	18,55	-0,050	-0,07	-0,09	
08	LwK 4.7	19,67	1,070	1,58	1,96	
10	LwK 4.5	18,49	-0,110	-0,16	-0,20	
11	LwK 4.7	21,00	2,400	3,54	4,40	
12	LwK 4.1	17,72	-0,880	-1,30	-1,61	
13	LwK 4.7	18,70	0,100	0,15	0,18	
14	LwK 4.5	18,60	0,000	0,00	0,00	
16	LwK 4.5	18,60	0,000	0,00	0,00	
17	LwK 4.5	18,50	-0,100	-0,15	-0,18	
20	LwK 4.5	18,05	-0,550	-0,81	-1,01	
21	LwK 4.4	19,10	0,500	0,74	0,92	
22	LwK 4.7	18,39	-0,210	-0,31	-0,39	
23	LwK 4.7	18,59	-0,010	-0,01	-0,02	
24	NMR	18,10	-0,500	-0,74	-0,92	
25	LwK 4.4	19,80	1,200	1,77	2,20	
27	LwK 4.5	18,69	0,090	0,13	0,17	
28	LwK 4.7	19,20	0,600	0,89	1,10	
29	LwK 4.4	20,40	1,800	2,66	3,30	
31	LwK 4.5	19,40	0,800	1,18	1,47	
36	LwK 4.5	18,30	-0,300	-0,44	-0,55	
38	LwK 4.3	20,06	1,460	2,15	2,68	
39	LwK 4.5	19,00	0,400	0,59	0,73	
40	LwK 4.7	18,30	-0,300	-0,44	-0,55	
41	LwK 4.5	19,20	0,600	0,89	1,10	
42	LwK 4.5	18,90	0,300	0,44	0,55	
43	LwK 4.5	19,03	0,434	0,64	0,80	
44	LwK 4.4	19,30	0,700	1,03	1,28	
45	LwK 4.5	18,53	-0,070	-0,10	-0,13	
48	LwK 4.5	18,70	0,100	0,15	0,18	
50	LwK 4.5	18,40	-0,200	-0,30	-0,37	
53	LwK 4.5	19,40	0,800	1,18	1,47	
55	LwK 4.5	18,80	0,200	0,30	0,37	
56	LwK 4.5	18,49	-0,110	-0,16	-0,20	
60	LwK 4.4	19,60	1,000	1,48	1,83	
61	LwK 4.5	18,20	-0,400	-0,59	-0,73	
62	LwK 4.5	18,13	-0,470	-0,69	-0,86	
63	LwK 4.4	18,62	0,020	0,03	0,04	
66	LwK 4.4	20,00	1,400	2,07	2,57	
68	LwK 4.5	18,93	0,330	0,49	0,61	
72	LwK 4.4	18,10	-0,500	-0,74	-0,92	
74	LwK 4.5	19,00	0,400	0,59	0,73	
75	LwK 4.4	16,90	-1,700	-2,51	-3,12	
81	LwK 4.5	18,04	-0,560	-0,83	-1,03	
84	LwK 4.3	21,06	2,460	3,63	4,51	
92	LwK 4.7	18,45	-0,150	-0,22	-0,28	
98	LwK 4.7	18,50	-0,100	-0,15	-0,18	
107	NMR	17,38	-1,217	-1,80	-2,23	
108	NMR	17,41	-1,186	-1,75	-2,18	
109	NMR	16,19	-2,406	-3,55	-4,41	
110	NMR	19,28	0,684	1,01	1,25	

**5.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	18,46	-0,140	-0,21	-0,24	
203	LwK 4.8	18,80	0,200	0,30	0,34	
204	LwK 4.8	20,21	1,610	2,38	2,76	
206	LwK 4.8	20,36	1,760	2,60	3,01	
207	LwK 4.8	19,77	1,170	1,73	2,00	
209	LwK 4.8	18,60	0,000	0,00	0,00	
210	LwK 4.8	18,80	0,200	0,30	0,34	
212	LwK 4.8	18,94	0,340	0,50	0,58	
213	LwK 4.8	19,73	1,130	1,67	1,93	
214	LwK 4.8	20,85	2,250	3,32	3,85	
216	LwK 4.8	19,90	1,300	1,92	2,23	
217	LwK 4.8	17,50	-1,100	-1,62	-1,88	
218	LwK 4.8	18,21	-0,390	-0,58	-0,67	
219	LwK 4.8	20,29	1,690	2,49	2,89	
220	LwK 4.8	20,12	1,520	2,24	2,60	
221	LwK 4.8	20,30	1,700	2,51	2,91	
222	LwK 4.8	18,80	0,200	0,30	0,34	
224	LwK 4.8	18,10	-0,500	-0,74	-0,86	
225	LwK 4.8	20,00	1,400	2,07	2,40	
226	LwK 4.8	20,40	1,800	2,66	3,08	
227	LwK 4.8	20,39	1,790	2,64	3,07	
228	LwK 4.8	18,50	-0,100	-0,15	-0,17	
229	LwK 4.8	21,02	2,420	3,57	4,14	
230	LwK 4.8	19,48	0,880	1,30	1,51	
231	LwK 4.8	19,61	1,010	1,49	1,73	
233	LwK 4.8	17,71	-0,890	-1,31	-1,52	
235	LwK 4.8	20,99	2,390	3,53	4,09	
236	LwK 4.8	15,60	-3,000	-4,43	-5,14	(**)
237	LwK 4.8	19,80	1,200	1,77	2,05	
238	LwK 4.8	20,89	2,290	3,38	3,92	
241	LwK 4.8	21,09	2,490	3,67	4,26	
242	LwK 4.8	20,90	2,300	3,39	3,94	
243	LwK 4.8	18,92	0,320	0,47	0,55	
244	LwK 4.8	21,40	2,800	4,13	4,79	
245	LwK 4.8	19,48	0,880	1,30	1,51	
246	LwK 4.8	20,05	1,450	2,14	2,48	
247	LwK 4.8	19,53	0,930	1,37	1,59	
248	LwK 4.8	20,35	1,750	2,58	3,00	
249	LwK 4.8	19,20	0,600	0,89	1,03	
250	LwK 4.8	20,19	1,590	2,35	2,72	
251	LwK 4.8	19,51	0,910	1,34	1,56	
254	LwK 4.8	21,20	2,600	3,84	4,45	
255	LwK 4.8	20,20	1,600	2,36	2,74	
256	LwK 4.8	19,50	0,900	1,33	1,54	
257	LwK 4.8	20,42	1,820	2,69	3,12	
258	LwK 4.8	19,60	1,000	1,48	1,71	
259	LwK 4.8	18,86	0,260	0,38	0,45	
260	LwK 4.8	20,10	1,500	2,21	2,57	
261	LwK 4.8	20,00	1,400	2,07	2,40	
262	LwK 4.8	19,70	1,100	1,62	1,88	
263	LwK 4.8	20,10	1,500	2,21	2,57	
264	LwK 4.8	20,09	1,490	2,20	2,55	
265	LwK 4.8	18,86	0,260	0,38	0,45	
266	LwK 4.8	20,01	1,410	2,08	2,41	
267	LwK 4.8	19,07	0,470	0,69	0,80	
268	LwK 4.8	19,88	1,280	1,89	2,19	
269	LwK 4.8	20,40	1,800	2,66	3,08	
270	LwK 4.8	21,27	2,670	3,94	4,57	
271	LwK 4.8	20,22	1,620	2,39	2,77	
273	LwK 4.8	20,76	2,160	3,19	3,70	
274	LwK 4.8	20,10	1,500	2,21	2,57	
275	LwK 4.8	17,75	-0,850	-1,25	-1,46	
276	LwK 4.8	17,53	-1,070	-1,58	-1,83	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	LwK 4.8	17,57	-1,030	-1,52	-1,76	
278	LwK 4.8	20,30	1,700	2,51	2,91	
281	LwK 4.8	21,04	2,440	3,60	4,18	
282	LwK 4.8	19,38	0,780	1,15	1,34	
284	LwK 4.8	22,00	3,400	5,02	5,82	(**)
322	LwK 4.8	18,80	0,200	0,30	0,34	
338	LwK 4.8	20,80	2,200	3,25	3,77	
349	LwK 4.8	19,50	0,900	1,33	1,54	
363	LwK 4.8	21,10	2,500	3,69	4,28	

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

**5.4.3 Reduktometrische Laboregebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
12	LwK 4.1	17,72	-1,730	-2,46	-3,05	
21	LwK 4.4	19,10	-0,350	-0,50	-0,62	
25	LwK 4.4	19,80	0,350	0,50	0,62	
29	LwK 4.4	20,40	0,950	1,35	1,67	
38	LwK 4.3	20,06	0,610	0,87	1,07	
44	LwK 4.4	19,30	-0,150	-0,21	-0,26	
60	LwK 4.4	19,60	0,150	0,21	0,26	
63	LwK 4.4	18,62	-0,830	-1,18	-1,46	
66	LwK 4.4	20,00	0,550	0,78	0,97	
72	LwK 4.4	18,10	-1,350	-1,92	-2,38	
75	LwK 4.4	16,90	-2,550	-3,62	-4,49	
84	LwK 4.3	21,06	1,610	2,29	2,83	

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

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	18,46	-0,990	-1,41	-1,70	
203	LwK 4.8	18,80	-0,650	-0,92	-1,11	
204	LwK 4.8	20,21	0,760	1,08	1,30	
206	LwK 4.8	20,36	0,910	1,29	1,56	
207	LwK 4.8	19,77	0,320	0,45	0,55	
209	LwK 4.8	18,60	-0,850	-1,21	-1,46	
210	LwK 4.8	18,80	-0,650	-0,92	-1,11	
212	LwK 4.8	18,94	-0,510	-0,72	-0,87	
213	LwK 4.8	19,73	0,280	0,40	0,48	
214	LwK 4.8	20,85	1,400	1,99	2,40	
216	LwK 4.8	19,90	0,450	0,64	0,77	
217	LwK 4.8	17,50	-1,950	-2,77	-3,34	
218	LwK 4.8	18,21	-1,240	-1,76	-2,12	
219	LwK 4.8	20,29	0,840	1,19	1,44	
220	LwK 4.8	20,12	0,670	0,95	1,15	
221	LwK 4.8	20,30	0,850	1,21	1,46	
222	LwK 4.8	18,80	-0,650	-0,92	-1,11	
224	LwK 4.8	18,10	-1,350	-1,92	-2,31	
225	LwK 4.8	20,00	0,550	0,78	0,94	
226	LwK 4.8	20,40	0,950	1,35	1,63	
227	LwK 4.8	20,39	0,940	1,34	1,61	
228	LwK 4.8	18,50	-0,950	-1,35	-1,63	
229	LwK 4.8	21,02	1,570	2,23	2,69	
230	LwK 4.8	19,48	0,030	0,04	0,05	
231	LwK 4.8	19,61	0,160	0,23	0,27	
233	LwK 4.8	17,71	-1,740	-2,47	-2,98	
235	LwK 4.8	20,99	1,540	2,19	2,64	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
236	LwK 4.8	15,60	-3,850	-5,47	-6,59	(**)
237	LwK 4.8	19,80	0,350	0,50	0,60	
238	LwK 4.8	20,89	1,440	2,05	2,47	
241	LwK 4.8	21,09	1,640	2,33	2,81	
242	LwK 4.8	20,90	1,450	2,06	2,48	
243	LwK 4.8	18,92	-0,530	-0,75	-0,91	
244	LwK 4.8	21,40	1,950	2,77	3,34	
245	LwK 4.8	19,48	0,030	0,04	0,05	
246	LwK 4.8	20,05	0,600	0,85	1,03	
247	LwK 4.8	19,53	0,080	0,11	0,14	
248	LwK 4.8	20,35	0,900	1,28	1,54	
249	LwK 4.8	19,20	-0,250	-0,36	-0,43	
250	LwK 4.8	20,19	0,740	1,05	1,27	
251	LwK 4.8	19,51	0,060	0,09	0,10	
254	LwK 4.8	21,20	1,750	2,49	3,00	
255	LwK 4.8	20,20	0,750	1,07	1,28	
256	LwK 4.8	19,50	0,050	0,07	0,09	
257	LwK 4.8	20,42	0,970	1,38	1,66	
258	LwK 4.8	19,60	0,150	0,21	0,26	
259	LwK 4.8	18,86	-0,590	-0,84	-1,01	
260	LwK 4.8	20,10	0,650	0,92	1,11	
261	LwK 4.8	20,00	0,550	0,78	0,94	
262	LwK 4.8	19,70	0,250	0,36	0,43	
263	LwK 4.8	20,10	0,650	0,92	1,11	
264	LwK 4.8	20,09	0,640	0,91	1,10	
265	LwK 4.8	18,86	-0,590	-0,84	-1,01	
266	LwK 4.8	20,01	0,560	0,80	0,96	
267	LwK 4.8	19,07	-0,380	-0,54	-0,65	
268	LwK 4.8	19,88	0,430	0,61	0,74	
269	LwK 4.8	20,40	0,950	1,35	1,63	
270	LwK 4.8	21,27	1,820	2,59	3,12	
271	LwK 4.8	20,22	0,770	1,09	1,32	
273	LwK 4.8	20,76	1,310	1,86	2,24	
274	LwK 4.8	20,10	0,650	0,92	1,11	
275	LwK 4.8	17,75	-1,700	-2,42	-2,91	
276	LwK 4.8	17,53	-1,920	-2,73	-3,29	
277	LwK 4.8	17,57	-1,880	-2,67	-3,22	
278	LwK 4.8	20,30	0,850	1,21	1,46	
281	LwK 4.8	21,04	1,590	2,26	2,72	
282	LwK 4.8	19,38	-0,070	-0,10	-0,12	
284	LwK 4.8	22,00	2,550	3,62	4,37	
322	LwK 4.8	18,80	-0,650	-0,92	-1,11	
338	LwK 4.8	20,80	1,350	1,92	2,31	
349	LwK 4.8	19,50	0,050	0,07	0,09	
363	LwK 4.8	21,10	1,650	2,34	2,83	

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

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

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	18,21	-0,390	-0,58	-0,67	
202	LwK 4.8	18,46	-0,140	-0,21	-0,24	
203	LwK 4.8	18,80	0,200	0,30	0,34	
204	LwK 4.8	18,64	0,040	0,06	0,07	
206	LwK 4.8	20,37	1,770	2,61	3,03	
207	LwK 4.8	17,30	-1,300	-1,92	-2,23	
208	LwK 4.8	19,82	1,220	1,80	2,09	
209	LwK 4.8	18,60	0,000	0,00	0,00	
210	LwK 4.8	18,84	0,240	0,35	0,41	
212	LwK 4.8	17,51	-1,090	-1,61	-1,87	
213	LwK 4.8	18,12	-0,480	-0,71	-0,82	



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
214	LwK 4.8	20,40	1,800	2,66	3,08	
216	LwK 4.8	18,20	-0,400	-0,59	-0,68	
217	LwK 4.8	17,53	-1,070	-1,58	-1,83	
218	LwK 4.8	15,53	-3,070	-4,53	-5,26	(**)
219	LwK 4.8	17,59	-1,010	-1,49	-1,73	
220	LwK 4.8	17,67	-0,930	-1,37	-1,59	
221	LwK 4.8	20,30	1,700	2,51	2,91	
222	LwK 4.8	18,17	-0,430	-0,63	-0,74	
223	LwK 4.8	23,12	4,520	6,67	7,74	(**)
224	LwK 4.8	18,76	0,160	0,24	0,27	
225	LwK 4.8	19,00	0,400	0,59	0,68	
226	LwK 4.8	19,09	0,490	0,72	0,84	
227	LwK 4.8	19,12	0,520	0,77	0,89	
228	LwK 4.8	19,00	0,400	0,59	0,68	
229	LwK 4.8	18,59	-0,010	-0,01	-0,02	
230	LwK 4.8	20,01	1,410	2,08	2,41	
231	LwK 4.8	18,44	-0,160	-0,24	-0,27	
233	LwK 4.8	17,71	-0,890	-1,31	-1,52	
235	LwK 4.8	18,28	-0,320	-0,47	-0,55	
236	LwK 4.8	15,60	-3,000	-4,43	-5,14	(**)
237	LwK 4.8	18,30	-0,300	-0,44	-0,51	
238	LwK 4.8	19,37	0,770	1,14	1,32	
241	LwK 4.8	18,24	-0,360	-0,53	-0,62	
242	LwK 4.8	18,60	0,000	0,00	0,00	
243	LwK 4.8	18,30	-0,300	-0,44	-0,51	
244	LwK 4.8	18,49	-0,110	-0,16	-0,19	
245	LwK 4.8	18,72	0,120	0,18	0,21	
246	LwK 4.8	18,84	0,240	0,35	0,41	
247	LwK 4.8	18,46	-0,140	-0,21	-0,24	
248	LwK 4.8	18,77	0,170	0,25	0,29	
249	LwK 4.8	19,20	0,600	0,89	1,03	
250	LwK 4.8	18,50	-0,100	-0,15	-0,17	
251	LwK 4.8	19,51	0,910	1,34	1,56	
254	LwK 4.8	18,40	-0,200	-0,30	-0,34	
256	LwK 4.8	20,20	1,600	2,36	2,74	
257	LwK 4.8	18,88	0,280	0,41	0,48	
258	LwK 4.8	18,50	-0,100	-0,15	-0,17	
259	LwK 4.8	19,47	0,870	1,28	1,49	
260	LwK 4.8	18,10	-0,500	-0,74	-0,86	
261	LwK 4.8	18,60	0,000	0,00	0,00	
262	LwK 4.8	19,70	1,100	1,62	1,88	
263	LwK 4.8	18,50	-0,100	-0,15	-0,17	
264	LwK 4.8	20,09	1,490	2,20	2,55	
265	LwK 4.8	17,54	-1,060	-1,56	-1,82	
266	LwK 4.8	16,43	-2,170	-3,20	-3,72	
267	LwK 4.8	18,27	-0,330	-0,49	-0,57	
269	LwK 4.8	17,80	-0,800	-1,18	-1,37	
270	LwK 4.8	19,37	0,770	1,14	1,32	
271	LwK 4.8	19,24	0,640	0,94	1,10	
273	LwK 4.8	18,67	0,070	0,10	0,12	
274	LwK 4.8	17,40	-1,200	-1,77	-2,05	
275	LwK 4.8	17,75	-0,850	-1,25	-1,46	
276	LwK 4.8	19,32	0,720	1,06	1,23	
277	LwK 4.8	19,72	1,120	1,65	1,92	
278	LwK 4.8	17,30	-1,300	-1,92	-2,23	
280	LwK 4.8	18,43	-0,170	-0,25	-0,29	
281	LwK 4.8	19,79	1,190	1,76	2,04	
282	LwK 4.8	19,96	1,360	2,01	2,33	
283	LwK 4.8	19,59	0,990	1,46	1,70	
313	LwK 4.8	17,15	-1,450	-2,14	-2,48	
322	LwK 4.8	18,38	-0,220	-0,32	-0,38	
338	LwK 4.8	20,18	1,580	2,33	2,71	
349	LwK 4.8	19,20	0,600	0,89	1,03	
363	LwK 4.8	18,60	0,000	0,00	0,00	

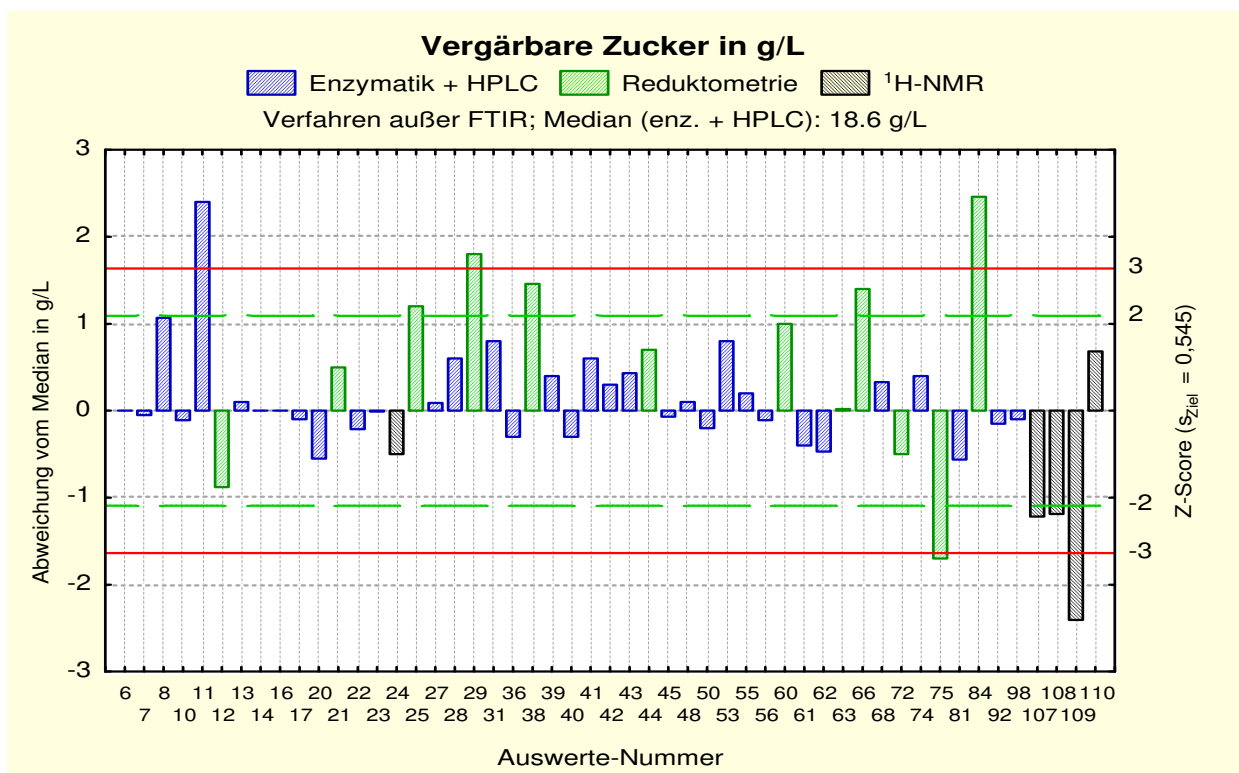
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

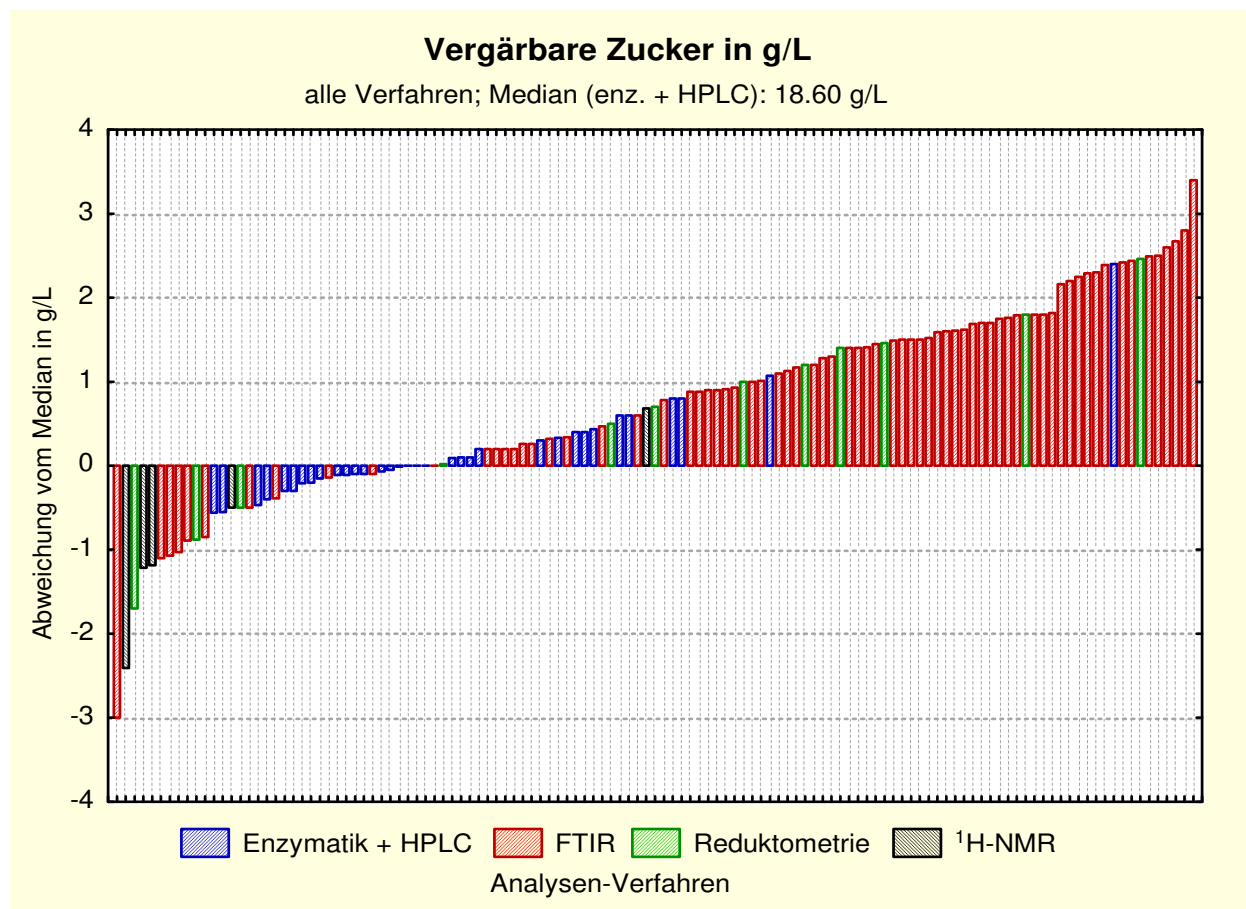
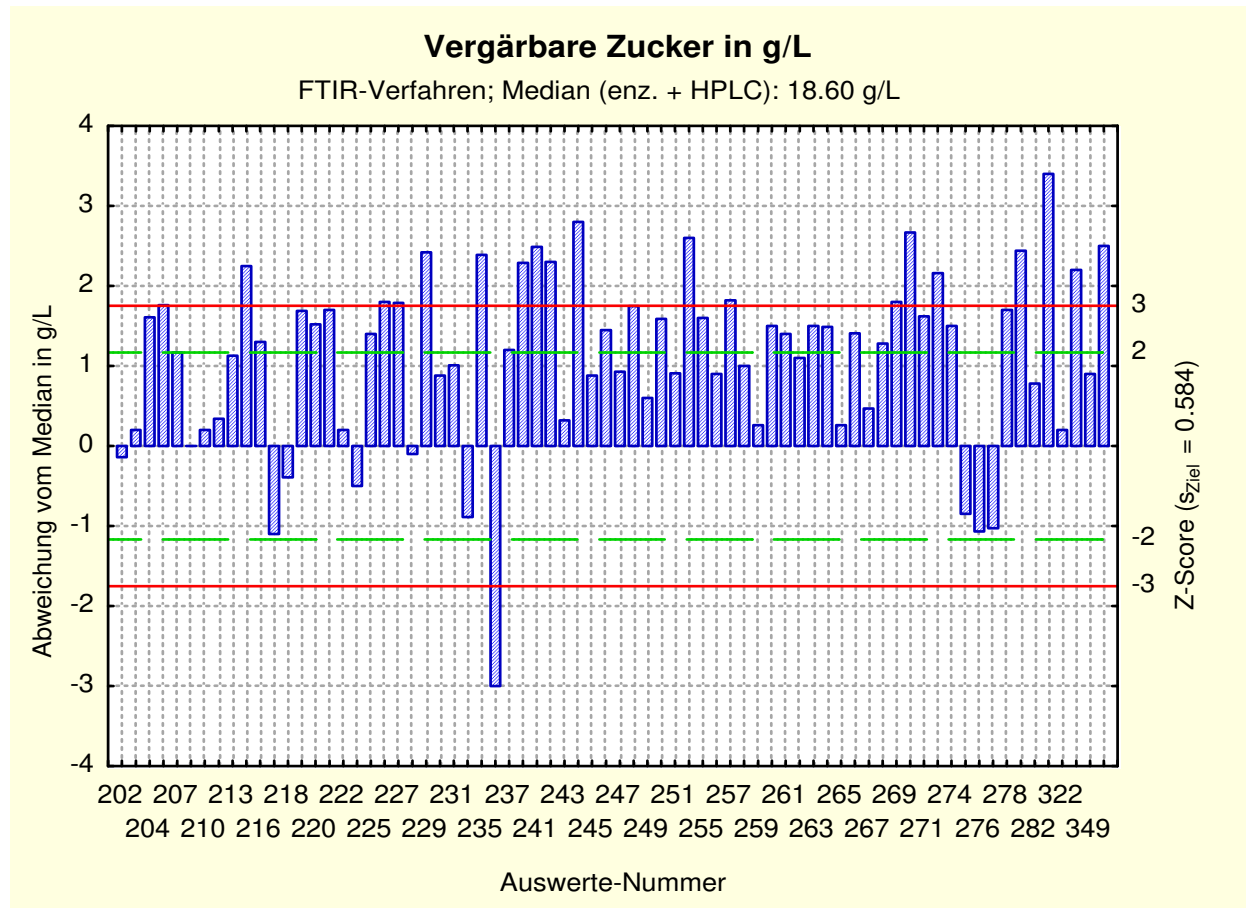
**5.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

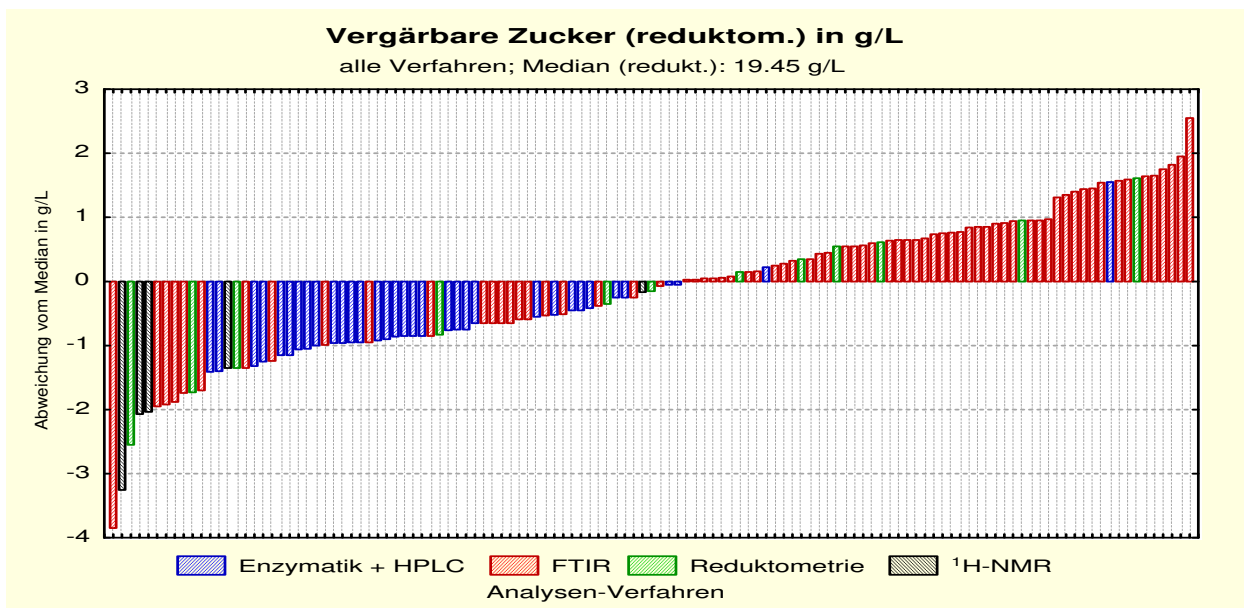
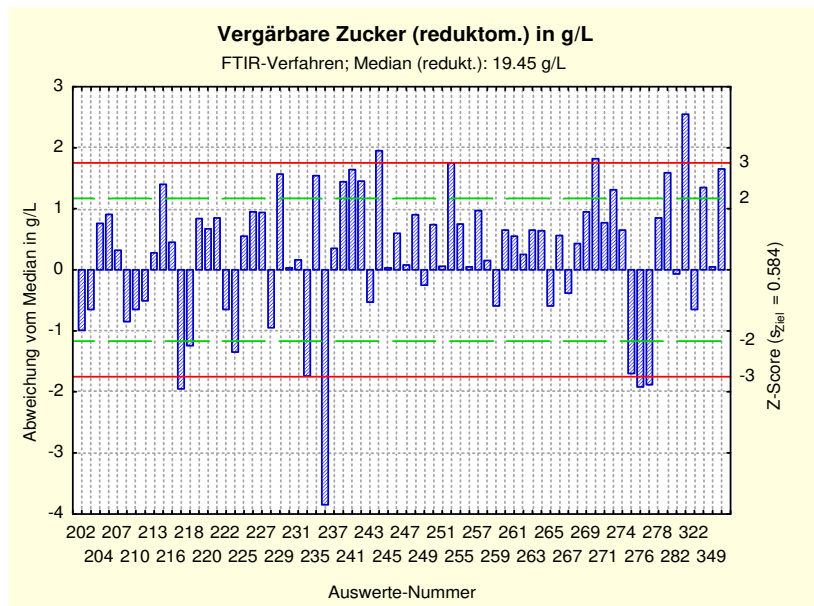
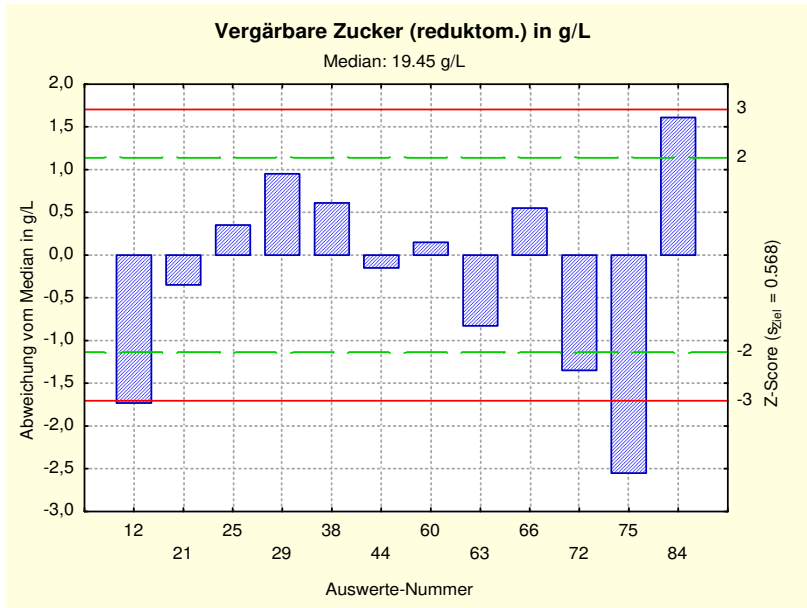
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymat.	Reduktometrisch
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	34	12
Minimalwert	18,04	16,90
Mittelwert	18,745	19,222
Median	18,600	19,450
Maximalwert	21,00	21,06
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,559	1,200
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,096	0,346
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,678	0,704
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,545	0,568
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,584	0,584
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,82	1,70
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,02	2,11
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,96	2,05
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,14	0,49
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,18	0,61
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,16	0,59

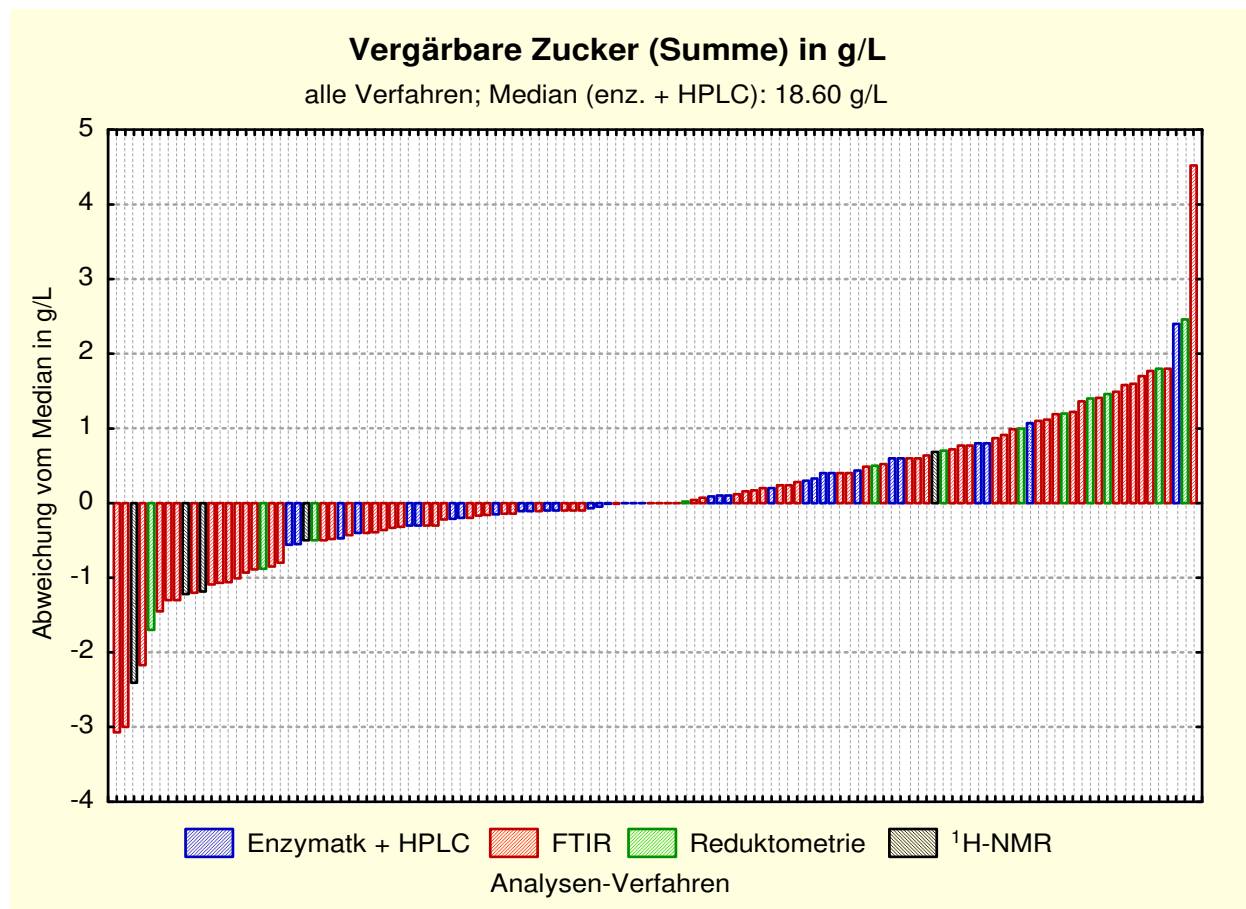
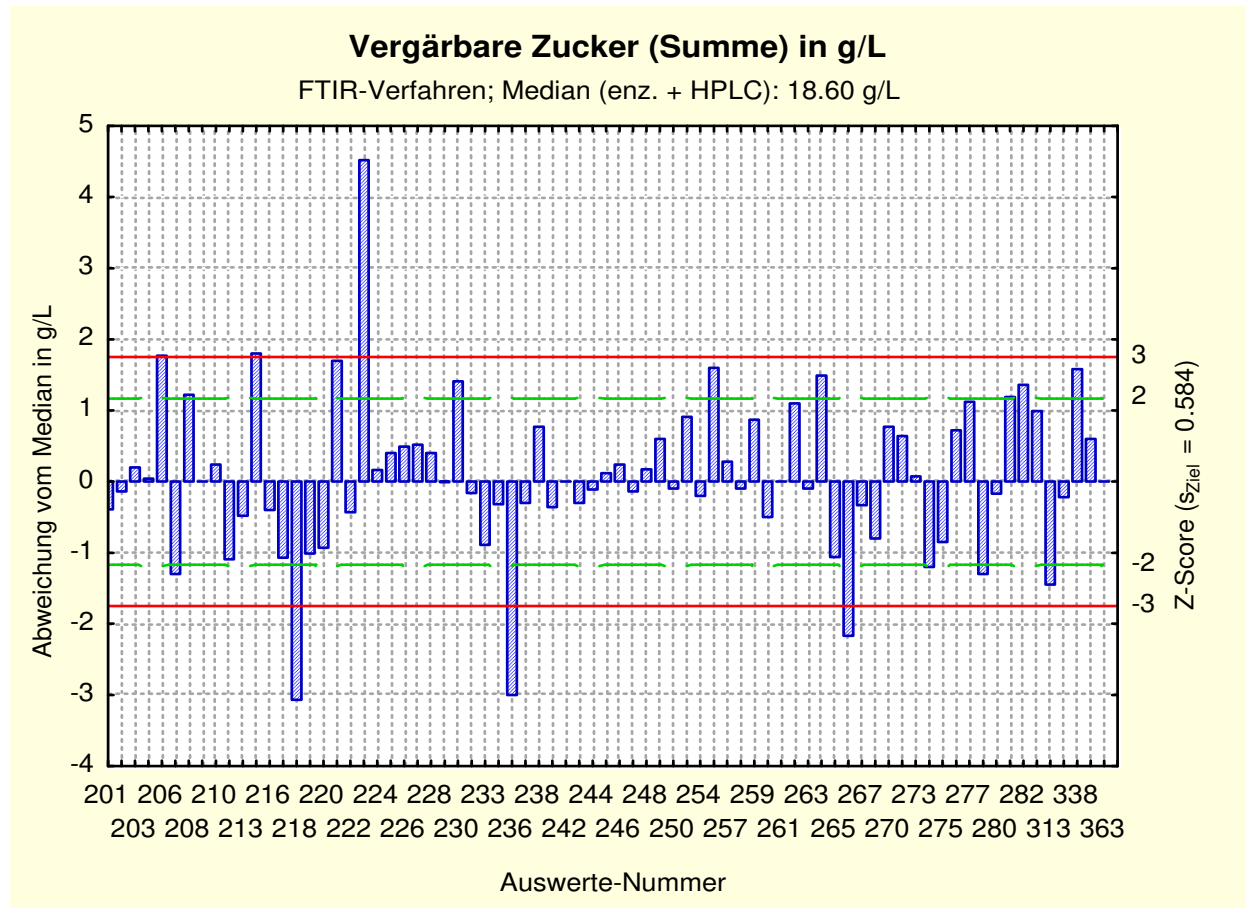
**5.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	17,720	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	20,560	0,802
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	9	19,171	1,034
	reduktometrische Verfahren	12	19,274	1,248
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	25	18,650	0,408
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	18,838	0,635
	enzymatische und HPLC-Verfahren	34	18,678	0,421
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	72	19,780	1,035
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	75	18,678	0,946
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	17,606	1,148









## 5.5 Glucose [g/L]

### 5.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	8,06	0,180	0,55	0,70	
02	enzymat. Hand	7,76	-0,120	-0,37	-0,47	
05	enzymat., autom.	8,64	0,760	2,33	2,97	
06	enzymat., autom.	7,90	0,020	0,06	0,08	
07	enzymat. Hand	7,95	0,070	0,21	0,27	
08	HPLC	8,67	0,790	2,42	3,09	
10	enzymat. Hand	7,84	-0,040	-0,12	-0,16	
11	HPLC	10,20	2,320	7,10	9,07	(**)
12	enzymat., autom.	7,96	0,080	0,24	0,31	
13	HPLC	7,80	-0,080	-0,24	-0,31	
14	enzymat., autom.	7,92	0,040	0,12	0,16	
16	enzymat., autom.	7,88	0,000	0,00	0,00	
17	enzymat., autom.	7,83	-0,052	-0,16	-0,20	
20	enzymat., autom.	7,75	-0,130	-0,40	-0,51	
22	HPLC	7,61	-0,270	-0,83	-1,06	
23	HPLC	7,81	-0,070	-0,21	-0,27	
24	NMR	7,78	-0,100	-0,31	-0,39	
27	enzymat., autom.	7,99	0,110	0,34	0,43	
28	HPLC	7,82	-0,060	-0,18	-0,23	
31	enzymat., autom.	7,96	0,080	0,24	0,31	
36	enzymat., autom.	7,30	-0,580	-1,78	-2,27	
39	enzymat., autom.	8,07	0,190	0,58	0,74	
40	HPLC	7,60	-0,280	-0,86	-1,10	
41	enzymat., autom.	8,07	0,189	0,58	0,74	
42	enzymat., autom.	8,10	0,220	0,67	0,86	
43	enzymat., autom.	8,04	0,156	0,48	0,61	
45	enzymat., autom.	7,88	0,005	0,02	0,02	
48	enzymat., autom.	7,70	-0,180	-0,55	-0,70	
50	enzymat., autom.	7,85	-0,030	-0,09	-0,12	
53	enzymat., autom.	8,13	0,250	0,77	0,98	
56	enzymat., autom.	7,96	0,080	0,24	0,31	
62	enzymat., autom.	7,83	-0,050	-0,15	-0,20	
68	enzymat., autom.	8,03	0,150	0,46	0,59	
81	enzymat. Hand	7,66	-0,220	-0,67	-0,86	
85	HPLC	7,46	-0,420	-1,29	-1,64	
92	HPLC	7,68	-0,200	-0,61	-0,78	
98	HPLC	7,80	-0,080	-0,24	-0,31	
107	NMR	7,33	-0,553	-1,69	-2,16	
108	NMR	7,30	-0,577	-1,77	-2,26	
109	NMR	6,80	-1,081	-3,31	-4,23	
110	NMR	8,11	0,229	0,70	0,90	

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

### 5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	8,66	0,780	2,39	1,91	
202	FTIR	8,58	0,700	2,14	1,72	
203	FTIR	8,69	0,810	2,48	1,99	
204	FTIR	8,84	0,960	2,94	2,35	
206	FTIR	9,19	1,310	4,01	3,21	
207	FTIR	8,10	0,220	0,67	0,54	
208	FTIR	8,75	0,870	2,66	2,13	
209	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
210	FTIR	8,14	0,260	0,80	0,64	
212	FTIR	8,44	0,560	1,71	1,37	
213	FTIR	8,60	0,720	2,20	1,76	
214	FTIR	9,21	1,330	4,07	3,26	
216	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
217	FTIR	8,60	0,720	2,20	1,76	
218	FTIR	7,40	-0,480	-1,47	-1,18	
219	FTIR	8,51	0,630	1,93	1,54	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	8,06	0,180	0,55	0,44	
221	FTIR	10,80	2,920	8,94	7,16	(**)
222	FTIR	8,39	0,510	1,56	1,25	
223	FTIR	10,71	2,830	8,66	6,94	(**)
224	FTIR	8,21	0,330	1,01	0,81	
225	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
226	FTIR	8,49	0,610	1,87	1,50	
227	FTIR	9,13	1,250	3,83	3,06	
228	FTIR	8,80	0,920	2,82	2,25	
229	FTIR	9,23	1,350	4,13	3,31	
230	FTIR	9,62	1,740	5,33	4,26	
231	FTIR	8,73	0,850	2,60	2,08	
233	FTIR	8,29	0,410	1,25	1,00	
235	FTIR	8,55	0,670	2,05	1,64	
236	FTIR	8,30	0,420	1,29	1,03	
237	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
238	FTIR	10,43	2,550	7,81	6,25	(**)
241	FTIR	8,62	0,740	2,27	1,81	
242	FTIR	8,30	0,420	1,29	1,03	
243	FTIR	8,00	0,120	0,37	0,29	
244	FTIR	8,96	1,080	3,31	2,65	
245	FTIR	8,48	0,600	1,84	1,47	
246	FTIR	8,28	0,400	1,22	0,98	
247	FTIR	8,86	0,980	3,00	2,40	
248	FTIR	9,11	1,230	3,76	3,01	
249	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
250	FTIR	8,69	0,810	2,48	1,99	
251	FTIR	8,48	0,600	1,84	1,47	
254	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
256	FTIR	8,70	0,820	2,51	2,01	
257	FTIR	9,25	1,370	4,19	3,36	
258	FTIR	8,70	0,820	2,51	2,01	
259	FTIR	9,20	1,320	4,04	3,24	
260	FTIR	9,20	1,320	4,04	3,24	
261	FTIR	8,00	0,120	0,37	0,29	
262	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
263	FTIR	8,40	0,520	1,59	1,27	
264	FTIR	9,22	1,340	4,10	3,28	
265	FTIR	8,31	0,430	1,32	1,05	
266	FTIR	6,44	-1,440	-4,41	-3,53	
267	FTIR	8,30	0,420	1,29	1,03	
269	FTIR	8,90	1,020	3,12	2,50	
270	FTIR	8,27	0,390	1,19	0,96	
271	FTIR	9,11	1,230	3,76	3,01	
273	FTIR	8,23	0,350	1,07	0,86	
274	FTIR	8,70	0,820	2,51	2,01	
275	FTIR	8,98	1,100	3,37	2,70	
276	FTIR	9,70	1,820	5,57	4,46	
277	FTIR	9,75	1,870	5,72	4,58	
278	FTIR	7,90	0,020	0,06	0,05	
280	FTIR	8,95	1,070	3,28	2,62	
281	FTIR	9,67	1,790	5,48	4,39	
282	FTIR	9,18	1,300	3,98	3,19	
283	FTIR	8,68	0,800	2,45	1,96	
313	FTIR	7,69	-0,190	-0,58	-0,47	
322	FTIR	8,26	0,380	1,16	0,93	
338	FTIR	8,54	0,660	2,02	1,62	
349	FTIR	9,00	1,120	3,43	2,75	
363	FTIR	8,40	0,520	1,59	1,27	

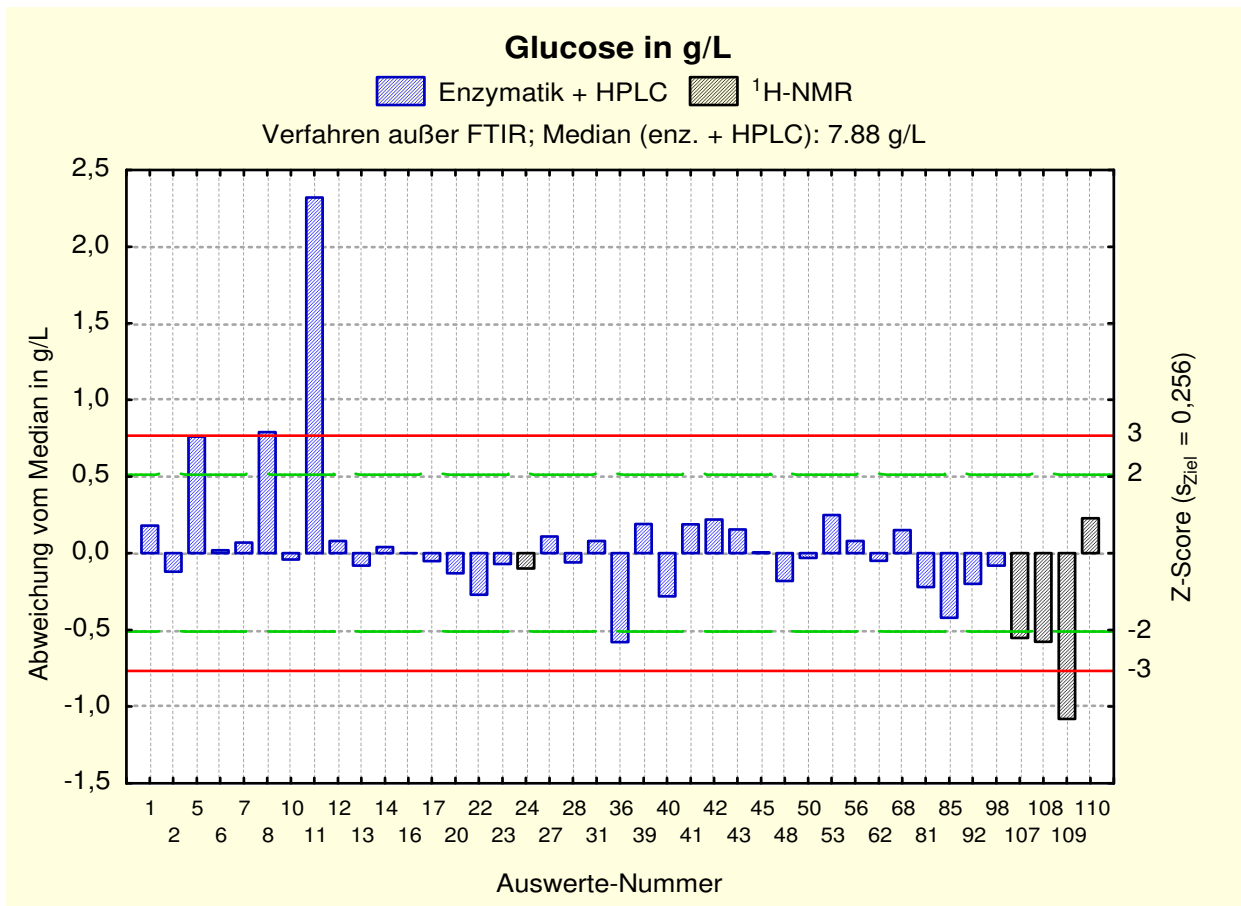
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**5.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

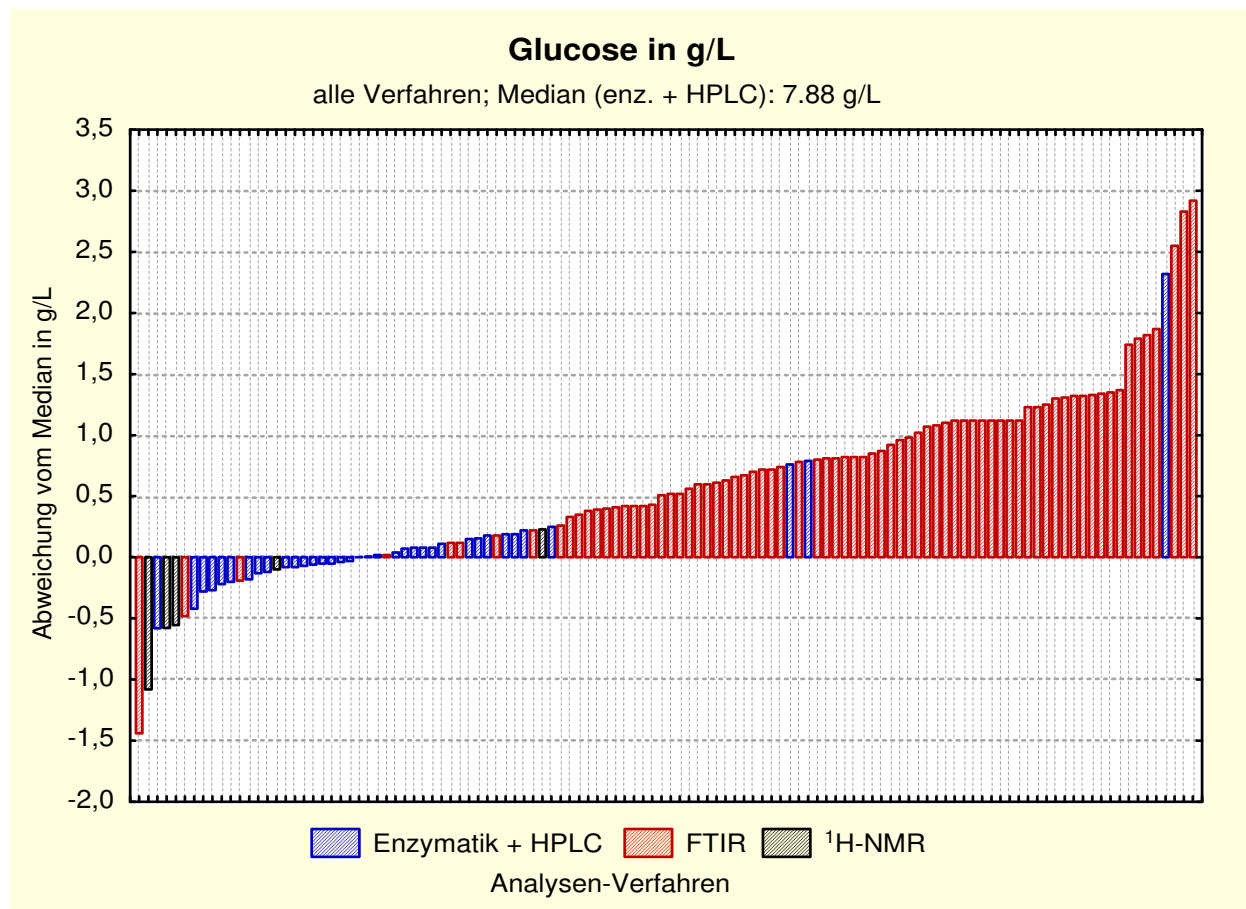
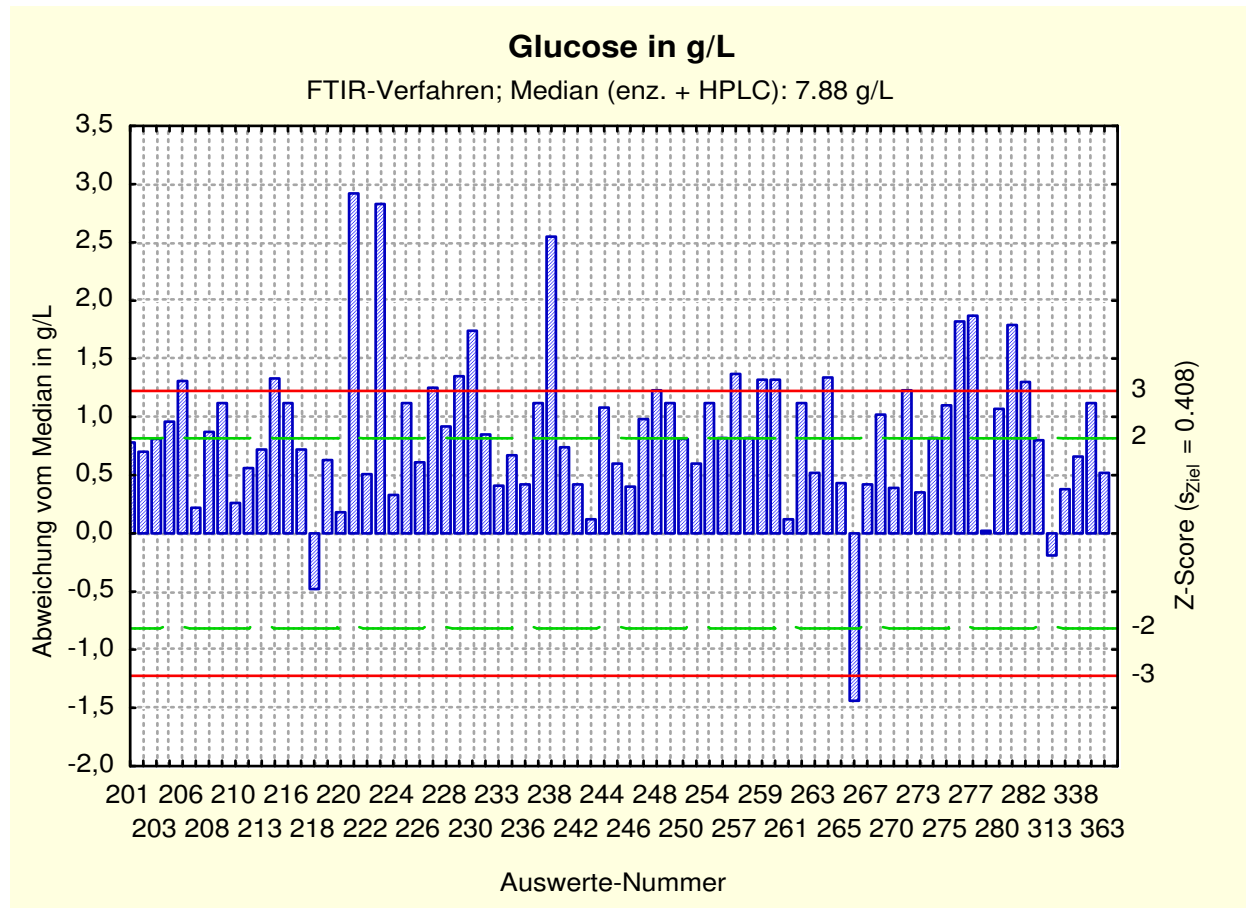
Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	36	35
Minimalwert	7,30	7,30
Mittelwert	7,959	7,895
Median	7,883	7,880
Maximalwert	10,20	8,67
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,463	0,262
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,077	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,327	0,327
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,256	0,256
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,408	0,408
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,42	0,80
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,81	1,03
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,14	0,64
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,24	0,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,30	0,17
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,19	0,11

**5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	10	7,809	0,297
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	7,940	0,148
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	5	7,854	0,178
	herkömmliche Verfahren	36	7,888	0,199
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	8,719	0,498
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	7,464	0,568







## 5.6 Fructose [g/L]

### 5.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	10,67	-0,030	-0,07	-0,09	
02	enzymat. Hand	10,60	-0,100	-0,24	-0,30	
05	enzymat., autom.	10,98	0,280	0,66	0,84	
06	enzymat., autom.	10,70	0,000	0,00	0,00	
07	enzymat. Hand	10,69	-0,010	-0,02	-0,03	
08	HPLC	11,00	0,300	0,71	0,90	
10	enzymat. Hand	10,65	-0,050	-0,12	-0,15	
11	HPLC	10,80	0,100	0,24	0,30	
12	enzymat., autom.	10,87	0,170	0,40	0,51	
13	HPLC	10,90	0,200	0,47	0,60	
14	enzymat., autom.	10,70	0,000	0,00	0,00	
16	enzymat., autom.	10,70	0,000	0,00	0,00	
17	enzymat., autom.	10,69	-0,015	-0,04	-0,05	
20	enzymat., autom.	10,30	-0,400	-0,94	-1,21	
22	HPLC	10,78	0,080	0,19	0,24	
23	HPLC	10,78	0,080	0,19	0,24	
24	NMR	10,33	-0,370	-0,87	-1,12	
27	enzymat., autom.	10,70	0,000	0,00	0,00	
28	HPLC	11,43	0,730	1,72	2,20	
31	enzymat., autom.	11,42	0,720	1,70	2,17	
36	enzymat., autom.	11,00	0,300	0,71	0,90	
39	enzymat., autom.	10,93	0,230	0,54	0,69	
40	HPLC	10,70	0,000	0,00	0,00	
41	enzymat., autom.	11,06	0,364	0,86	1,10	
42	enzymat., autom.	10,80	0,100	0,24	0,30	
43	enzymat., autom.	11,00	0,297	0,70	0,90	
45	enzymat., autom.	10,62	-0,080	-0,19	-0,24	
48	enzymat., autom.	10,60	-0,100	-0,24	-0,30	
50	enzymat., autom.	10,50	-0,200	-0,47	-0,60	
53	enzymat., autom.	11,25	0,550	1,30	1,66	
56	enzymat., autom.	10,53	-0,170	-0,40	-0,51	
62	enzymat., autom.	10,30	-0,400	-0,94	-1,21	
68	enzymat., autom.	10,88	0,180	0,42	0,54	
81	enzymat. Hand	10,38	-0,320	-0,76	-0,96	
85	HPLC	10,50	-0,200	-0,47	-0,60	
92	HPLC	10,77	0,070	0,17	0,21	
107	NMR	10,00	-0,697	-1,64	-2,10	
108	NMR	10,06	-0,640	-1,51	-1,93	
109	NMR	9,40	-1,305	-3,08	-3,93	
110	NMR	11,12	0,419	0,99	1,26	

### 5.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	9,55	-1,150	-2,71	-3,47	
202	FTIR	9,88	-0,820	-1,94	-2,47	
203	FTIR	10,11	-0,590	-1,39	-1,78	
204	FTIR	9,80	-0,900	-2,12	-2,71	
206	FTIR	11,18	0,480	1,13	1,45	
207	FTIR	9,20	-1,500	-3,54	-4,52	
208	FTIR	11,07	0,370	0,87	1,12	
209	FTIR	9,60	-1,100	-2,60	-3,32	
210	FTIR	10,70	0,000	0,00	0,00	
212	FTIR	9,07	-1,630	-3,85	-4,91	
213	FTIR	9,52	-1,180	-2,79	-3,56	
214	FTIR	11,19	0,490	1,16	1,48	
216	FTIR	9,20	-1,500	-3,54	-4,52	
217	FTIR	8,93	-1,770	-4,18	-5,33	(**)
218	FTIR	8,13	-2,570	-6,07	-7,75	(**)
219	FTIR	9,08	-1,620	-3,82	-4,88	
220	FTIR	9,61	-1,090	-2,57	-3,29	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	9,50	-1,200	-2,83	-3,62	
222	FTIR	9,78	-0,920	-2,17	-2,77	
223	FTIR	12,41	1,710	4,04	5,15	(**)
224	FTIR	10,55	-0,150	-0,35	-0,45	
225	FTIR	10,00	-0,700	-1,65	-2,11	
226	FTIR	10,60	-0,100	-0,24	-0,30	
227	FTIR	9,99	-0,710	-1,68	-2,14	
228	FTIR	10,20	-0,500	-1,18	-1,51	
229	FTIR	9,36	-1,340	-3,16	-4,04	
230	FTIR	10,39	-0,310	-0,73	-0,93	
231	FTIR	9,71	-0,990	-2,34	-2,98	
233	FTIR	9,42	-1,280	-3,02	-3,86	
235	FTIR	9,73	-0,970	-2,29	-2,92	
236	FTIR	7,30	-3,400	-8,03	-10,25	(**)
237	FTIR	9,30	-1,400	-3,30	-4,22	
238	FTIR	8,94	-1,760	-4,15	-5,30	(**)
241	FTIR	9,62	-1,080	-2,55	-3,25	
242	FTIR	10,30	-0,400	-0,94	-1,21	
243	FTIR	10,30	-0,400	-0,94	-1,21	
244	FTIR	9,53	-1,170	-2,76	-3,53	
245	FTIR	10,24	-0,460	-1,09	-1,39	
246	FTIR	10,56	-0,140	-0,33	-0,42	
247	FTIR	9,60	-1,100	-2,60	-3,32	
248	FTIR	9,66	-1,040	-2,45	-3,13	
249	FTIR	10,20	-0,500	-1,18	-1,51	
250	FTIR	9,81	-0,890	-2,10	-2,68	
251	FTIR	11,03	0,330	0,78	0,99	
254	FTIR	9,40	-1,300	-3,07	-3,92	
256	FTIR	11,50	0,800	1,89	2,41	
257	FTIR	9,63	-1,070	-2,53	-3,22	
258	FTIR	9,80	-0,900	-2,12	-2,71	
259	FTIR	10,27	-0,430	-1,01	-1,30	
260	FTIR	8,90	-1,800	-4,25	-5,42	(**)
261	FTIR	10,60	-0,100	-0,24	-0,30	
262	FTIR	10,70	0,000	0,00	0,00	
263	FTIR	10,10	-0,600	-1,42	-1,81	
264	FTIR	10,87	0,170	0,40	0,51	
265	FTIR	9,23	-1,470	-3,47	-4,43	
266	FTIR	9,99	-0,710	-1,68	-2,14	
267	FTIR	9,97	-0,730	-1,72	-2,20	
269	FTIR	8,90	-1,800	-4,25	-5,42	(**)
270	FTIR	11,10	0,400	0,94	1,21	
271	FTIR	10,13	-0,570	-1,35	-1,72	
273	FTIR	10,44	-0,260	-0,61	-0,78	
274	FTIR	8,70	-2,000	-4,72	-6,03	(**)
275	FTIR	8,77	-1,930	-4,56	-5,82	(**)
276	FTIR	9,62	-1,080	-2,55	-3,25	
277	FTIR	9,97	-0,730	-1,72	-2,20	
278	FTIR	9,40	-1,300	-3,07	-3,92	
280	FTIR	9,48	-1,220	-2,88	-3,68	
281	FTIR	10,12	-0,580	-1,37	-1,75	
282	FTIR	10,78	0,080	0,19	0,24	
283	FTIR	10,91	0,210	0,50	0,63	
313	FTIR	9,46	-1,240	-2,93	-3,74	
322	FTIR	10,12	-0,580	-1,37	-1,75	
338	FTIR	11,64	0,940	2,22	2,83	
349	FTIR	10,20	-0,500	-1,18	-1,51	
363	FTIR	10,20	-0,500	-1,18	-1,51	

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

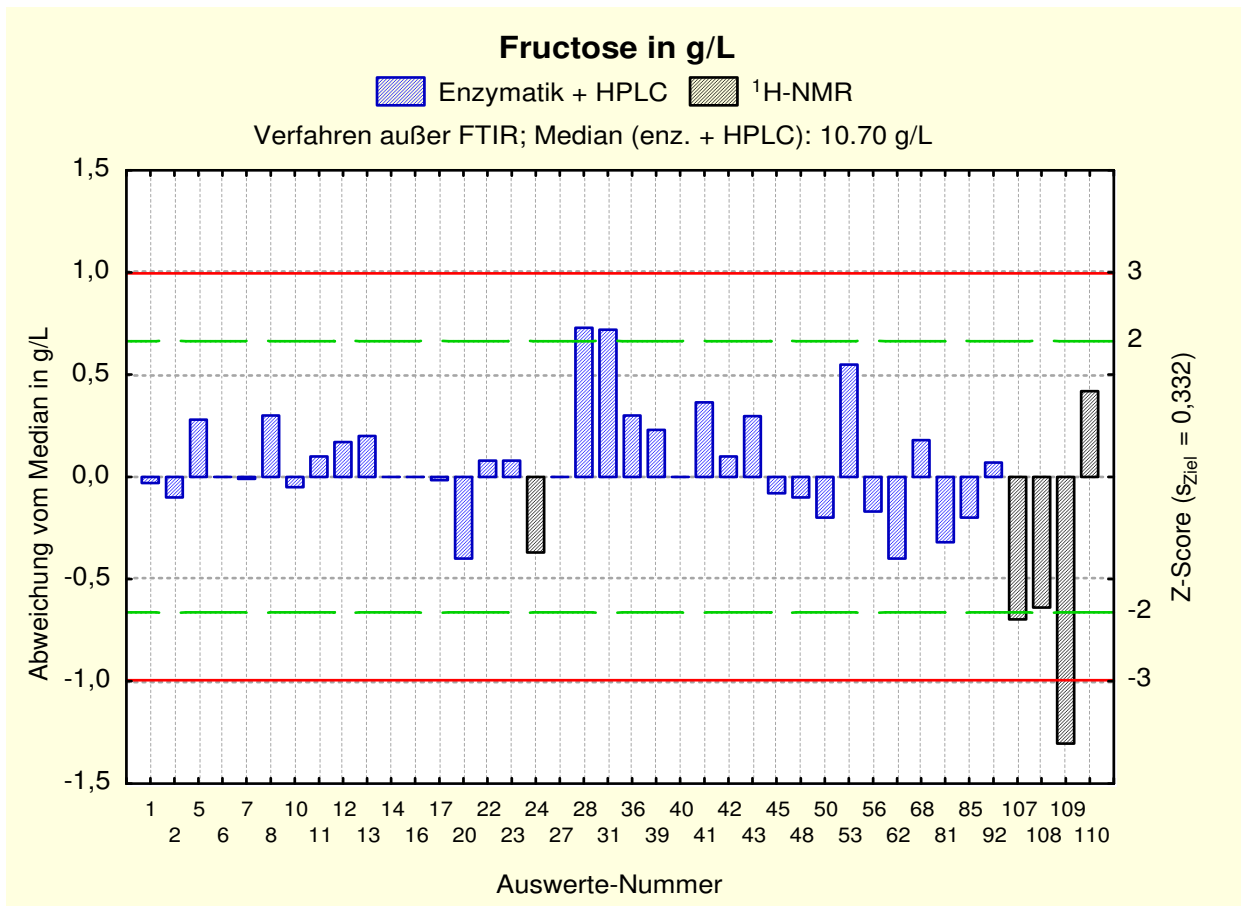
**5.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

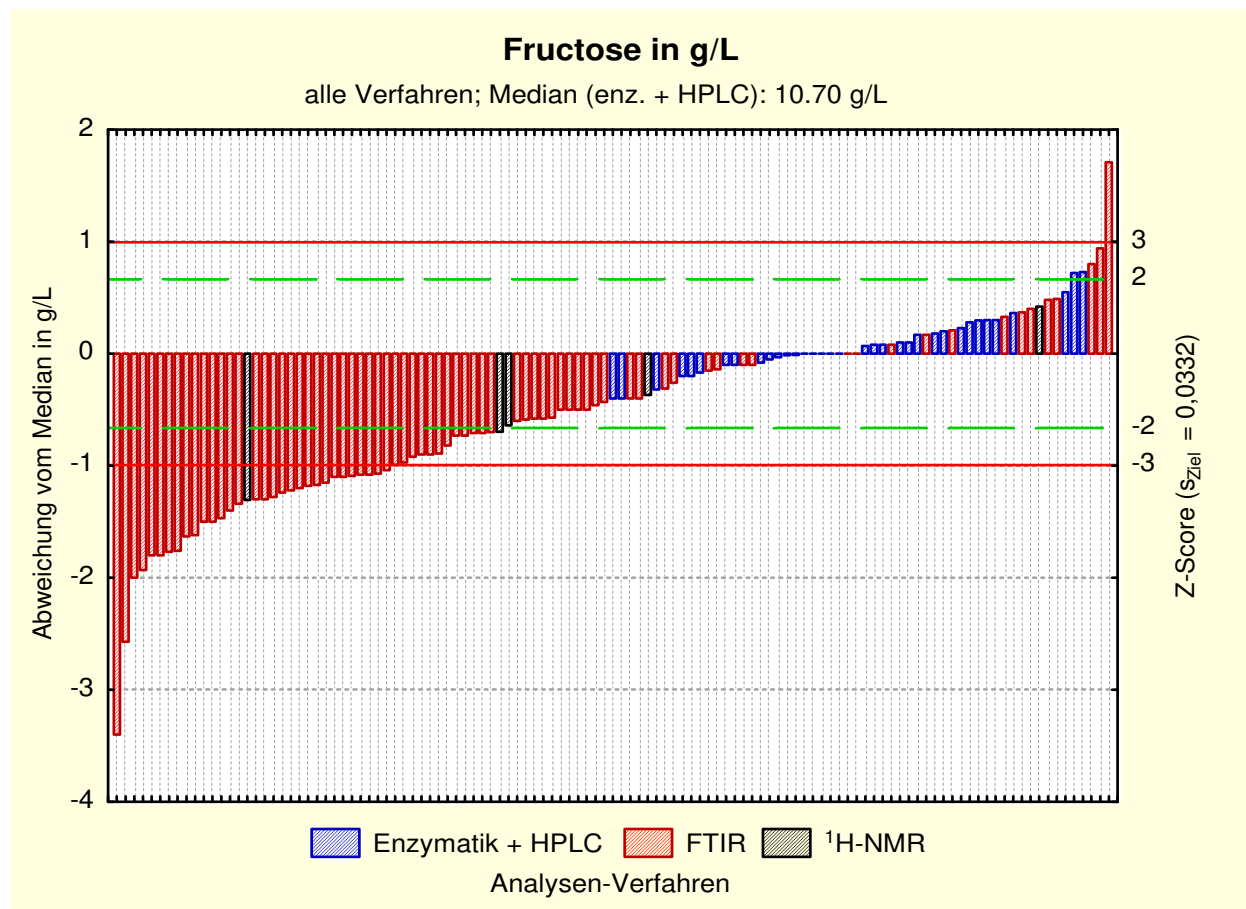
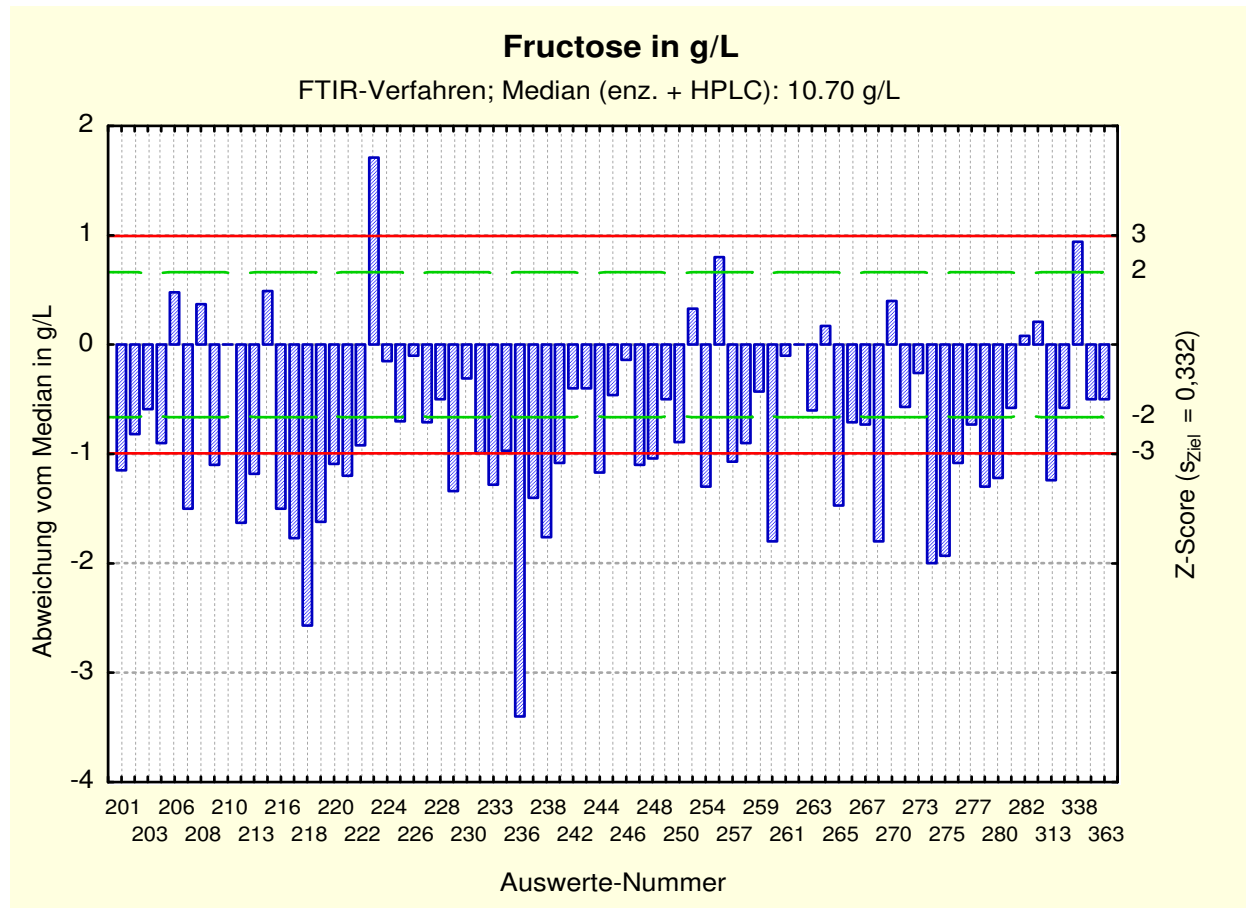
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	35
Minimalwert	10,30
Mittelwert	10,776
Median	10,700
Maximalwert	11,43
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,265
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,045
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,424
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,332
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>ÜFTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	(0,330)
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,62
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,80
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> )	(0,80)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,11
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,13
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	0,14

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

**5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	9	10,813	0,162
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	10,780	0,273
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	5	10,607	0,121
	herkömmliche Verfahren	35	10,762	0,233
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	9,923	0,742
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	10,172	0,639





## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Ergebnisse enzymatischer Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,42	-0,00	-0,02	
02	enzymat. Hand	5,42	-0,00	-0,02	
05	enzymat. autom.	5,64	0,21	0,90	
06	enzymat. autom.	5,43	0,00	0,02	
07	enzymat. Hand	5,20	-0,22	-0,95	
08	HPLC	5,29	-0,13	-0,57	
11	enzymat. autom.	5,69	0,27	1,11	
12	enzymat. Hand	5,37	-0,05	-0,23	
13	HPLC	7,20	1,78	7,46	(****)
16	enzymat. autom.	7,09	1,67	7,00	(**)
22	HPLC	7,77	2,34	9,86	(****)
23	HPLC	7,09	1,67	7,00	(****)
24	NMR	5,29	-0,13	-0,57	
28	HPLC	5,95	0,53	2,21	
56	enzymat. autom.	5,67	0,25	1,03	
81	enzymat. Hand	4,47	-0,96	-4,01	(***)
85	HPLC	5,62	0,20	0,82	
90	enzymat. autom.	5,77	0,34	1,45	
92	HPLC	7,23	1,81	7,59	(****)
107	NMR	5,83	0,40	1,69	
108	NMR	4,97	-0,45	-1,90	
109	NMR	4,84	-0,58	-2,45	
110	NMR	5,74	0,32	1,33	

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

(\*\*\*) Dieser Wert wurde als Ausreißer nach Grubbs bei der zweiten Wiederholung nicht berücksichtigt.

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

### 5.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten	ber. Daten
		Z <sub>Max</sub> = 5,0	Z <sub>Max</sub> = 4,0
Gültige Werte	11	10	9
Minimalwert	4,5	4,5	5,2
Mittelwert	5,56	5,41	5,51
Median	5,43	5,42	5,43
Maximalwert	7,1	5,8	5,8
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,619	0,374	0,187
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,187	0,118	0,062
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,238	0,238	0,238
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)			
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,348	0,348	0,348
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,60	1,57	0,79
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	1,78	1,07	0,57
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,78	0,50	0,26
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,54	0,34	0,18

Bewertungsbasis der Laborergebnisse sind Median und Zielstandardabweichung auf der Basis Z<sub>Max</sub> = 5,0

### 5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	5,709	0,226
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	5,235	0,318
	enzymatische Verfahren	11	5,512	0,293
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	6,634	1,013
	herkömmliche Verfahren	18	5,921	0,929
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	68	5,795	0,507
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	5,335	0,501

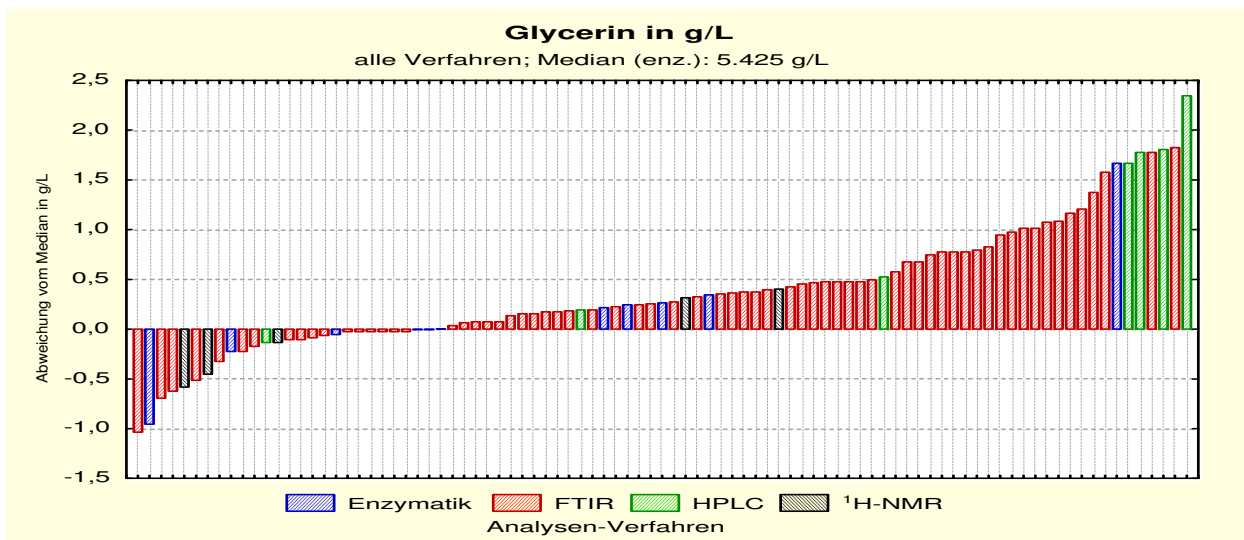
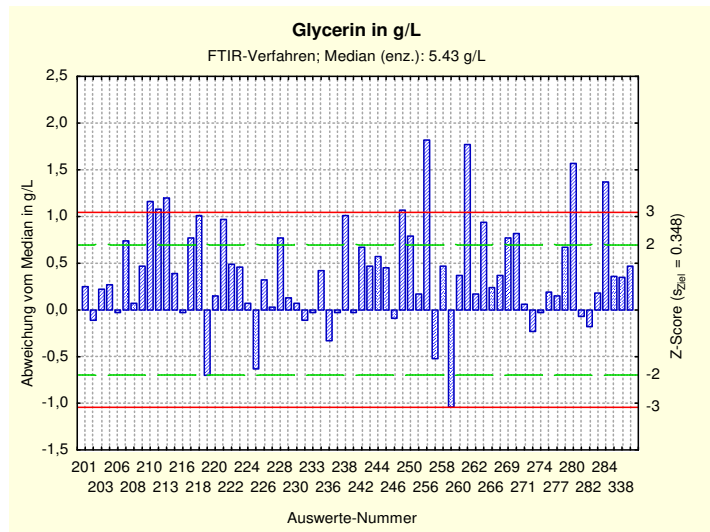
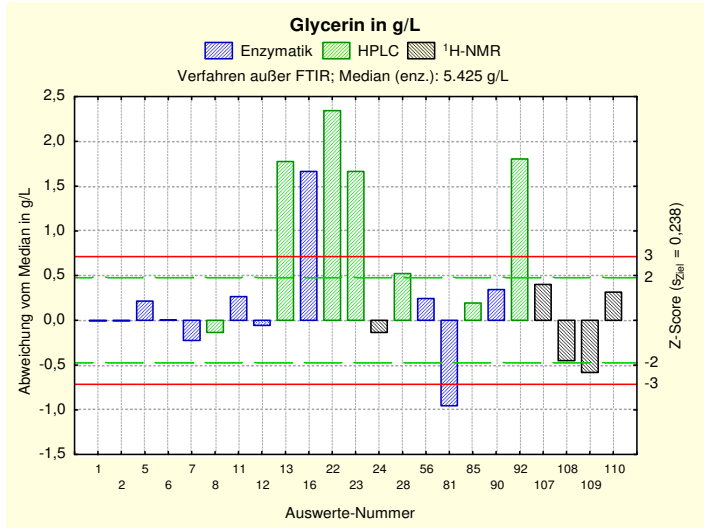
**5.7.4 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,68	0,25	1,05	0,72	
202	FTIR	5,32	-0,11	-0,46	-0,32	
203	FTIR	5,65	0,22	0,92	0,63	
204	FTIR	5,70	0,27	1,13	0,78	
206	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
207	FTIR	6,17	0,74	3,11	2,13	
208	FTIR	5,50	0,07	0,29	0,20	
209	FTIR	5,90	0,47	1,97	1,35	
210	FTIR	6,59	1,16	4,87	3,33	
212	FTIR	6,51	1,08	4,54	3,10	
213	FTIR	6,63	1,20	5,04	3,45	
214	FTIR	5,82	0,39	1,64	1,12	
216	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
217	FTIR	6,20	0,77	3,23	2,21	
218	FTIR	6,44	1,01	4,24	2,90	
219	FTIR	4,73	-0,70	-2,94	-2,01	
220	FTIR	5,58	0,15	0,63	0,43	
221	FTIR	6,40	0,97	4,07	2,79	
222	FTIR	5,92	0,49	2,06	1,41	
223	FTIR	5,89	0,46	1,93	1,32	
224	FTIR	5,50	0,07	0,29	0,20	
225	FTIR	4,80	-0,63	-2,65	-1,81	
226	FTIR	5,75	0,32	1,34	0,92	
227	FTIR	5,46	0,03	0,13	0,09	
228	FTIR	6,20	0,77	3,23	2,21	
229	FTIR	5,56	0,13	0,55	0,37	
230	FTIR	5,50	0,07	0,29	0,20	
231	FTIR	5,32	-0,11	-0,46	-0,32	
233	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
235	FTIR	5,85	0,42	1,76	1,21	
236	FTIR	5,10	-0,33	-1,39	-0,95	
237	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
238	FTIR	6,44	1,01	4,24	2,90	
241	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
242	FTIR	6,10	0,67	2,81	1,93	
243	FTIR	5,90	0,47	1,97	1,35	
244	FTIR	6,00	0,57	2,39	1,64	
245	FTIR	5,88	0,45	1,89	1,29	
246	FTIR	5,34	-0,09	-0,38	-0,26	
249	FTIR	6,50	1,07	4,49	3,07	
250	FTIR	6,22	0,79	3,32	2,27	
254	FTIR	5,60	0,17	0,71	0,49	
256	FTIR	7,25	1,82	7,64	5,23	(**)
257	FTIR	4,91	-0,52	-2,18	-1,49	
258	FTIR	5,90	0,47	1,97	1,35	
259	FTIR	4,39	-1,04	-4,37	-2,99	
260	FTIR	5,80	0,37	1,55	1,06	
261	FTIR	7,20	1,77	7,43	5,09	(**)
262	FTIR	5,60	0,17	0,71	0,49	
265	FTIR	6,37	0,94	3,95	2,70	
266	FTIR	5,67	0,24	1,01	0,69	
267	FTIR	5,80	0,37	1,55	1,06	
269	FTIR	6,20	0,77	3,23	2,21	
270	FTIR	6,25	0,82	3,44	2,36	
271	FTIR	5,49	0,06	0,25	0,17	
273	FTIR	5,20	-0,23	-0,97	-0,66	
274	FTIR	5,40	-0,03	-0,13	-0,09	
276	FTIR	5,62	0,19	0,80	0,55	
277	FTIR	5,58	0,15	0,63	0,43	
278	FTIR	6,10	0,67	2,81	1,93	
280	FTIR	7,00	1,57	6,59	4,51	
281	FTIR	5,36	-0,07	-0,29	-0,20	
282	FTIR	5,25	-0,18	-0,76	-0,52	
283	FTIR	5,61	0,18	0,76	0,52	
284	FTIR	6,80	1,37	5,75	3,94	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
322	FTIR	5,79	0,36	1,51	1,03	
338	FTIR	5,78	0,35	1,47	1,01	
349	FTIR	5,90	0,47	1,97	1,35	





## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,28	-0,010	-0,21	
02	potentiometr.	3,27	-0,020	-0,42	
04	potentiometr.	3,22	-0,070	-1,47	
05	potentiometr.	3,34	0,050	1,05	
06	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
07	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
08	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
10	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
11	potentiometr.	3,30	0,010	0,21	
12	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
13	potentiometr.	3,23	-0,060	-1,26	
14	potentiometr.	3,21	-0,080	-1,68	
16	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
17	potentiometr.	3,20	-0,090	-1,89	
20	potentiometr.	3,23	-0,063	-1,32	
22	potentiometr.	3,35	0,060	1,26	
23	potentiometr.	3,27	-0,020	-0,42	
24	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
27	potentiometr.	3,19	-0,097	-2,04	
28	potentiometr.	3,33	0,040	0,84	
29	potentiometr.	3,24	-0,050	-1,05	
31	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
38	potentiometr.	3,22	-0,070	-1,47	
39	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
40	potentiometr.	3,23	-0,060	-1,26	
41	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
42	potentiometr.	3,30	0,010	0,21	
43	potentiometr.	3,36	0,070	1,47	
44	potentiometr.	3,34	0,050	1,05	
45	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
50	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
53	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
55	potentiometr.	3,18	-0,110	-2,31	
56	potentiometr.	3,32	0,030	0,63	
60	potentiometr.	3,30	0,010	0,21	
62	potentiometr.	3,34	0,050	1,05	
63	potentiometr.	3,17	-0,120	-2,52	
66	potentiometr.	3,30	0,010	0,21	
68	potentiometr.	3,26	-0,030	-0,63	
72	potentiometr.	3,21	-0,080	-1,68	
75	potentiometr.	3,27	-0,020	-0,42	
80	potentiometr.	3,29	0,000	0,00	
81	potentiometr.	3,31	0,020	0,42	
84	potentiometr.	3,33	0,040	0,84	
92	potentiometr.	3,35	0,060	1,26	
98	potentiometr.	3,40	0,110	2,31	

### 5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	46	3,281	0,0520
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	3,272	0,0821

**5.8.3 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
202	FTIR	3,33	0,040	0,81	
203	FTIR	3,30	0,010	0,20	
204	FTIR	3,21	-0,080	-1,62	
206	FTIR	3,35	0,060	1,22	
207	FTIR	3,31	0,020	0,41	
208	FTIR	3,28	-0,010	-0,20	
209	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
210	FTIR	3,29	0,000	0,00	
212	FTIR	3,08	-0,210	-4,26	
213	FTIR	3,35	0,060	1,22	
214	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
216	FTIR	3,29	0,000	0,00	
217	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
218	FTIR	3,41	0,120	2,43	
219	FTIR	3,19	-0,100	-2,03	
220	FTIR	3,26	-0,030	-0,61	
221	FTIR	3,40	0,110	2,23	
222	FTIR	3,26	-0,030	-0,61	
223	FTIR	3,21	-0,080	-1,62	
224	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
225	FTIR	3,20	-0,090	-1,83	
226	FTIR	3,27	-0,020	-0,41	
227	FTIR	3,20	-0,090	-1,83	
228	FTIR	3,46	0,170	3,45	
229	FTIR	3,32	0,030	0,61	
230	FTIR	3,22	-0,070	-1,42	
231	FTIR	3,19	-0,100	-2,03	
233	FTIR	3,27	-0,020	-0,41	
235	FTIR	3,33	0,040	0,81	
236	FTIR	3,18	-0,110	-2,23	
237	FTIR	3,30	0,010	0,20	
238	FTIR	3,37	0,080	1,62	
241	FTIR	3,33	0,040	0,81	
242	FTIR	3,41	0,120	2,43	
243	FTIR	3,16	-0,130	-2,64	
244	FTIR	3,31	0,020	0,41	
245	FTIR	3,29	0,000	0,00	
246	FTIR	3,29	0,000	0,00	
247	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
249	FTIR	3,29	0,000	0,00	
250	FTIR	3,26	-0,030	-0,61	
251	FTIR	3,34	0,050	1,01	
254	FTIR	3,32	0,030	0,61	
255	FTIR	3,23	-0,060	-1,22	
256	FTIR	3,48	0,190	3,85	
257	FTIR	3,14	-0,150	-3,04	
258	FTIR	3,20	-0,090	-1,83	
259	FTIR	3,32	0,030	0,61	
260	FTIR	3,39	0,100	2,03	
261	FTIR	3,19	-0,100	-2,03	
262	FTIR	3,34	0,050	1,01	
263	FTIR	3,26	-0,030	-0,61	
264	FTIR	3,32	0,030	0,61	
265	FTIR	3,07	-0,220	-4,46	
266	FTIR	3,29	0,000	0,00	
267	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
268	FTIR	3,51	0,220	4,46	
269	FTIR	3,30	0,010	0,20	
270	FTIR	2,98	-0,310	-6,29	(**)
271	FTIR	3,24	-0,050	-1,01	
273	FTIR	3,22	-0,070	-1,42	
274	FTIR	3,45	0,160	3,25	
275	FTIR	3,35	0,060	1,22	

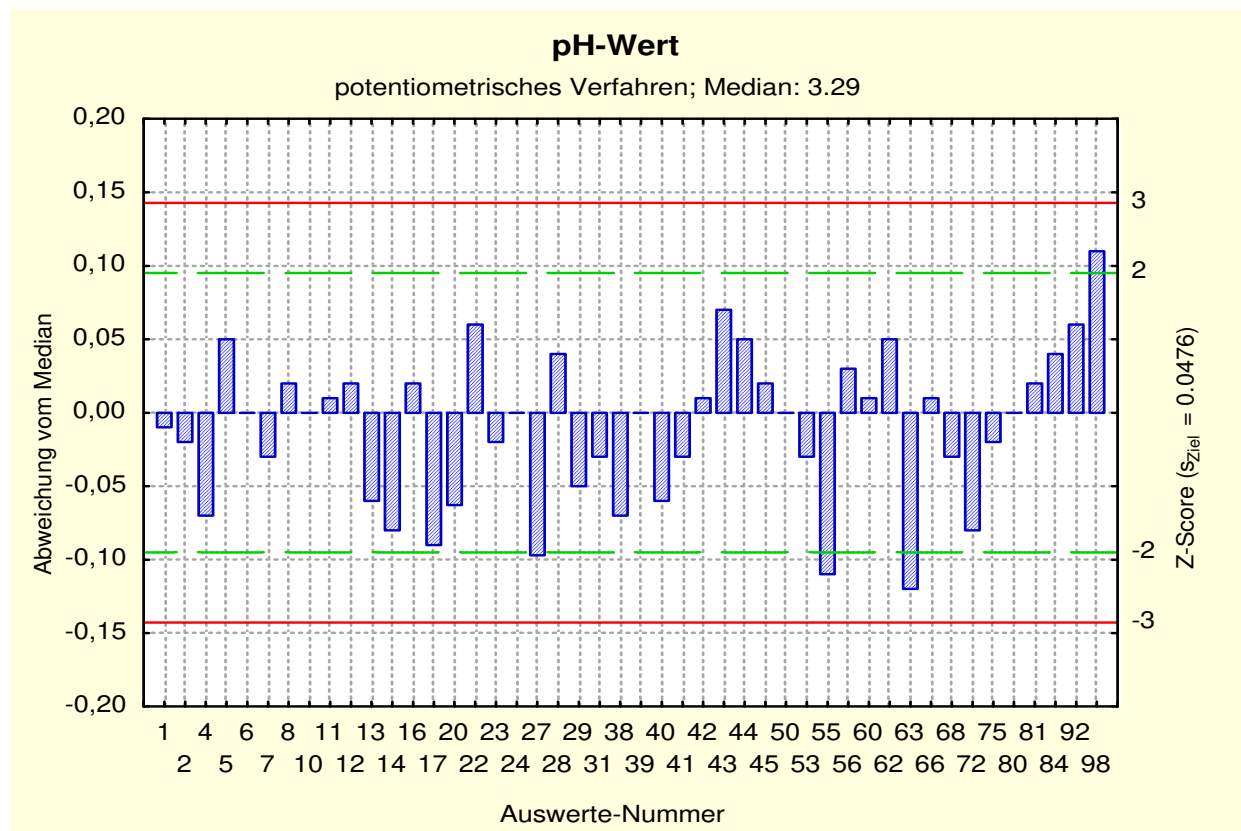
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der potentiometrischen Werte ab.

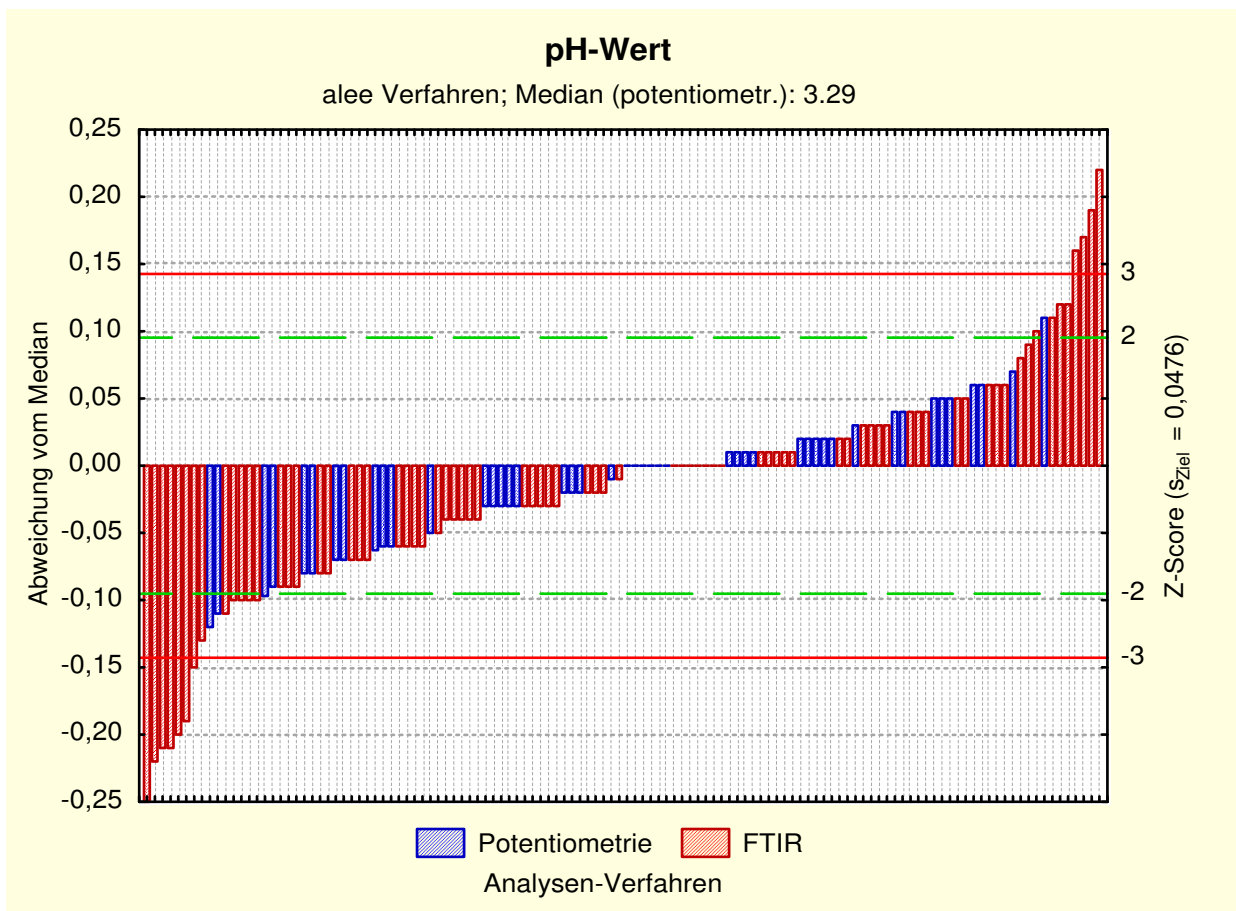
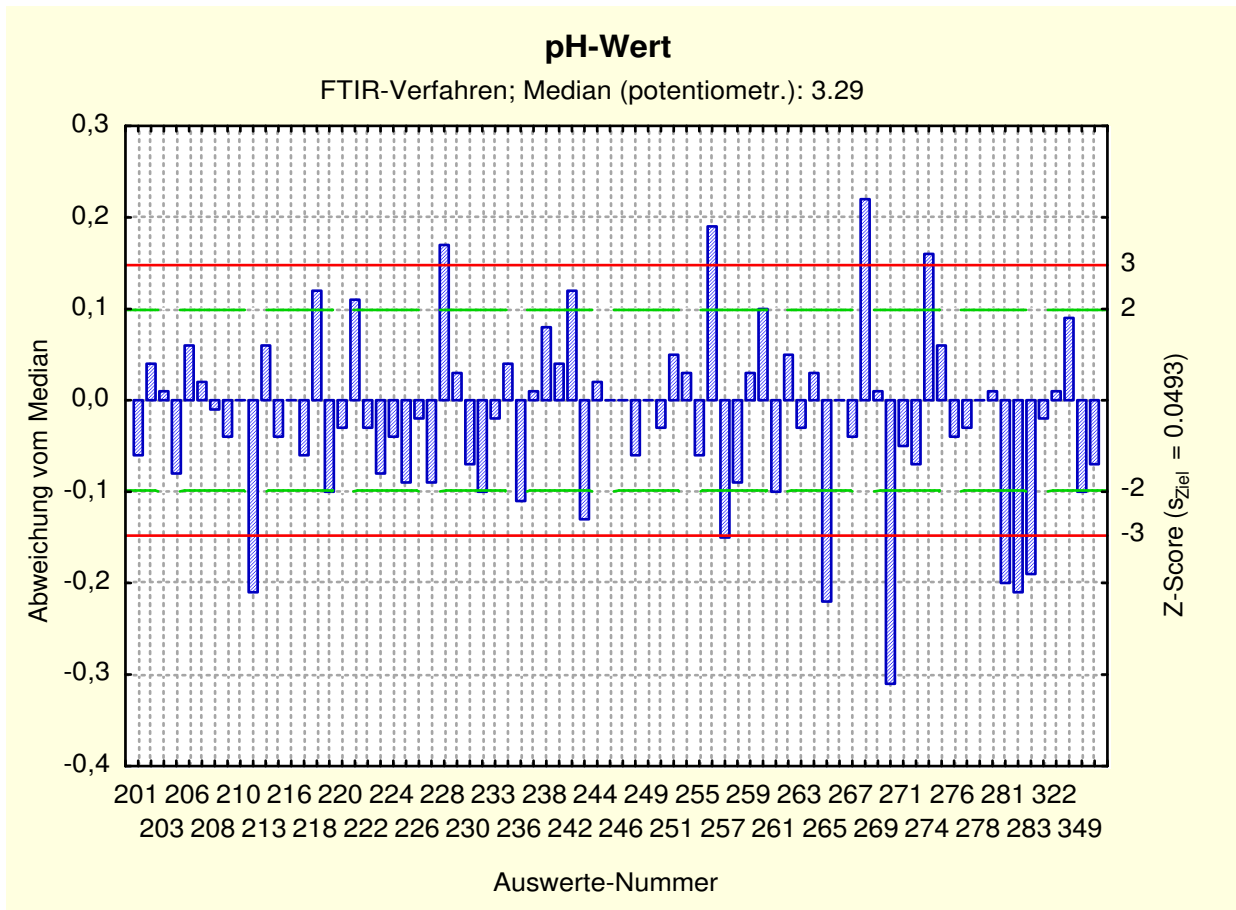
**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,25	-0,040	-0,81	
277	FTIR	3,26	-0,030	-0,61	
278	FTIR	3,29	0,000	0,00	
280	FTIR	3,30	0,010	0,20	
281	FTIR	3,09	-0,200	-4,06	
282	FTIR	3,08	-0,210	-4,26	
283	FTIR	3,10	-0,190	-3,85	
284	FTIR	3,27	-0,020	-0,41	
322	FTIR	3,30	0,010	0,20	
338	FTIR	3,38	0,090	1,83	
349	FTIR	3,19	-0,100	-2,03	
363	FTIR	3,22	-0,070	-1,42	

**5.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	46
Minimalwert	3,17
Mittelwert	3,280
Median	3,290
Maximalwert	3,40
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,0515
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,0076
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,0493
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,08
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,05
Quotient ( $u_M/s_H$ )	
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,16
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,15





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	7,34	-0,170	-0,54	-1,59	
02	LwK 5.2.1	7,51	0,000	0,00	0,00	
05	LwK 5.2.1	7,37	-0,140	-0,45	-1,31	
06	LwK 5.1	7,38	-0,130	-0,41	-1,21	
07	LwK 5.2.1	7,53	0,020	0,06	0,19	
08	LwK 5.2.1	7,61	0,100	0,32	0,93	
09	LwK 5.2.1	7,89	0,380	1,21	3,55	
10	LwK 5.2.1	7,51	0,000	0,00	0,00	
11	LwK 5.2.1	7,53	0,020	0,06	0,19	
12	LwK 5.1	7,32	-0,190	-0,61	-1,77	
13	LwK 5.1	7,70	0,190	0,61	1,77	
14	LwK 5.1	7,68	0,170	0,54	1,59	
16	LwK 5.1	7,65	0,140	0,45	1,31	
17	LwK 5.2.1	7,37	-0,140	-0,45	-1,31	
20	LwK 5.2.1	7,70	0,190	0,61	1,77	
21	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
22	LwK 5.1	7,40	-0,110	-0,35	-1,03	
23	LwK 5.1	7,30	-0,210	-0,67	-1,96	
24	LwK 5.1	7,70	0,190	0,61	1,77	
25	LwK 5.1	7,60	0,090	0,29	0,84	
27	LwK 5.2.1	7,68	0,170	0,54	1,59	
28	LwK 5.1	7,54	0,030	0,10	0,28	
29	LwK 5.1	7,60	0,090	0,29	0,84	
31	LwK 5.2.1	7,55	0,040	0,13	0,37	
35	LwK 5.2.1	7,40	-0,110	-0,35	-1,03	
38	LwK 5.1	7,63	0,120	0,38	1,12	
39	LwK 5.1	7,40	-0,110	-0,35	-1,03	
40	LwK 5.2.1	7,57	0,060	0,19	0,56	
41	LwK 5.1	7,51	0,000	0,00	0,00	
42	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
43	LwK 5.1	7,38	-0,130	-0,41	-1,21	
44	LwK 5.1	7,73	0,220	0,70	2,05	
45	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
48	LwK 5.1	7,60	0,090	0,29	0,84	
50	LwK 5.1	7,30	-0,210	-0,67	-1,96	
53	LwK 5.2.1	7,40	-0,110	-0,35	-1,03	
55	LwK 5.2.1	7,60	0,090	0,29	0,84	
56	LwK 5.2.1	7,51	0,000	0,00	0,00	
60	LwK 5.2.1	7,39	-0,120	-0,38	-1,12	
61	k. A.	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
62	LwK 5.2.1	7,68	0,170	0,54	1,59	
63	LwK 5.1	7,62	0,110	0,35	1,03	
66	LwK 5.1	7,30	-0,210	-0,67	-1,96	
68	LwK 5.1	7,48	-0,030	-0,10	-0,28	
72	LwK 5.1	7,62	0,110	0,35	1,03	
74	phot.aut.	7,60	0,090	0,29	0,84	
75	LwK 5.2.2	7,40	-0,110	-0,35	-1,03	
80	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
81	LwK 5.1	7,31	-0,200	-0,64	-1,87	
84	LwK 5.2.2	7,60	0,090	0,29	0,84	
92	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	
98	LwK 5.1	7,50	-0,010	-0,03	-0,09	

**5.9.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	7,61	0,100	0,32	0,69	
202	LwK 5.3	7,51	0,000	0,00	0,00	
203	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
204	LwK 5.3	7,91	0,400	1,28	2,76	
206	LwK 5.3	7,26	-0,250	-0,80	-1,72	
207	LwK 5.3	7,74	0,230	0,73	1,59	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
208	LwK 5.3	7,17	-0,340	-1,08	-2,34	
209	LwK 5.3	7,30	-0,210	-0,67	-1,45	
210	LwK 5.3	7,61	0,100	0,32	0,69	
212	LwK 5.3	7,16	-0,350	-1,12	-2,41	
213	LwK 5.3	7,38	-0,130	-0,41	-0,90	
214	LwK 5.3	7,64	0,130	0,41	0,90	
216	LwK 5.3	7,90	0,390	1,24	2,69	
217	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
218	LwK 5.3	7,50	-0,010	-0,03	-0,07	
219	LwK 5.3	7,74	0,230	0,73	1,59	
220	LwK 5.3	7,62	0,110	0,35	0,76	
221	LwK 5.3	7,80	0,290	0,92	2,00	
222	LwK 5.3	7,41	-0,100	-0,32	-0,69	
223	LwK 5.3	7,47	-0,040	-0,13	-0,28	
224	LwK 5.3	7,75	0,240	0,77	1,66	
225	LwK 5.3	7,40	-0,110	-0,35	-0,76	
226	LwK 5.3	7,62	0,110	0,35	0,76	
227	LwK 5.3	7,46	-0,050	-0,16	-0,34	
228	LwK 5.3	7,35	-0,160	-0,51	-1,10	
229	LwK 5.3	7,63	0,120	0,38	0,83	
230	LwK 5.3	7,36	-0,150	-0,48	-1,03	
231	LwK 5.3	7,79	0,280	0,89	1,93	
233	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
235	LwK 5.3	7,52	0,010	0,03	0,07	
236	LwK 5.3	7,30	-0,210	-0,67	-1,45	
237	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
238	LwK 5.3	7,70	0,190	0,61	1,31	
241	LwK 5.3	7,72	0,210	0,67	1,45	
242	LwK 5.3	7,50	-0,010	-0,03	-0,07	
243	LwK 5.3	7,46	-0,050	-0,16	-0,34	
244	LwK 5.3	7,44	-0,070	-0,22	-0,48	
245	LwK 5.3	7,75	0,240	0,77	1,66	
246	LwK 5.3	7,49	-0,020	-0,06	-0,14	
247	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
248	LwK 5.3	8,14	0,630	2,01	4,34	
249	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
250	LwK 5.3	7,52	0,010	0,03	0,07	
251	LwK 5.3	7,59	0,080	0,26	0,55	
254	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
255	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
256	LwK 5.3	7,39	-0,120	-0,38	-0,83	
257	LwK 5.3	7,72	0,210	0,67	1,45	
258	LwK 5.3	7,70	0,190	0,61	1,31	
259	LwK 5.3	7,14	-0,370	-1,18	-2,55	
260	LwK 5.3	7,20	-0,310	-0,99	-2,14	
261	LwK 5.3	7,50	-0,010	-0,03	-0,07	
262	LwK 5.3	7,70	0,190	0,61	1,31	
263	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
264	LwK 5.3	7,37	-0,140	-0,45	-0,97	
265	LwK 5.3	7,45	-0,060	-0,19	-0,41	
266	LwK 5.3	7,45	-0,060	-0,19	-0,41	
267	LwK 5.3	7,08	-0,430	-1,37	-2,97	
268	LwK 5.3	7,76	0,250	0,80	1,72	
269	LwK 5.3	7,10	-0,410	-1,31	-2,83	
270	LwK 5.3	7,63	0,120	0,38	0,83	
271	LwK 5.3	7,39	-0,120	-0,38	-0,83	
273	LwK 5.3	7,67	0,160	0,51	1,10	
274	LwK 5.3	7,40	-0,110	-0,35	-0,76	
275	LwK 5.3	7,43	-0,080	-0,26	-0,55	
276	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
277	LwK 5.3	7,65	0,140	0,45	0,97	
278	LwK 5.3	7,00	-0,510	-1,63	-3,52	
280	LwK 5.3	7,80	0,290	0,92	2,00	
281	LwK 5.3	7,27	-0,240	-0,77	-1,66	
282	LwK 5.3	7,35	-0,160	-0,51	-1,10	
283	LwK 5.3	7,74	0,230	0,73	1,59	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

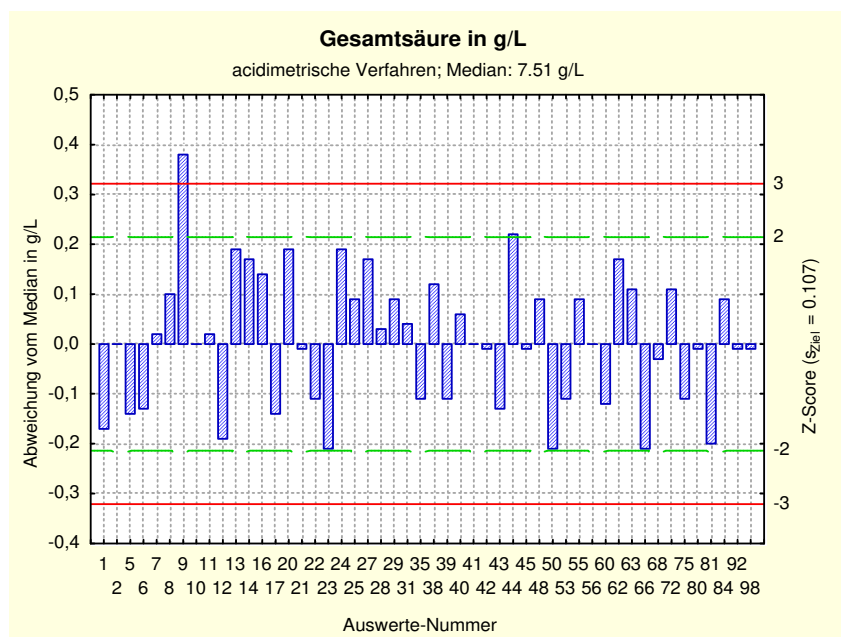
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
284	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	
313	LwK 5.3	7,35	-0,160	-0,51	-1,10	
322	LwK 5.3	7,45	-0,060	-0,19	-0,41	
338	LwK 5.3	7,72	0,210	0,67	1,45	
349	LwK 5.3	7,50	-0,010	-0,03	-0,07	
363	LwK 5.3	7,60	0,090	0,29	0,62	

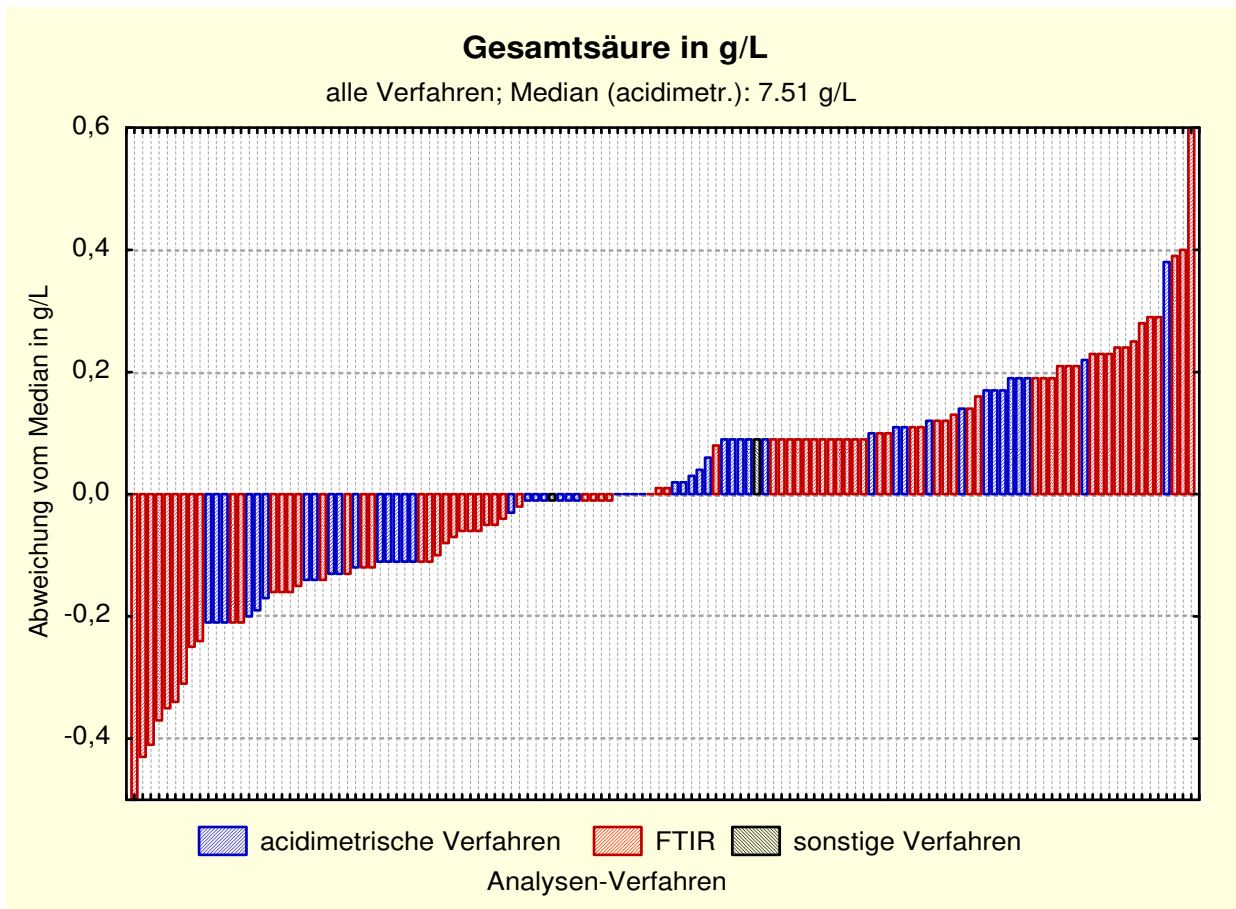
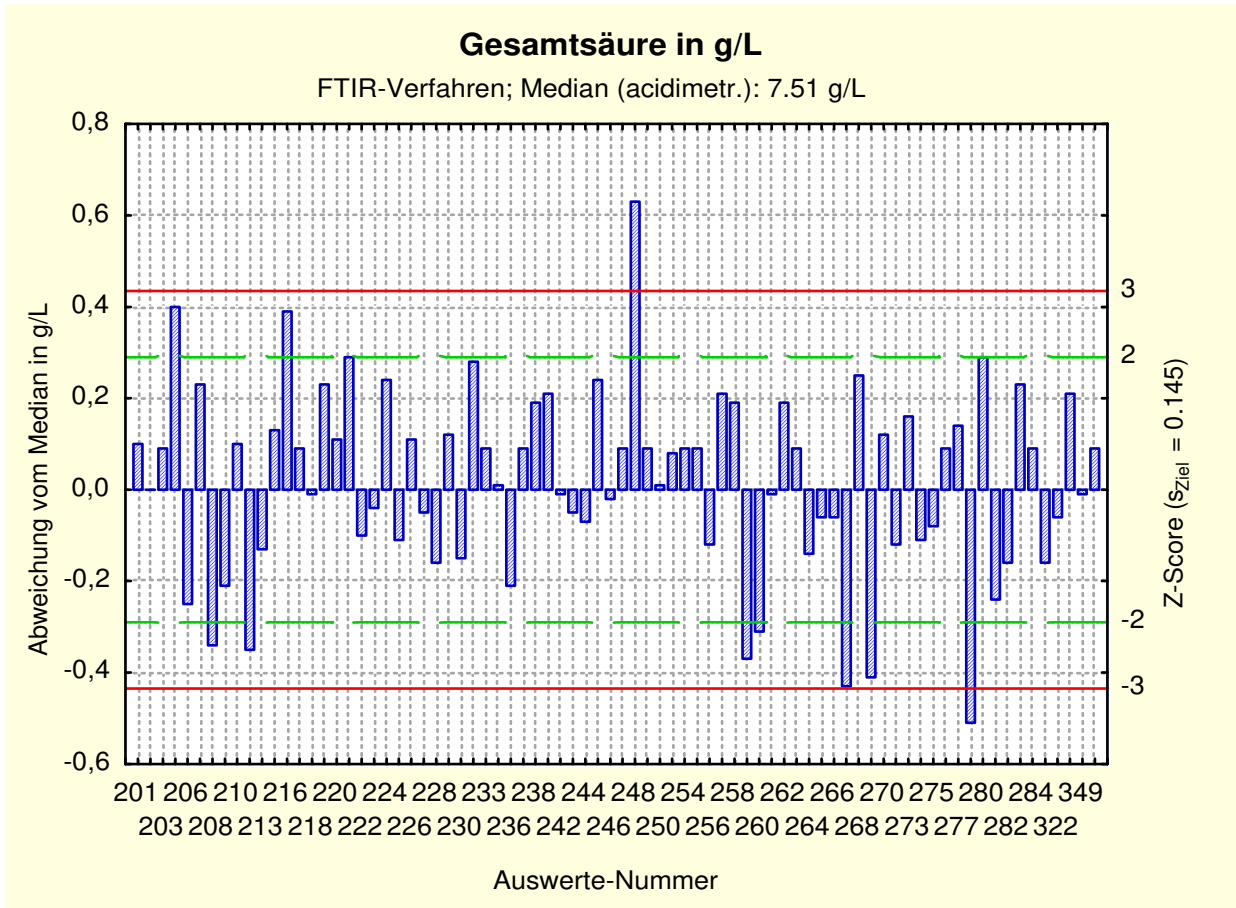
**5.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	50
Minimalwert	7,30
Mittelwert	7,518
Median	7,510
Maximalwert	7,89
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,135
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,019
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,314
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,145
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,43
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,26
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,93
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,06
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,18
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,13

**5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	29	7,509	0,152
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	19	7,525	0,139
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	7,500	0,160
	herkömmliche Verfahren	50	7,515	0,144
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	7,536	0,192
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	7,600	
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	7,500	







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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,08	-0,115	-1,04	
03	HPLC	2,13	-0,070	-0,63	
05	photometr.	2,13	-0,065	-0,59	
06	HPLC	2,03	-0,165	-1,50	
07	HPLC	2,07	-0,125	-1,13	
08	IC	2,36	0,169	1,53	
09	HPLC	2,19	-0,005	-0,05	
11	photometr., autom.	2,04	-0,155	-1,41	
12	photometr.	2,37	0,175	1,59	
14	photometr., autom.	2,08	-0,113	-1,02	
17	photometr., autom.	2,33	0,135	1,22	
20	photometr., autom.	2,26	0,065	0,59	
23	HPLC	2,17	-0,025	-0,23	
24	NMR	2,31	0,115	1,04	
27	photometr., autom.	2,17	-0,024	-0,22	
28	HPLC	2,17	-0,025	-0,23	
31	photometr., autom.	2,07	-0,125	-1,13	
39	photometr., autom.	2,34	0,145	1,31	
40	IC	2,07	-0,125	-1,13	
41	photometr., autom.	2,36	0,165	1,50	
42	photometr., autom.	2,08	-0,115	-1,04	
43	photometr., autom.	2,11	-0,085	-0,77	
45	photometr., autom.	2,29	0,095	0,86	
48	photometr., autom.	2,29	0,095	0,86	
50	photometr., autom.	2,47	0,275	2,49	
53	photometr., autom.	2,50	0,305	2,76	
56	photometr., autom.	2,32	0,125	1,13	
61	photometr., autom.	2,26	0,065	0,59	
62	HPLC	2,52	0,326	2,96	
68	photometr., autom.	2,39	0,195	1,77	
81	photometr.	2,42	0,225	2,04	
91	HPLC	2,20	0,005	0,05	
98	HPLC	2,10	-0,095	-0,86	
107	NMR	2,02	-0,172	-1,56	
108	NMR	2,10	-0,099	-0,90	
109	NMR	2,04	-0,159	-1,44	
110	NMR	2,40	0,203	1,84	

**5.10.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,21	-0,985	-8,93	-4,34	
202	FTIR	0,91	-1,285	-11,65	-5,66	(*)
203	FTIR	1,61	-0,585	-5,30	-2,58	
204	FTIR	0,63	-1,565	-14,19	-6,89	(*)
206	FTIR	1,34	-0,855	-7,75	-3,77	
208	FTIR	1,16	-1,035	-9,38	-4,56	
209	FTIR	1,70	-0,495	-4,49	-2,18	
210	FTIR	1,79	-0,405	-3,67	-1,78	
212	FTIR	1,18	-1,015	-9,20	-4,47	
213	FTIR	1,79	-0,405	-3,67	-1,78	
214	FTIR	1,69	-0,505	-4,58	-2,22	
216	FTIR	0,50	-1,695	-15,37	-7,47	(*)
217	FTIR	1,15	-1,045	-9,47	-4,60	
218	FTIR	1,26	-0,935	-8,48	-4,12	
219	FTIR	1,49	-0,705	-6,39	-3,11	
220	FTIR	1,34	-0,855	-7,75	-3,77	
221	FTIR	1,40	-0,795	-7,21	-3,50	
222	FTIR	1,41	-0,785	-7,12	-3,46	
223	FTIR	1,14	-1,055	-9,56	-4,65	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	FTIR	2,08	-0,115	-1,04	-0,51	
225	FTIR	1,10	-1,095	-9,93	-4,82	
226	FTIR	1,77	-0,425	-3,85	-1,87	
227	FTIR	1,65	-0,545	-4,94	-2,40	
228	FTIR	1,60	-0,595	-5,39	-2,62	
229	FTIR	1,44	-0,755	-6,84	-3,33	
230	FTIR	0,94	-1,255	-11,38	-5,53	(*)
231	FTIR	1,48	-0,715	-6,48	-3,15	
233	FTIR	1,17	-1,025	-9,29	-4,52	
235	FTIR	1,58	-0,615	-5,58	-2,71	
236	FTIR	2,30	0,105	0,95	0,46	
237	FTIR	1,50	-0,695	-6,30	-3,06	
238	FTIR	1,41	-0,785	-7,12	-3,46	
241	FTIR	1,27	-0,925	-8,39	-4,07	
242	FTIR	1,20	-0,995	-9,02	-4,38	
243	FTIR	2,41	0,215	1,95	0,95	
244	FTIR	0,77	-1,425	-12,92	-6,28	(*)
245	FTIR	1,75	-0,445	-4,03	-1,96	
246	FTIR	1,24	-0,955	-8,66	-4,21	
247	FTIR	0,86	-1,335	-12,10	-5,88	(*)
249	FTIR	1,30	-0,895	-8,11	-3,94	
250	FTIR	1,66	-0,535	-4,85	-2,36	
254	FTIR	1,20	-0,995	-9,02	-4,38	
256	FTIR	1,21	-0,985	-8,93	-4,34	
257	FTIR	1,01	-1,185	-10,74	-5,22	(*)
258	FTIR	1,61	-0,585	-5,30	-2,58	
259	FTIR	1,53	-0,665	-6,03	-2,93	
260	FTIR	1,20	-0,995	-9,02	-4,38	
261	FTIR	1,10	-1,095	-9,93	-4,82	
263	FTIR	0,20	-1,995	-18,09	-8,79	(*)
264	FTIR	1,54	-0,655	-5,94	-2,89	
265	FTIR	1,35	-0,845	-7,66	-3,72	
266	FTIR	0,95	-1,245	-11,29	-5,48	(*)
267	FTIR	1,49	-0,705	-6,39	-3,11	
268	FTIR	2,20	0,005	0,05	0,02	
269	FTIR	1,10	-1,095	-9,93	-4,82	
270	FTIR	1,53	-0,665	-6,03	-2,93	
271	FTIR	1,28	-0,915	-8,29	-4,03	
273	FTIR	1,15	-1,045	-9,47	-4,60	
274	FTIR	1,50	-0,695	-6,30	-3,06	
275	FTIR	1,29	-0,905	-8,20	-3,99	
276	FTIR	0,96	-1,235	-11,20	-5,44	(*)
277	FTIR	1,10	-1,095	-9,93	-4,82	
278	FTIR	1,00	-1,195	-10,83	-5,26	(*)
280	FTIR	1,79	-0,405	-3,67	-1,78	
281	FTIR	1,94	-0,255	-2,31	-1,12	
282	FTIR	2,27	0,075	0,68	0,33	
283	FTIR	2,81	0,615	5,58	2,71	
322	FTIR	2,31	0,115	1,04	0,51	
338	FTIR	1,16	-1,035	-9,38	-4,56	
349	FTIR	1,50	-0,695	-6,30	-3,06	
363	FTIR	0,30	-1,895	-17,18	-8,35	(*)

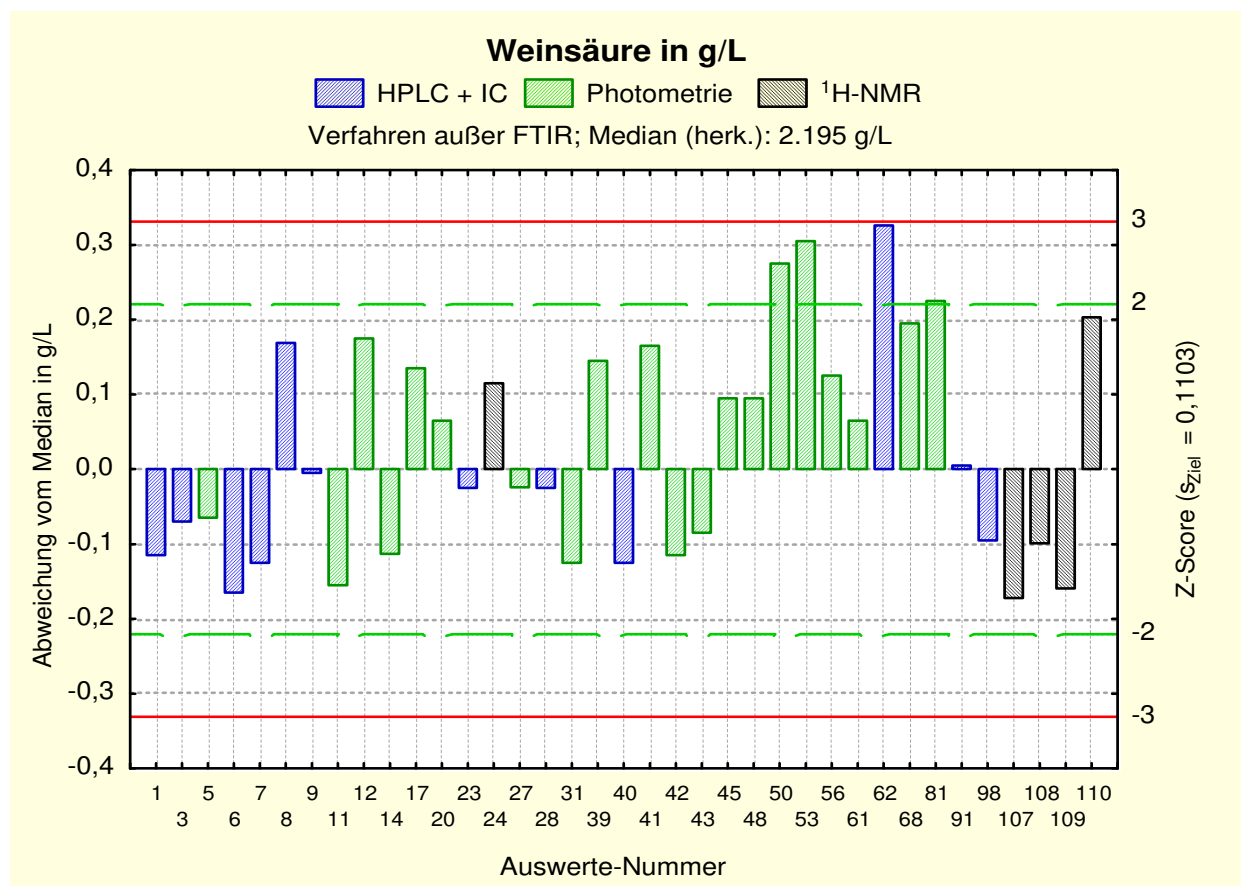
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

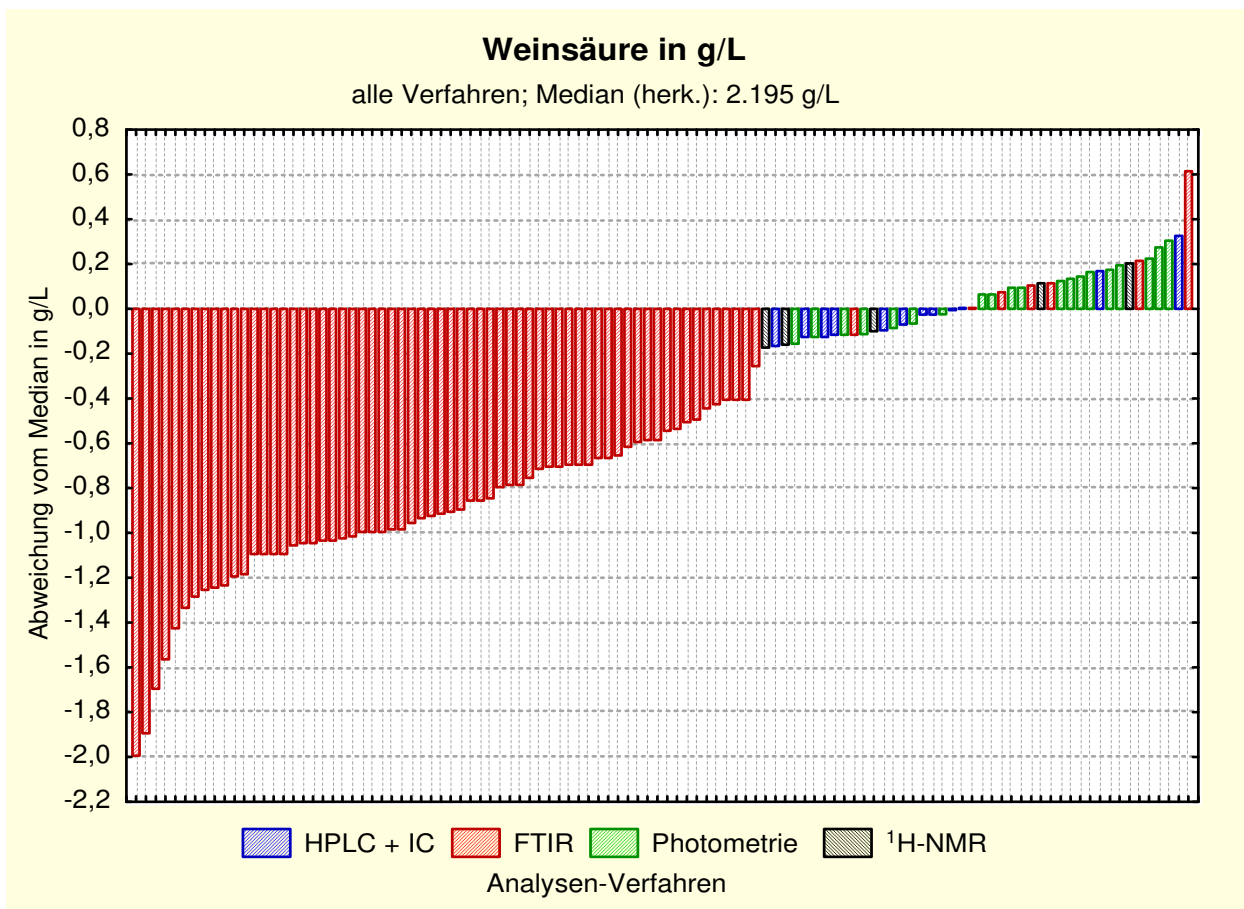
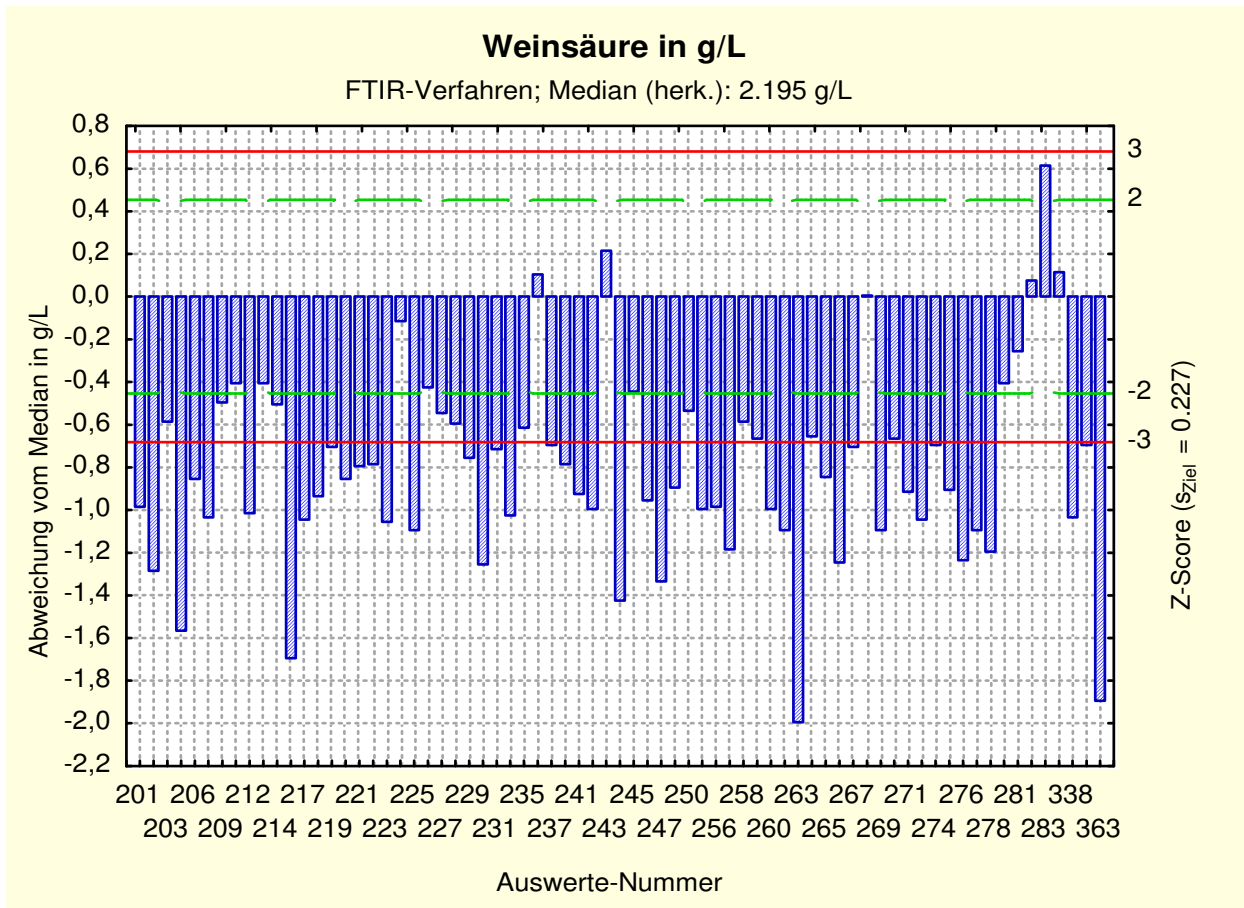
**5.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herk. Verf. alle Daten
Gültige Werte	12	32
Minimalwert	2,03	2,03
Mittelwert	2,174	2,230
Median	2,148	2,195
Maximalwert	2,52	2,52
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,140	0,145
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,041	0,026
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,108	0,110
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp. herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227	0,227
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,30	1,32
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp. herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,62	0,64
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,37	0,23
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp. herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,18	0,11

**5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	2,140	0,078
IC	Ionenchromatographie	2	2,217	0,236
	HPLC + Ionenchromatographie	12	2,150	0,100
photometr.	photometrisch nach Rebelein	3	2,312	0,166
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	17	2,258	0,158
	photometrische Verfahren	20	2,645	0,159
	herkömmliche Verfahren	32	2,227	0,159
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	1,375	0,381
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,159	0,178





## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	1,350	0,1080	1,59	
05	OIV SO2-korr.	1,200	-0,0420	-0,62	
06	Gerhardt SO2 korr.	1,250	0,0080	0,12	
07	OIV SO2-korr.	1,329	0,0870	1,28	
08	OIV SO2-korr.	1,190	-0,0520	-0,76	
09	OIV sonst. mod. SO2 korr.	1,194	-0,0480	-0,71	
10	OIV SO2-korr.	1,228	-0,0140	-0,21	
11	OIV SO2-korr.	1,270	0,0280	0,41	
12	Halbmikro SO2 unber.	1,210	-0,0320	-0,47	
13	Gerhardt SO2 ausg.	0,970	-0,2720	-4,00	
22	Gerhardt SO2 korr.	1,400	0,1580	2,32	
23	Halbmikro SO2 unber.	1,310	0,0680	1,00	
28	Gerhardt SO2 ausg.	1,195	-0,0470	-0,69	
29	Halbmikro SO2 unber.	1,435	0,1930	2,84	
31	Gerhardt SO2 korr.	1,190	-0,0520	-0,76	
38	Halbmikro SO2 korr.	1,061	-0,1810	-2,66	
39	Gerhardt SO2 korr.	1,310	0,0680	1,00	
40	Gerhardt SO2 korr.	1,339	0,0970	1,43	
41	Gerhardt SO2 ausg.	1,242	0,0000	0,00	
42	Gerhardt SO2 ausg.	1,230	-0,0120	-0,18	
44	Gerhardt SO2 korr.	1,380	0,1380	2,03	
55	Gerhardt SO2 korr.	1,300	0,0580	0,85	
56	Rentschler mod. korr.	1,354	0,1120	1,65	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,968	-0,2740	-4,03	
62	Gerhardt SO2 korr.	1,425	0,1830	2,69	
63	Halbmikro SO2 unber.	1,370	0,1280	1,88	
66	Halbmikro SO2 unber.	1,450	0,2080	3,06	
67	Wädenswil SO2 korr.	1,140	-0,1020	-1,50	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,920	-0,3220	-4,74	
72	Wädenswil SO2 korr.	0,888	-0,3536	-5,20	(**)
81	Halbmikro SO2 korr.	1,180	-0,0620	-0,91	
84	Halbmikro SO2 unber.	1,340	0,0980	1,44	
86	OIV SO2-korr.	1,451	0,2090	3,07	
98	Gerhardt SO2 korr.	1,400	0,1580	2,32	
103	spezial_1	1,325	0,0830	1,22	

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

### 5.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,080	-0,1560	-2,30	-1,75	
202	FTIR	1,440	0,2040	3,01	2,29	
203	FTIR	1,143	-0,0930	-1,37	-1,04	
204	FTIR	1,220	-0,0160	-0,24	-0,18	
206	FTIR	1,160	-0,0760	-1,12	-0,85	
208	FTIR	0,966	-0,2700	-3,99	-3,03	
209	FTIR	1,140	-0,0960	-1,42	-1,08	
210	FTIR	1,440	0,2040	3,01	2,29	
212	FTIR	1,340	0,1040	1,54	1,17	
214	FTIR	1,200	-0,0360	-0,53	-0,40	
216	FTIR	1,090	-0,1460	-2,16	-1,64	
217	FTIR	0,810	-0,4260	-6,29	-4,78	
218	FTIR	0,870	-0,3660	-5,40	-4,11	
219	FTIR	0,970	-0,2660	-3,93	-2,99	
220	FTIR	0,990	-0,2460	-3,63	-2,76	
221	FTIR	1,170	-0,0660	-0,97	-0,74	
222	FTIR	0,940	-0,2960	-4,37	-3,32	
223	FTIR	1,110	-0,1260	-1,86	-1,41	
225	FTIR	0,970	-0,2660	-3,93	-2,99	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	1,130	-0,1060	-1,57	-1,19	
227	FTIR	0,991	-0,2450	-3,62	-2,75	
228	FTIR	1,240	0,0040	0,06	0,04	
229	FTIR	1,080	-0,1560	-2,30	-1,75	
230	FTIR	1,060	-0,1760	-2,60	-1,98	
231	FTIR	1,018	-0,2180	-3,22	-2,45	
233	FTIR	1,270	0,0340	0,50	0,38	
235	FTIR	0,880	-0,3560	-5,26	-4,00	
236	FTIR	0,750	-0,4860	-7,18	-5,45	(**)
237	FTIR	1,030	-0,2060	-3,04	-2,31	
238	FTIR	1,080	-0,1560	-2,30	-1,75	
241	FTIR	1,020	-0,2160	-3,19	-2,42	
242	FTIR	1,200	-0,0360	-0,53	-0,40	
243	FTIR	1,390	0,1540	2,27	1,73	
244	FTIR	1,330	0,0940	1,39	1,05	
245	FTIR	1,130	-0,1060	-1,57	-1,19	
246	FTIR	1,260	0,0240	0,35	0,27	
247	FTIR	1,330	0,0940	1,39	1,05	
249	FTIR	1,040	-0,1960	-2,89	-2,20	
250	FTIR	0,960	-0,2760	-4,08	-3,10	
251	FTIR	1,180	-0,0560	-0,83	-0,63	
254	FTIR	0,970	-0,2660	-3,93	-2,99	
255	FTIR	1,010	-0,2260	-3,34	-2,54	
256	FTIR	1,230	-0,0060	-0,09	-0,07	
257	FTIR	0,990	-0,2460	-3,63	-2,76	
258	FTIR	0,870	-0,3660	-5,40	-4,11	
260	FTIR	1,000	-0,2360	-3,48	-2,65	
261	FTIR	0,860	-0,3760	-5,55	-4,22	
263	FTIR	1,100	-0,1360	-2,01	-1,53	
264	FTIR	1,310	0,0740	1,09	0,83	
265	FTIR	1,020	-0,2160	-3,19	-2,42	
266	FTIR	0,950	-0,2860	-4,22	-3,21	
267	FTIR	1,230	-0,0060	-0,09	-0,07	
268	FTIR	1,390	0,1540	2,27	1,73	
269	FTIR	0,980	-0,2560	-3,78	-2,87	
270	FTIR	1,010	-0,2260	-3,34	-2,54	
271	FTIR	0,870	-0,3660	-5,40	-4,11	
273	FTIR	1,510	0,2740	4,05	3,08	
274	FTIR	1,080	-0,1560	-2,30	-1,75	
275	FTIR	0,860	-0,3760	-5,55	-4,22	
276	FTIR	1,030	-0,2060	-3,04	-2,31	
277	FTIR	1,060	-0,1760	-2,60	-1,98	
278	FTIR	0,480	-0,7560	-11,16	-8,48	(*)
280	FTIR	1,080	-0,1560	-2,30	-1,75	
281	FTIR	1,040	-0,1960	-2,89	-2,20	
282	FTIR	0,734	-0,5020	-7,41	-5,63	(**)
284	FTIR	1,360	0,1240	1,83	1,39	
322	FTIR	1,270	0,0340	0,50	0,38	
338	FTIR	1,200	-0,0360	-0,53	-0,40	
349	FTIR	1,290	0,0540	0,80	0,61	
363	FTIR	1,200	-0,0360	-0,53	-0,40	

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

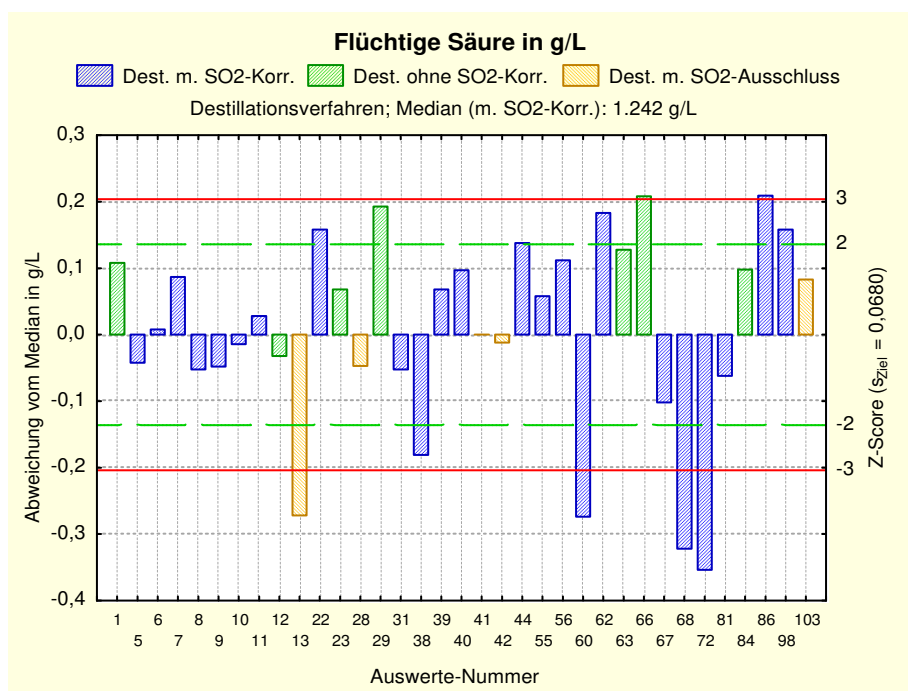
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Bewertungsbasis ab.

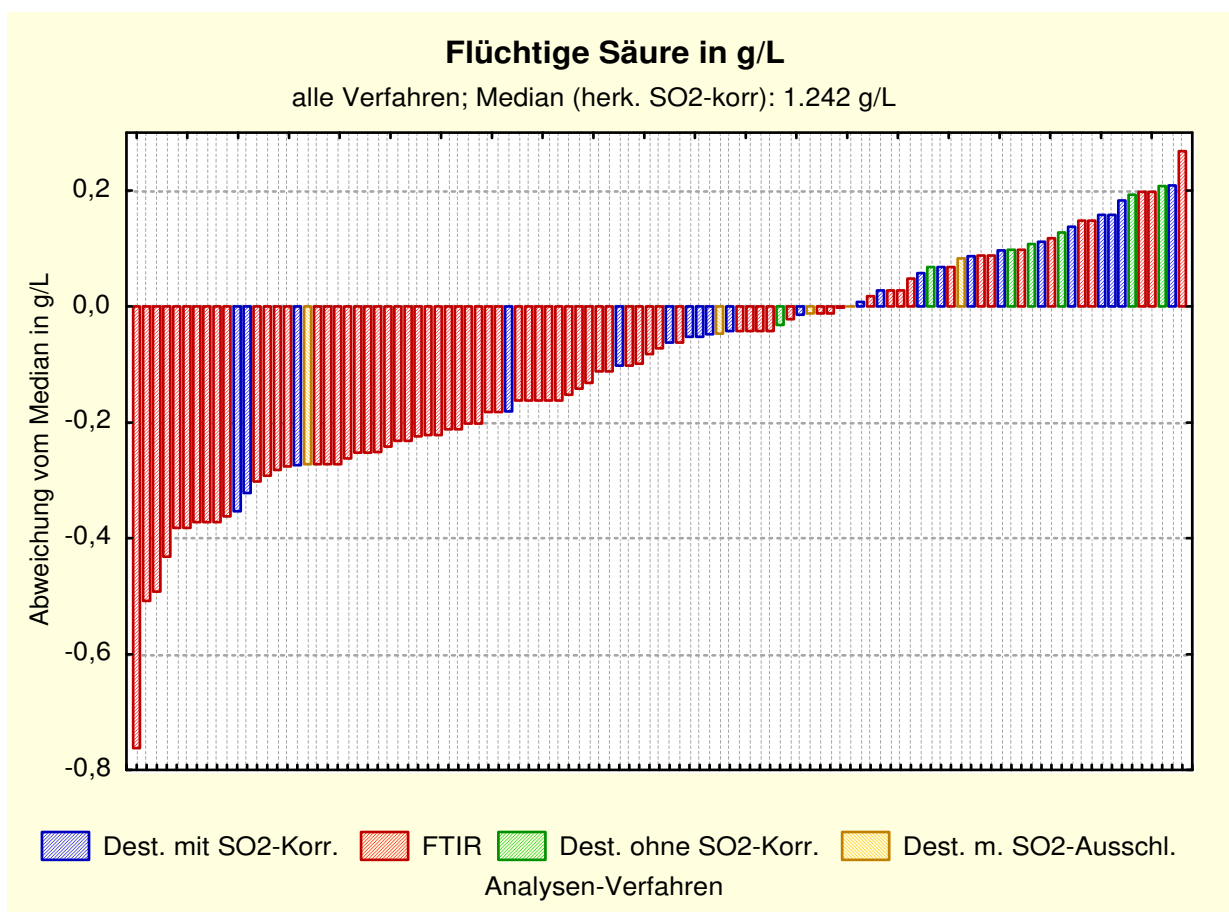
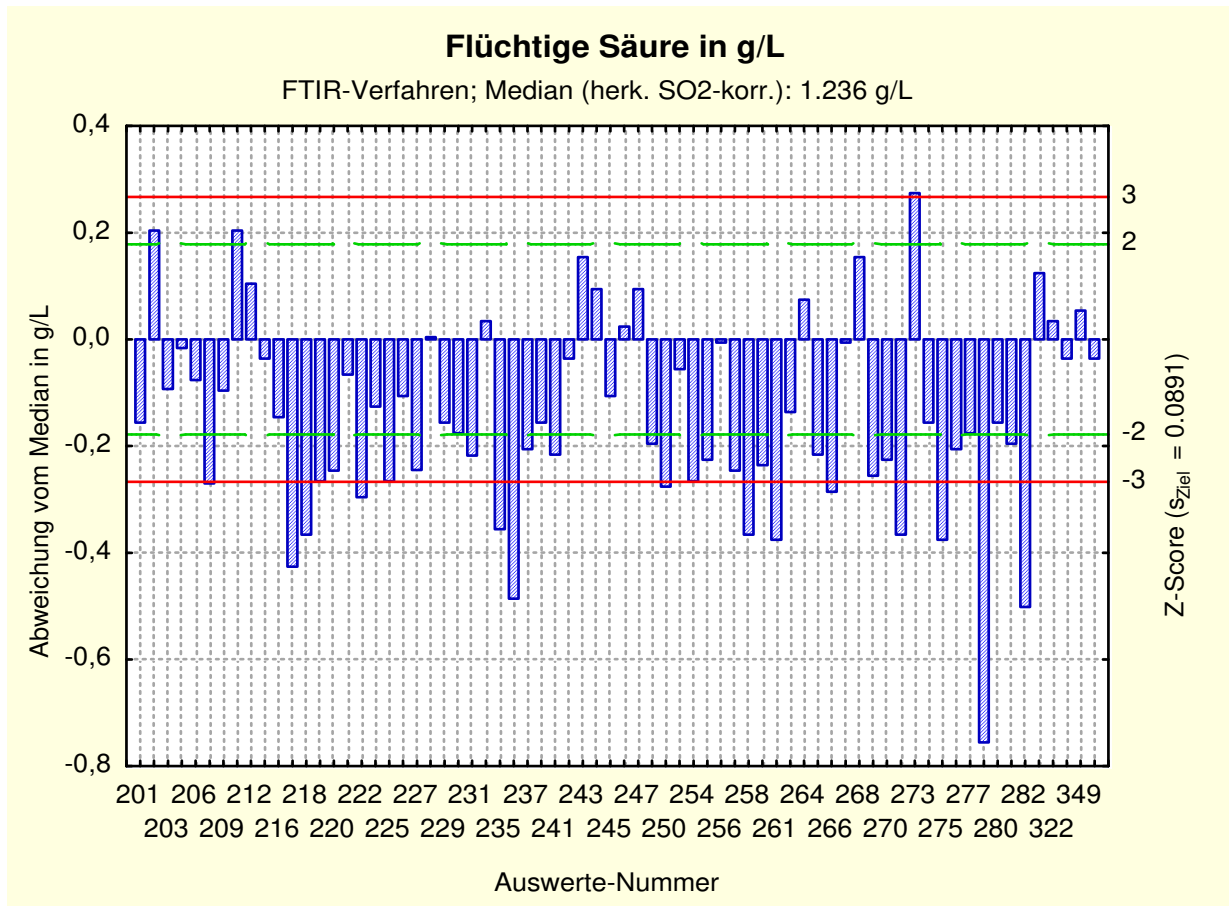
**5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren**

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	27
Minimalwert	0,888	0,920
Mittelwert	1,2260	1,2386
Median	1,2360	1,2420
Maximalwert	1,451	1,451
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,152	0,139
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,029	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,068	0,068
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)	(0,029)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,089	0,089
Horrrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,24	2,05
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	(5,24)	(4,79)
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	1,70	1,56
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,42	0,39
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	(1,00)	(0,93)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,32	0,30

**5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	7	1,354	0,082
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	1,120	0,095
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	3	0,999	0,146
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	4	1,164	0,133
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	10	1,315	0,104
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO2-korr.	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	6	1,275	0,104
sonst. mod. SO2-korr.	sonstig modifiziert mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	1,194	
Rentschler mod	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
SO2-korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	1,354	
spezial_1	Verfahrensbeschreibung siehe Teil 1	1	1,325	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	28	1,238	0,145
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	1,094	0,181







## 5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 5.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	1,190	-0,165	-2,25	
03	HPLC	1,161	-0,194	-2,65	
06	enzymat. autom.	1,288	-0,067	-0,91	
07	enzymat. autom.	1,380	0,025	0,34	
12	enzymat. autom.	1,380	0,025	0,34	
14	enzymat. autom.	1,210	-0,145	-1,98	
16	enzymat. autom.	1,560	0,205	2,80	
17	enzymat. autom.	1,400	0,045	0,61	
20	enzymat. autom.	1,240	-0,115	-1,57	
24	NMR	1,130	-0,225	-3,07	
27	enzymat. autom.	1,200	-0,155	-2,12	
31	enzymat. autom.	1,610	0,255	3,48	
39	enzymat. autom.	1,330	-0,025	-0,34	
40	HPLC	1,330	-0,025	-0,34	
42	enzymat. autom.	1,140	-0,215	-2,94	
43	enzymat. autom.	1,460	0,105	1,43	
45	enzymat. autom.	1,390	0,035	0,48	
48	enzymat. autom.	0,980	-0,375	-5,12	(**)
50	enzymat. autom.	1,360	0,005	0,07	
53	enzymat. autom.	1,390	0,035	0,48	
56	enzymat. autom.	1,350	-0,005	-0,07	
62	enzymat. autom.	1,231	-0,124	-1,69	
68	enzymat. autom.	1,340	-0,015	-0,20	
88	HPLC	1,140	-0,215	-2,94	
107	NMR	1,163	-0,192	-2,62	
108	NMR	1,137	-0,218	-2,97	
109	NMR	1,093	-0,262	-3,58	
110	NMR	1,306	-0,049	-0,67	
210	FTIR	1,400	0,045	0,61	
213	FTIR	1,110	-0,245	-3,35	
224	FTIR	1,010	-0,345	-4,71	
242	FTIR	1,080	-0,275	-3,76	
245	FTIR	1,130	-0,225	-3,07	
259	FTIR	0,900	-0,455	-6,21	(***)
260	FTIR	1,070	-0,285	-3,89	
274	FTIR	1,080	-0,275	-3,76	
283	FTIR	0,830	-0,525	-7,17	(***)

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

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

Zeilen in grauer Schrift dienen nur der Information. Gültige Z-Score für diese Laborergebnisse im Abschnitt.5.12.2.

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	1,190	0,029	0,45	
03	HPLC	1,161	0,000	0,00	
24	NMR	1,130	-0,031	-0,48	
40	HPLC	1,330	0,169	2,63	
88	HPLC	1,140	-0,021	-0,33	
107	NMR	1,163	0,002	0,04	
108	NMR	1,137	-0,024	-0,37	
109	NMR	1,093	-0,068	-1,06	
110	NMR	1,306	0,145	2,26	
210	FTIR	1,400	0,239	3,72	
213	FTIR	1,110	-0,051	-0,79	
224	FTIR	1,010	-0,151	-2,35	
242	FTIR	1,080	-0,081	-1,26	
245	FTIR	1,130	-0,031	-0,48	
259	FTIR	0,900	-0,261	-4,06	
260	FTIR	1,070	-0,091	-1,42	
274	FTIR	1,080	-0,081	-1,26	
283	FTIR	0,830	-0,331	-5,15	(**)

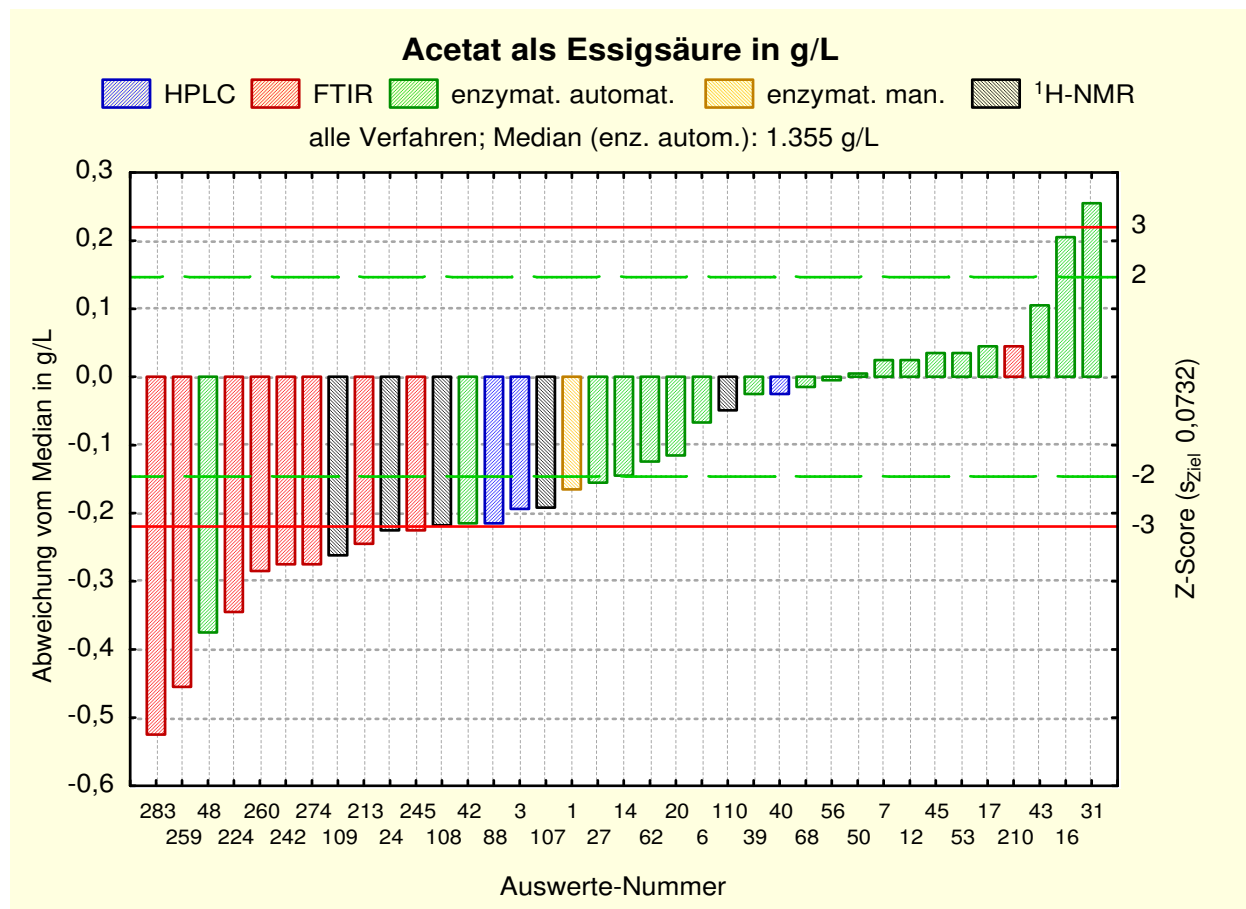
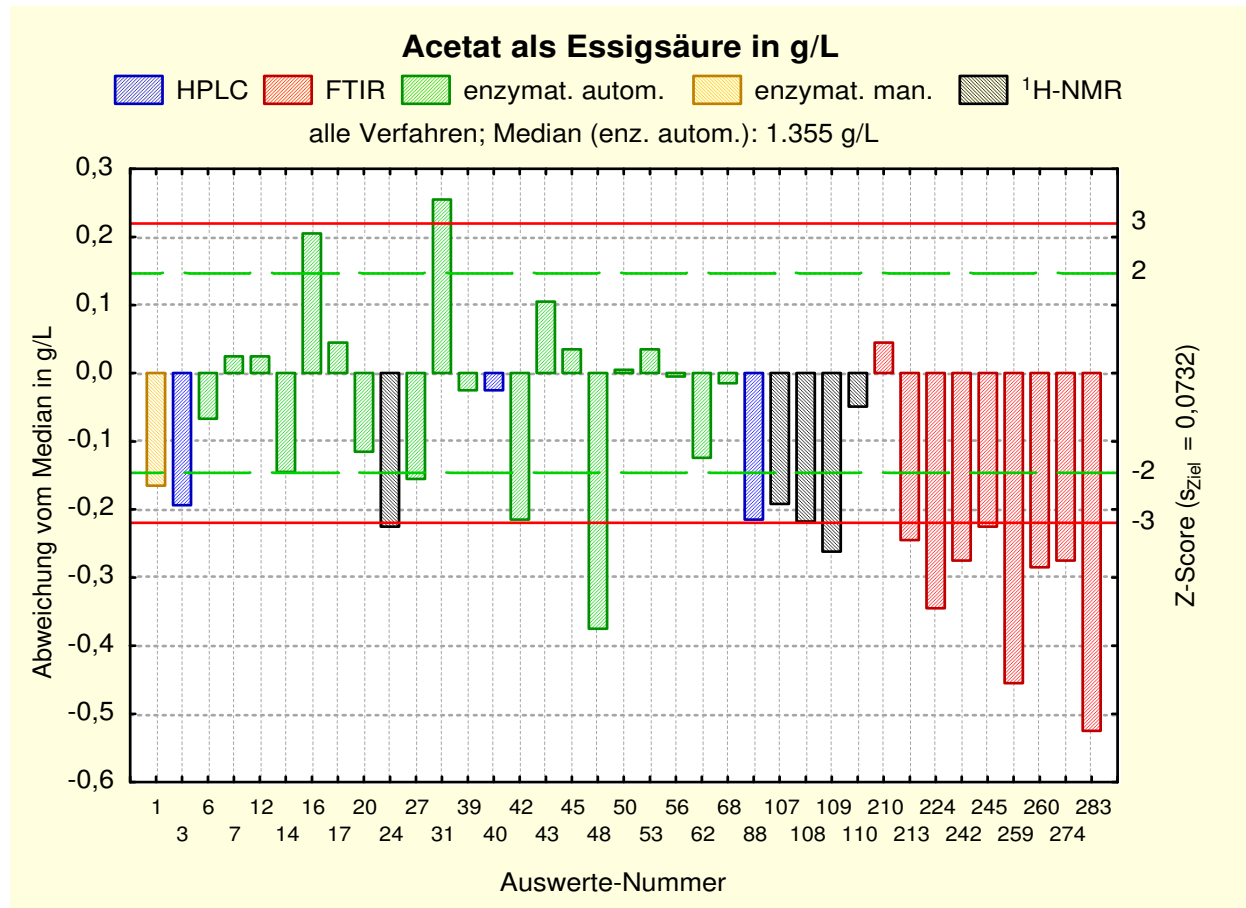
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Bewertungsbasis ab.

### 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	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	19	18	9
Minimalwert	0,980	1,140	1,093
Mittelwert	1,328	1,348	1,183
Median	1,350	1,355	1,161
Maximalwert	1,610	1,610	1,330
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,145	0,121	0,081
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,033	0,028	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,073	0,073	0,064
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )			
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )			
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,98	1,65	1,26
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )			
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,45	0,39	0,42
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )			

### 5.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	19	1,3310	0,1280
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	1,1969	0,0919
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	1,1900	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie ( <sup>1</sup> H-NMR)	5	1,1650	0,0909
	HPLC, enzymat. manuell + <sup>1</sup> H-NMR	9	1,1814	0,0860
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	9	1,0569	0,1335



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

### 5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,54	-0,020	-0,16	-0,24	
02	enzymat. Hand	2,51	-0,048	-0,38	-0,58	
03	HPLC	2,69	0,134	1,07	1,62	
06	HPLC	2,58	0,020	0,16	0,24	
07	enzymat. autom.	2,52	-0,039	-0,31	-0,47	
09	HPLC	2,53	-0,030	-0,24	-0,36	
23	HPLC	2,44	-0,120	-0,95	-1,45	
24	NMR	2,46	-0,100	-0,80	-1,21	
28	HPLC	2,54	-0,020	-0,16	-0,24	
40	HPLC	2,80	0,240	1,91	2,89	
62	HPLC	2,94	0,384	3,05	4,63	
91	HPLC	2,59	0,030	0,24	0,36	
98	HPLC	2,60	0,040	0,32	0,48	
107	NMR	2,46	-0,099	-0,79	-1,20	
108	NMR	2,46	-0,097	-0,77	-1,17	
109	NMR	2,46	-0,097	-0,77	-1,16	
110	NMR	2,66	0,103	0,82	1,24	

### 5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,53	0,000	0,00	0,00	
02	enz.(L-) Hand	2,47	-0,062	-0,50	-0,75	
04	enz.(L-), autom.	2,52	-0,015	-0,12	-0,18	
05	enz.(L-), autom.	2,50	-0,030	-0,24	-0,37	
06	enz.(L-), autom.	2,53	0,000	0,00	0,00	
07	enz.(L-), autom.	2,50	-0,030	-0,24	-0,37	
08	enz.(L-), autom.	2,91	0,383	3,08	4,66	
09	enz.(L-) Hand	2,48	-0,050	-0,40	-0,61	
11	enz.(L-), autom.	2,38	-0,150	-1,21	-1,83	
12	enz.(L-), autom.	2,69	0,160	1,29	1,95	
14	enz.(L-), autom.	2,55	0,020	0,16	0,24	
16	enz.(L-), autom.	2,78	0,250	2,01	3,04	
17	enz.(L-), autom.	2,30	-0,230	-1,85	-2,80	
20	enz.(L-), autom.	2,48	-0,050	-0,40	-0,61	
27	enz.(L-), autom.	2,67	0,140	1,12	1,70	
31	enz.(L-), autom.	2,78	0,253	2,03	3,08	
39	enz.(L-), autom.	2,64	0,110	0,88	1,34	
41	enz.(L-), autom.	2,60	0,065	0,52	0,79	
42	enz.(L-), autom.	2,72	0,190	1,53	2,31	
43	enz.(L-), autom.	2,60	0,070	0,56	0,85	
45	enz.(L-), autom.	2,45	-0,080	-0,64	-0,97	
48	enz.(L-), autom.	2,64	0,110	0,88	1,34	
50	enz.(L-), autom.	2,40	-0,130	-1,04	-1,58	
55	enz.(L-), autom.	2,60	0,070	0,56	0,85	
56	enz.(L-), autom.	2,52	-0,010	-0,08	-0,12	
61	enz.(L-), autom.	3,16	0,630	5,06	7,67	(**)
62	enz.(L-), autom.	2,44	-0,086	-0,69	-1,05	
63	enz.(L-) Hand	2,48	-0,051	-0,41	-0,62	
68	enz.(L-), autom.	2,73	0,200	1,61	2,43	
81	enz.(L-) Hand	2,46	-0,070	-0,56	-0,85	
89	enz.(L-) Hand	2,57	0,040	0,32	0,49	

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

**5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,42	0,860	6,84	3,94	
202	FTIR	3,04	0,480	3,82	2,20	
203	FTIR	2,86	0,301	2,39	1,38	
204	FTIR	3,26	0,700	5,57	3,21	
206	FTIR	2,46	-0,100	-0,80	-0,46	
208	FTIR	2,56	0,000	0,00	0,00	
209	FTIR	2,30	-0,260	-2,07	-1,19	
210	FTIR	2,24	-0,320	-2,55	-1,47	
212	FTIR	3,21	0,650	5,17	2,98	
213	FTIR	2,39	-0,170	-1,35	-0,78	
214	FTIR	2,73	0,170	1,35	0,78	
216	FTIR	4,70	2,140	17,02	9,82	(*)
217	FTIR	3,13	0,570	4,53	2,61	
218	FTIR	3,32	0,760	6,05	3,49	
219	FTIR	3,63	1,070	8,51	4,91	
220	FTIR	3,31	0,750	5,97	3,44	
221	FTIR	3,30	0,740	5,89	3,39	
222	FTIR	3,16	0,600	4,77	2,75	
223	FTIR	3,24	0,680	5,41	3,12	
224	FTIR	2,58	0,020	0,16	0,09	
225	FTIR	3,40	0,840	6,68	3,85	
226	FTIR	2,64	0,080	0,64	0,37	
227	FTIR	3,18	0,620	4,93	2,84	
228	FTIR	3,30	0,740	5,89	3,39	
229	FTIR	3,24	0,680	5,41	3,12	
230	FTIR	3,98	1,420	11,30	6,51	(*)
231	FTIR	3,16	0,600	4,77	2,75	
233	FTIR	3,54	0,980	7,80	4,50	
235	FTIR	3,25	0,690	5,49	3,17	
237	FTIR	3,00	0,440	3,50	2,02	
238	FTIR	3,45	0,890	7,08	4,08	
241	FTIR	3,53	0,970	7,72	4,45	
242	FTIR	3,30	0,740	5,89	3,39	
243	FTIR	3,50	0,940	7,48	4,31	
244	FTIR	3,29	0,730	5,81	3,35	
245	FTIR	2,65	0,090	0,72	0,41	
246	FTIR	2,80	0,240	1,91	1,10	
247	FTIR	3,20	0,640	5,09	2,94	
249	FTIR	2,70	0,140	1,11	0,64	
250	FTIR	2,94	0,380	3,02	1,74	
254	FTIR	3,40	0,840	6,68	3,85	
255	FTIR	3,20	0,640	5,09	2,94	
256	FTIR	2,71	0,150	1,19	0,69	
257	FTIR	3,43	0,870	6,92	3,99	
258	FTIR	3,40	0,840	6,68	3,85	
259	FTIR	2,70	0,140	1,11	0,64	
260	FTIR	2,40	-0,160	-1,27	-0,73	
261	FTIR	3,40	0,840	6,68	3,85	
263	FTIR	3,20	0,640	5,09	2,94	
264	FTIR	3,77	1,210	9,63	5,55	(**)
265	FTIR	2,61	0,050	0,40	0,23	
266	FTIR	3,03	0,470	3,74	2,16	
267	FTIR	3,24	0,680	5,41	3,12	
268	FTIR	3,19	0,630	5,01	2,89	
269	FTIR	3,60	1,040	8,27	4,77	
270	FTIR	3,71	1,150	9,15	5,28	(**)
271	FTIR	3,05	0,490	3,90	2,25	
273	FTIR	3,48	0,920	7,32	4,22	
274	FTIR	3,40	0,840	6,68	3,85	
275	FTIR	3,15	0,590	4,69	2,71	
276	FTIR	3,03	0,470	3,74	2,16	
277	FTIR	3,12	0,560	4,45	2,57	
278	FTIR	3,60	1,040	8,27	4,77	

(\*) 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.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	2,54	-0,020	-0,16	-0,09	
281	FTIR	3,25	0,690	5,49	3,17	
282	FTIR	2,97	0,410	3,26	1,88	
283	FTIR	3,67	1,111	8,84	5,10	(**)
322	FTIR	2,18	-0,380	-3,02	-1,74	
338	FTIR	2,70	0,140	1,11	0,64	
349	FTIR	2,80	0,240	1,91	1,10	
363	FTIR	2,70	0,140	1,11	0,64	

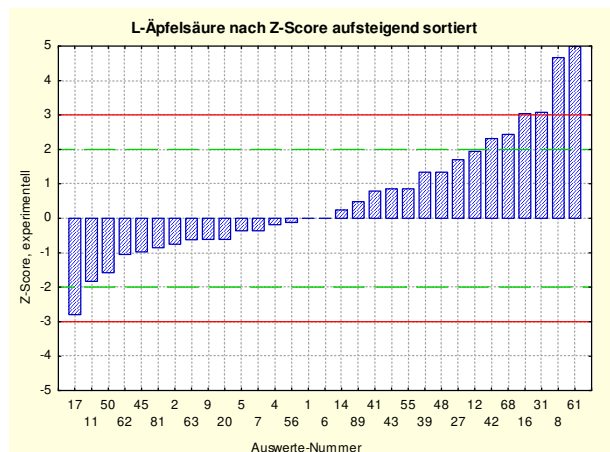
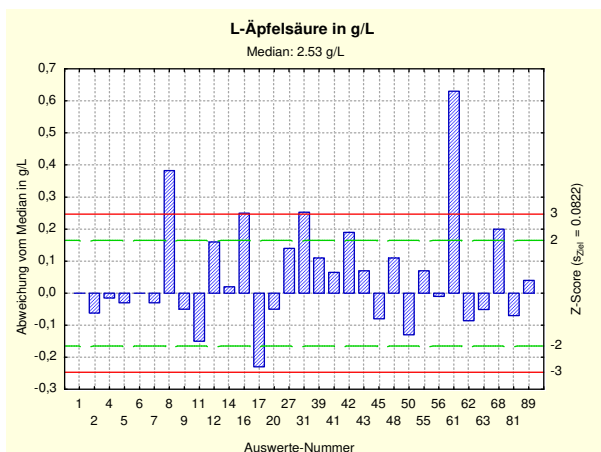
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

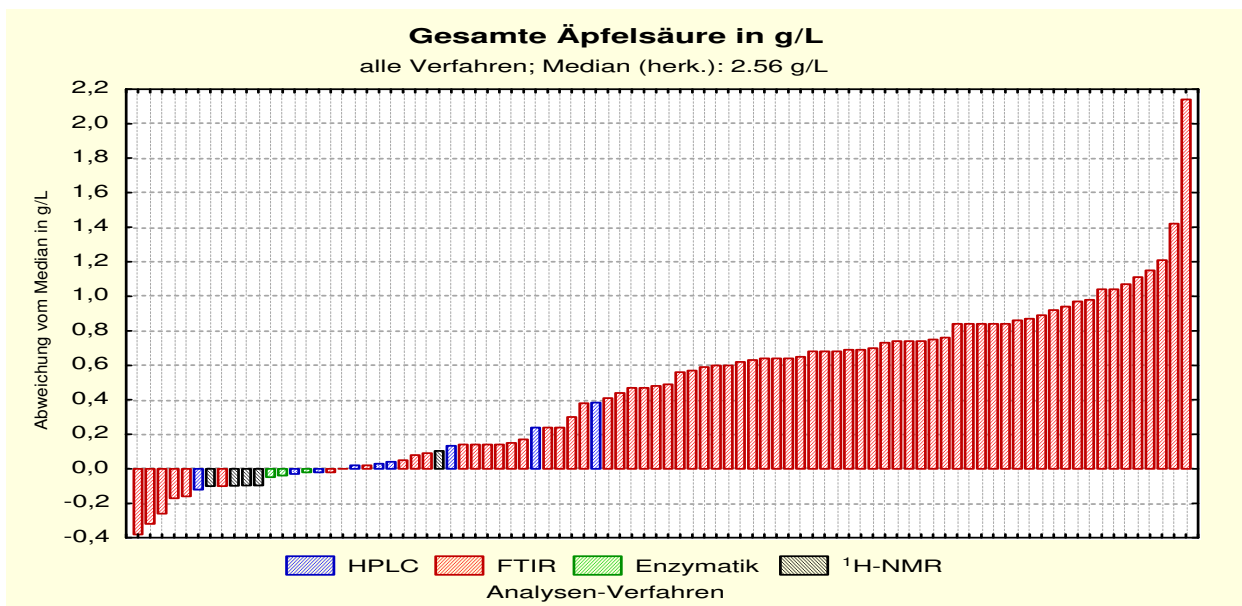
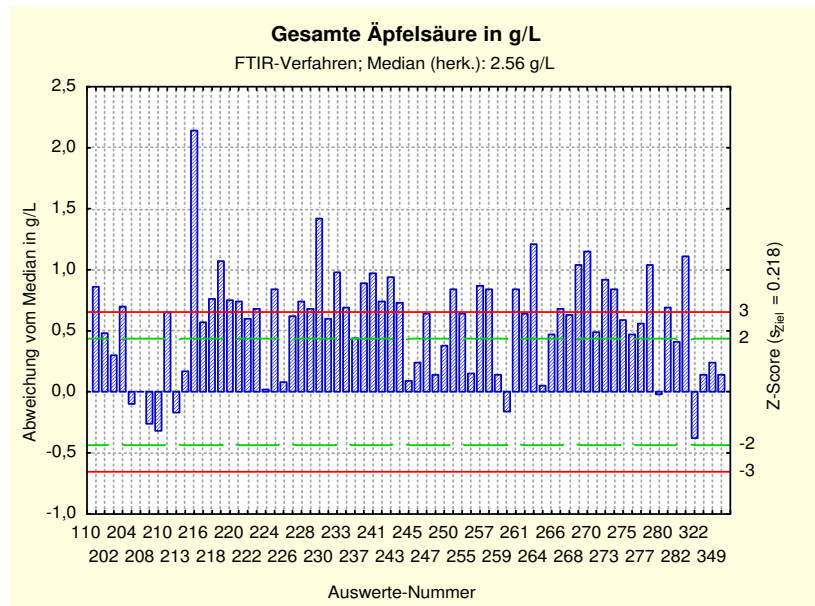
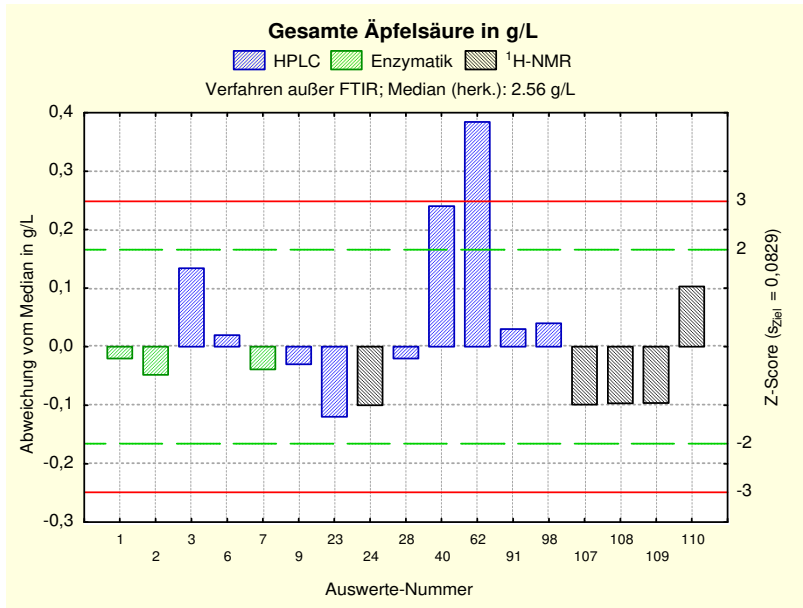
**5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	31	30
Minimalwert	2,44	2,30	2,30
Mittelwert	2,608	2,583	2,564
Median	2,560	2,530	2,530
Maximalwert	2,94	3,16	2,91
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,141	0,170	0,135
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,041	0,031	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,126	0,124	0,124
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,083	0,082	0,082
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218		
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,12	1,37	1,08
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,70	2,07	1,64
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,65		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,32	0,25	0,20
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,49	0,37	0,30
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,19		

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	9	2,624	0,146
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	2,521	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	2	2,526	0,022
	herkömmliche Verfahren ohne IC: Ges. Äpfelsäure	12	2,588	0,109
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	3,122	0,409
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,464	0,005
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	25	2,589	0,157
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	6	2,496	0,046
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	31	2,566	0,138





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

### 5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,980	-0,004	-0,08	
03	HPLC	1,001	0,016	0,30	
05	enzymat. autom.	0,960	-0,024	-0,44	
06	enzymat. autom.	0,989	0,005	0,08	
07	HPLC	0,936	-0,048	-0,87	
08	enzymat. autom.	1,040	0,056	0,99	
09	enzymat. Hand	0,995	0,011	0,19	
11	enzymat. autom.	0,964	-0,020	-0,37	
20	enzymat. autom.	<0,4			
23	HPLC	0,730	-0,254	-4,56	
24	NMR	0,910	-0,074	-1,33	
28	HPLC	1,010	0,026	0,46	
40	HPLC	0,950	-0,034	-0,62	
62	enzymat. autom.	1,009	0,024	0,44	
63	enzymat. Hand	1,113	0,129	2,30	
68	enzymat. autom.	0,950	-0,034	-0,62	
81	enzymat. Hand	0,882	-0,102	-1,83	
86	enzymat. Hand	1,030	0,046	0,82	
91	HPLC	1,060	0,076	1,35	
98	HPLC	0,800	-0,184	-3,31	
107	NMR	0,895	-0,090	-1,61	
108	NMR	0,854	-0,130	-2,33	
109	NMR	0,793	-0,191	-3,42	
110	NMR	0,954	-0,030	-0,54	

### 5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,580	0,001	0,03	0,02	
04	enz.(L-) autom.	0,605	0,026	0,73	0,60	
05	enz.(L-) autom.	0,570	-0,009	-0,25	-0,21	
06	enz.(L-) autom.	0,578	-0,001	-0,03	-0,02	
08	enz.(L-) autom.	0,650	0,071	2,00	1,64	
09	enz.(L-) Hand	0,578	-0,001	-0,03	-0,02	
11	enz.(L-) autom.	0,631	0,052	1,46	1,20	
12	enz.(L-) autom.	0,620	0,041	1,15	0,94	
14	enz.(L-) autom.	0,751	0,172	4,84	3,96	
16	enz.(L-) autom.	0,855	0,276	7,76	6,36	(**)
17	enz.(L-) autom.	0,500	-0,079	-2,22	-1,82	
20	enz.(L-) autom.	0,570	-0,009	-0,25	-0,21	
27	enz.(L-) autom.	0,557	-0,022	-0,62	-0,51	
28	enz.(L-) autom.	0,536	-0,043	-1,21	-0,99	
31	enz.(L-) autom.	0,444	-0,135	-3,80	-3,11	
39	enz.(L-) autom.	0,520	-0,059	-1,66	-1,36	
42	enz.(L-) autom.	0,630	0,051	1,43	1,17	
43	enz.(L-) autom.	0,640	0,061	1,72	1,40	
45	enz.(L-) autom.	0,603	0,024	0,67	0,55	
48	enz.(L-) autom.	0,870	0,291	8,18	6,70	(*)
50	enz.(L-) autom.	0,640	0,061	1,72	1,40	
55	enz.(L-) autom.	0,600	0,021	0,59	0,48	
56	enz.(L-) autom.	0,570	-0,009	-0,25	-0,21	
61	enz.(L-) autom.	0,500	-0,079	-2,22	-1,82	
62	enz.(L-) autom.	0,579	0,000	0,00	0,00	
63	enz.(L-) Hand	0,690	0,111	3,12	2,56	
68	enz.(L-) autom.	0,540	-0,039	-1,10	-0,90	
81	enz.(L-) Hand	0,557	-0,022	-0,62	-0,51	
86	enz.(L-) Hand	0,604	0,025	0,70	0,58	

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

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



**5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,430	0,446	7,98	2,13	
202	FTIR	1,150	0,165	2,96	0,79	
203	FTIR	0,845	-0,139	-2,50	-0,67	
204	FTIR	0,480	-0,504	-9,04	-2,41	
206	FTIR	1,490	0,506	9,06	2,42	
208	FTIR	1,150	0,165	2,96	0,79	
209	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
210	FTIR	1,060	0,076	1,35	0,36	
212	FTIR	0,530	-0,454	-8,14	-2,17	
213	FTIR	0,730	-0,254	-4,56	-1,22	
214	FTIR	0,710	-0,274	-4,92	-1,31	
216	FTIR	0,900	-0,084	-1,51	-0,40	
217	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
218	FTIR	0,750	-0,234	-4,20	-1,12	
219	FTIR	1,310	0,326	5,83	1,56	
220	FTIR	1,270	0,286	5,11	1,37	
221	FTIR	0,700	-0,284	-5,10	-1,36	
222	FTIR	1,440	0,456	8,16	2,18	
223	FTIR	0,930	-0,054	-0,98	-0,26	
224	FTIR	0,860	-0,124	-2,23	-0,60	
225	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
226	FTIR	0,530	-0,454	-8,14	-2,17	
227	FTIR	0,860	-0,124	-2,23	-0,60	
228	FTIR	0,700	-0,284	-5,10	-1,36	
229	FTIR	1,000	0,016	0,28	0,07	
230	FTIR	0,950	-0,034	-0,62	-0,17	
231	FTIR	1,360	0,376	6,73	1,80	
233	FTIR	1,120	0,136	2,43	0,65	
235	FTIR	1,460	0,476	8,52	2,28	
237	FTIR	0,600	-0,384	-6,89	-1,84	
238	FTIR	0,750	-0,234	-4,20	-1,12	
241	FTIR	1,130	0,145	2,61	0,70	
242	FTIR	0,200	-0,784	-14,05	-3,75	
243	FTIR	1,120	0,136	2,43	0,65	
245	FTIR	0,640	-0,344	-6,17	-1,65	
246	FTIR	1,150	0,165	2,96	0,79	
247	FTIR	0,920	-0,064	-1,16	-0,31	
249	FTIR	1,200	0,216	3,86	1,03	
250	FTIR	1,210	0,226	4,04	1,08	
254	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
255	FTIR	1,000	0,016	0,28	0,07	
256	FTIR	1,050	0,066	1,17	0,31	
257	FTIR	1,450	0,466	8,34	2,23	
258	FTIR	0,900	-0,084	-1,51	-0,40	
259	FTIR	1,040	0,056	0,99	0,27	
260	FTIR	0,800	-0,184	-3,31	-0,88	
261	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
263	FTIR	1,600	0,616	11,03	2,94	
264	FTIR	1,060	0,076	1,35	0,36	
265	FTIR	0,720	-0,264	-4,74	-1,27	
266	FTIR	0,950	-0,034	-0,62	-0,17	
267	FTIR	0,980	-0,004	-0,08	-0,02	
268	FTIR	1,330	0,346	6,19	1,65	
269	FTIR	1,400	0,415	7,44	1,99	
270	FTIR	0,380	-0,604	-10,83	-2,89	
271	FTIR	1,120	0,136	2,43	0,65	
273	FTIR	1,280	0,296	5,29	1,41	
274	FTIR	1,000	0,016	0,28	0,07	
275	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
276	FTIR	0,610	-0,374	-6,71	-1,79	
277	FTIR	0,740	-0,244	-4,38	-1,17	
280	FTIR	0,920	-0,064	-1,16	-0,31	
281	FTIR	0,780	-0,204	-3,66	-0,98	
282	FTIR	0,510	-0,474	-8,50	-2,27	
283	FTIR	0,492	-0,492	-8,82	-2,36	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

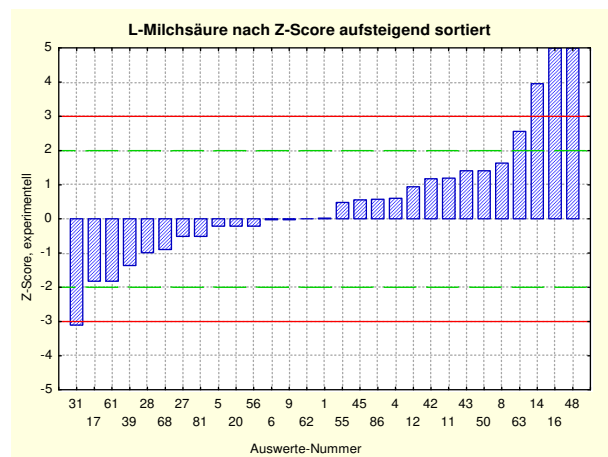
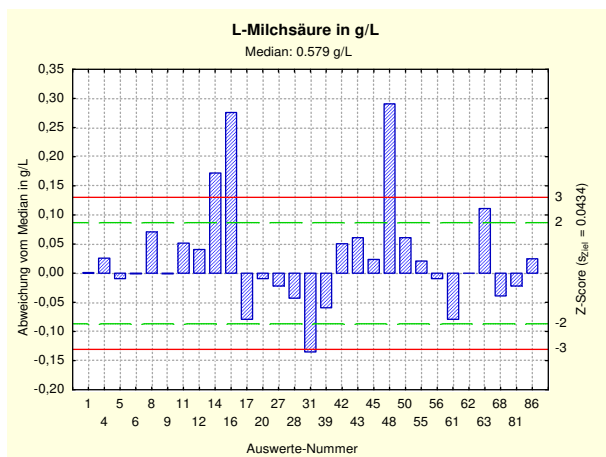
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
322	FTIR	0,970	-0,014	-0,26	-0,07	
338	FTIR	0,600	-0,384	-6,89	-1,84	
349	FTIR	1,100	0,116	2,07	0,55	
363	FTIR	1,200	0,216	3,86	1,03	

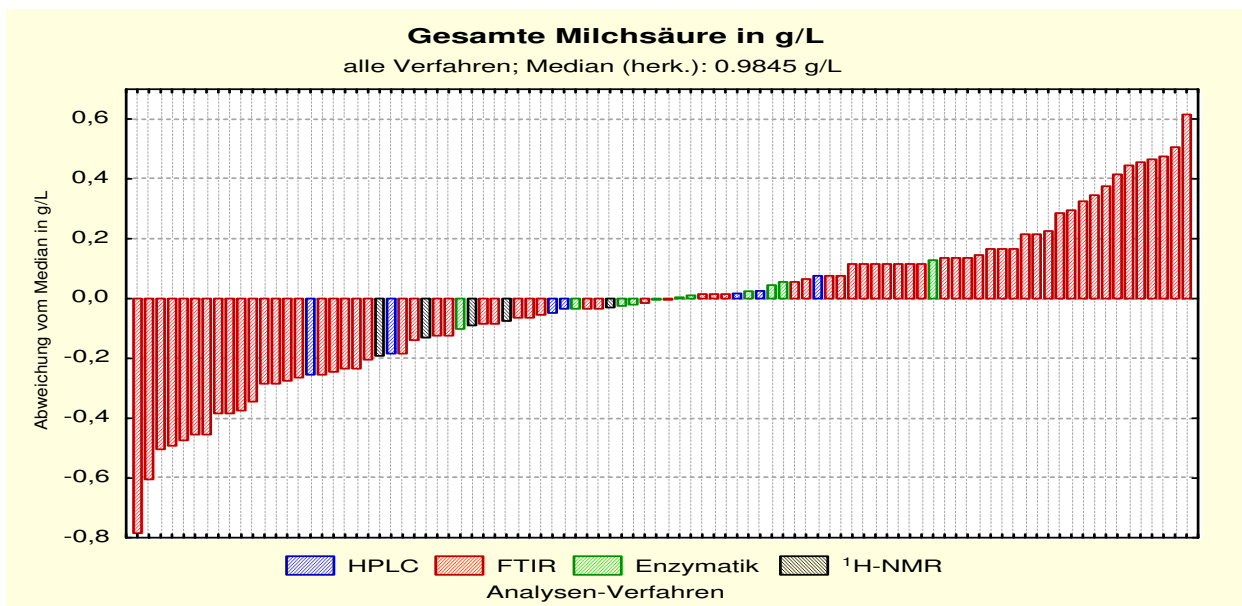
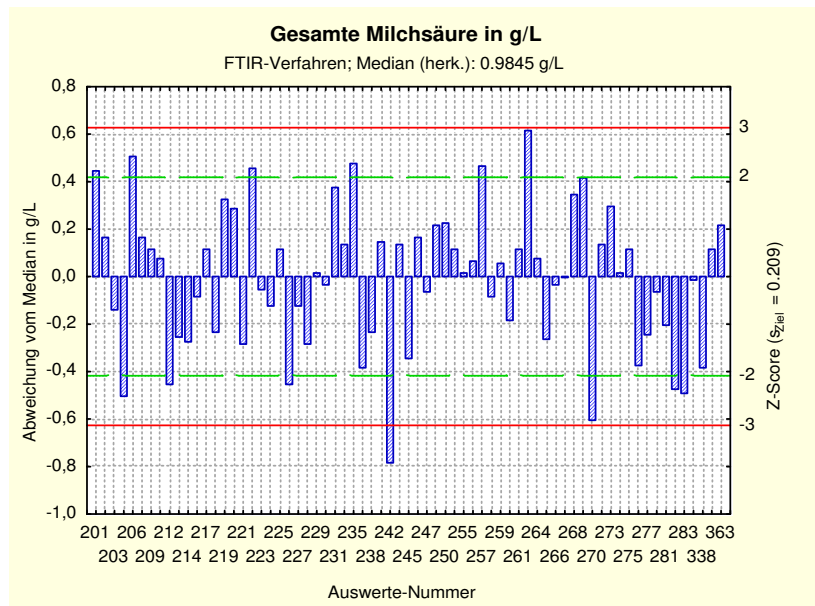
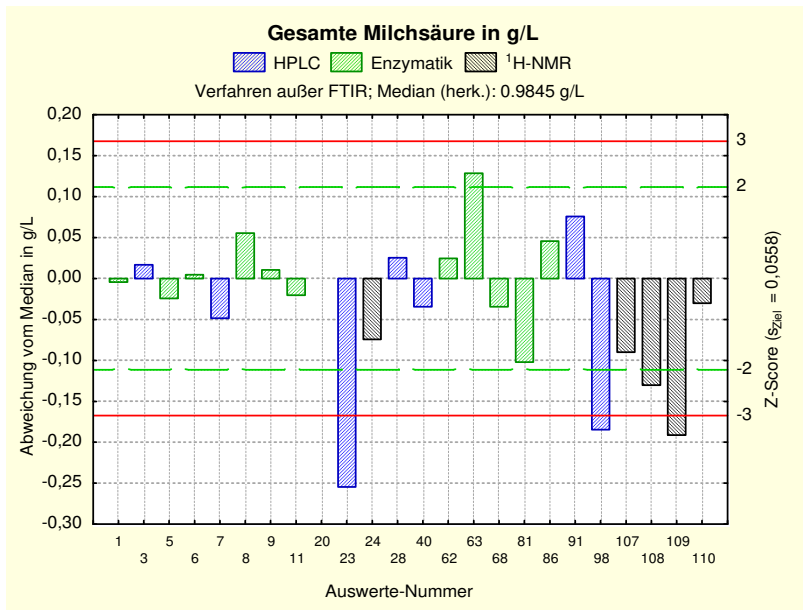
**5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	28	27	
Minimalwert	0,73	0,44	0,44	
Mittelwert	0,967	0,596	0,587	
Median	0,984	0,579	0,579	
Maximalwert	1,11	0,85	0,75	
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,090	0,079	0,062	
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,021	0,015	0,012	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,056	0,036	0,036	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )		0,043	0,043	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,209			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,62	2,23	1,75	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )		1,83	1,43	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,43			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,38	0,42	0,34	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)		0,35	0,28	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,10			

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	0,929	0,132
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	0,985	0,039
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	5	1,001	0,082
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	18	0,9772	0,067
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	0,979	0,311
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	0,884	0,064
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	24	0,592	0,070
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	0,602	0,059
	alle Verfahren L-Milchsäure	29	0,594	0,065





## 5.15 Reduktone [mg/L]

### 5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	3,0	-1,35	-2,41	
06	Acetaldehyd/potent.	3,0	-1,35	-2,41	
13	Glyoxal/potentiometr.	7,0	2,65	4,76	
17	Glyoxal/Stärke	6,0	1,65	2,97	
27	Glyoxal/potentiometr.	4,7	0,34	0,62	
28	Propionaldehyd/Stärke	4,0	-0,35	-0,62	
31	Glyoxal/Stärke	4,0	-0,35	-0,62	
40	Glyoxal/potentiometr.	3,6	-0,75	-1,34	
42	Glyoxal/Stärke	5,0	0,65	1,18	
44	Glyoxal/Stärke	2,0	-2,35	-4,21	
50	Glyoxal/Stärke	5,0	0,65	1,18	
56	Glyoxal/MTT	0,4	-3,95	-7,08	(*)
61	photometr.	2,0	-2,35	-4,21	
64	Glyoxal/Stärke	5,0	0,65	1,18	
66	Glyoxal/Stärke	5,0	0,65	1,18	
67	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-1,35	-2,41	
68	Glyoxal/potentiometr.	6,6	2,21	3,97	
70	Glyoxal/Stärke	10,0	5,65	10,15	(*)

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

#### Anmerkung:

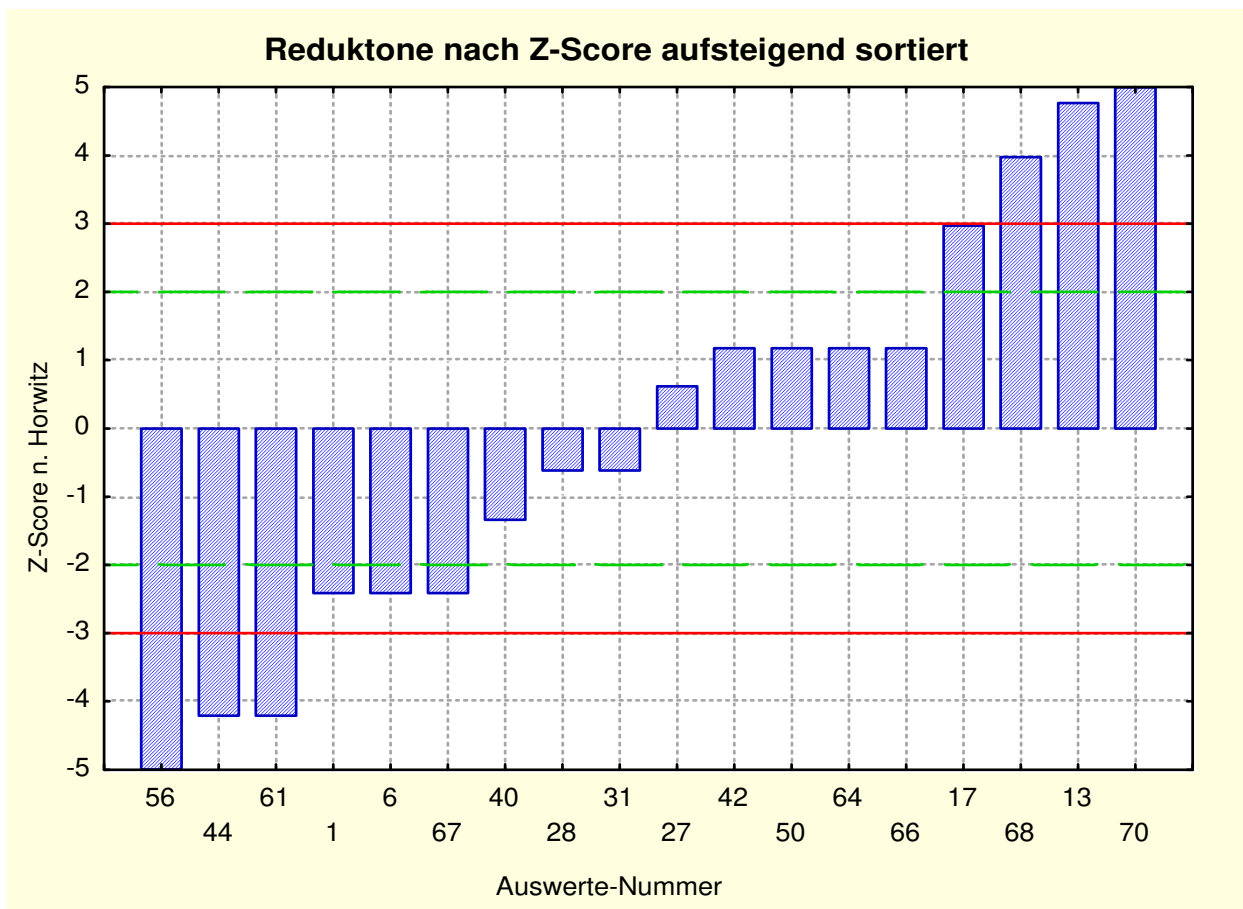
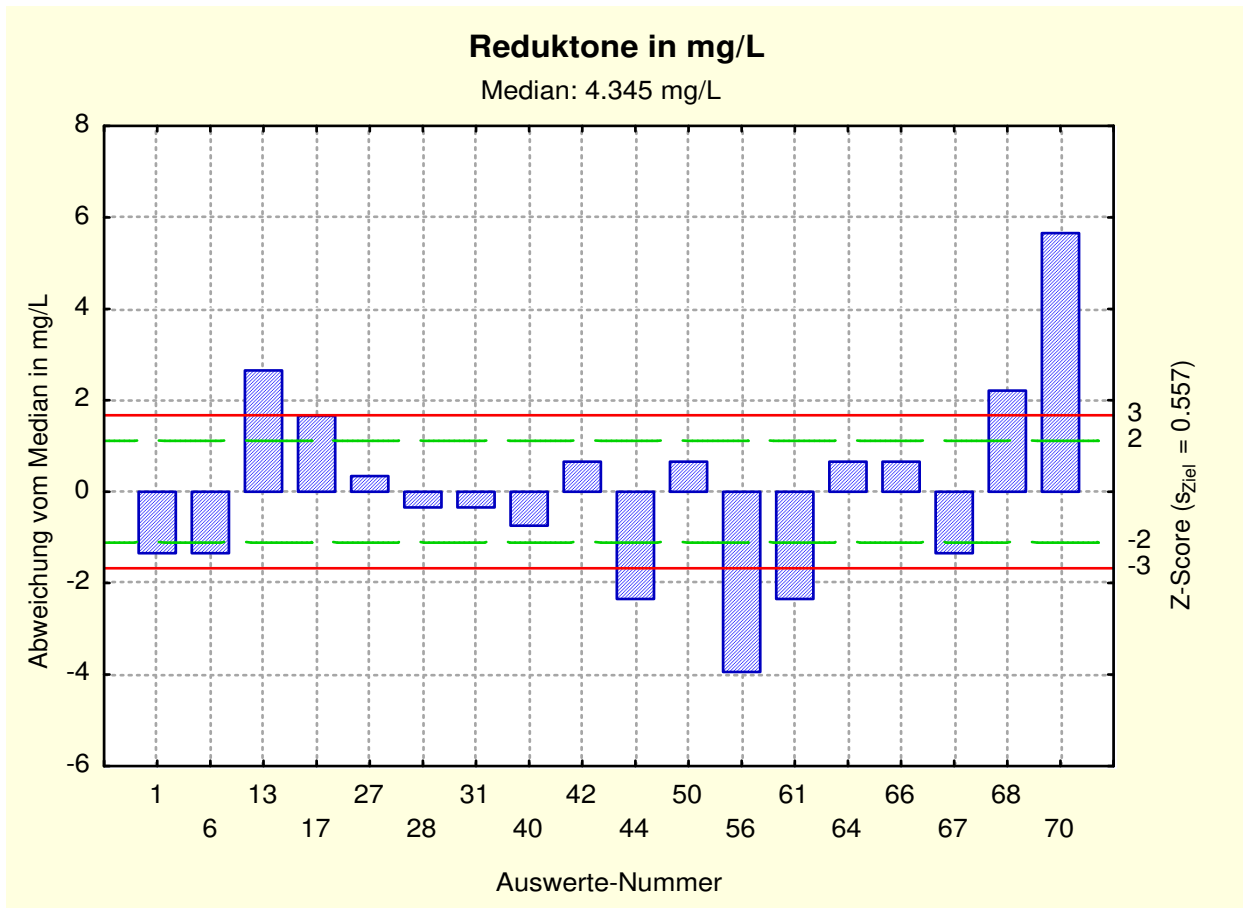
Da der Quotient  $s_L/s_H$  über 2,0 und der Quotient  $u_M/s_H$  über 0,5 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Bewertung der Laborleistung dar und werden deshalb in grauer Schriftfarbe dargestellt.

### 5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	16
Minimalwert	2,0
Mittelwert	4,30
Median	4,35
Maximalwert	7,0
Standardabweichung (sL)	1,499
Standardfehler des Mittelwertes	0,375
Zielstandardabweichung n. Horwitz (sH)	0,557
Zielstandardabweichung, experimentell (sexp)	
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,69
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,67
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	

### 5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	3,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	1	4,00	
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	9	4,71	1,77
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	5	4,97	2,00
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	0,40	
photometr.	Photometrie mit MTT (Angabe zur SO <sub>2</sub> -Bindung fehlt)	1	2,00	
	alle Verfahren	18	4,30	1,97



## 5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

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

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.2	45,2	15,38	5,38	(**)
06	LwK 6.2	26,0	-3,80	-1,33	
07	LwK 6.2	32,3	2,50	0,87	
08	LwK 6.2	25,4	-4,40	-1,54	
10	LwK 6.2	28,3	-1,50	-0,52	
11	LwK 6.2	30,4	0,60	0,21	
12	LwK 6.3	27,0	-2,80	-0,98	
14	LwK 6.3	29,8	0,00	0,00	
29	LwK 6.2	31,6	1,80	0,63	
42	LwK 6.3	33,0	3,20	1,12	
45	LwK 6.3	31,0	1,20	0,42	
48	LwK 6.3	50,0	20,20	7,06	(*)
53	LwK 6.3	42,0	12,20	4,26	
55	LwK 6.4	23,0	-6,80	-2,38	
56	LwK 6.4	22,6	-7,20	-2,52	
61	LwK 6.3	26,0	-3,80	-1,33	
62	IFU 7 gek.	31,0	1,20	0,42	
91	LwK 6.2	34,6	4,80	1,68	
103	LwK 6.2	23,1	-6,70	-2,34	
203	LwK 6.5	29,0	-0,78	-0,27	
206	LwK 6.5	14,0	-15,80	-5,52	(*)
207	LwK 6.5	28,5	-1,28	-0,45	
208	LwK 6.5	16,6	-13,18	-4,61	
210	LwK 6.5	22,8	-7,00	-2,45	
212	LwK 6.5	19,0	-10,80	-3,78	
214	LwK 6.5	26,0	-3,80	-1,33	
220	LwK 6.5	24,0	-5,80	-2,03	
226	LwK 6.5	35,0	5,20	1,82	
238	LwK 6.5	15,0	-14,80	-5,17	(*)
245	LwK 6.5	26,0	-3,80	-1,33	
251	LwK 6.5	30,0	0,20	0,07	
258	LwK 6.5	45,0	15,20	5,31	(***)
262	LwK 6.5	24,0	-5,80	-2,03	
264	LwK 6.5	44,0	14,20	4,96	
280	LwK 6.5	26,0	-3,80	-1,33	
284	LwK 6.5	30,0	0,20	0,07	
338	LwK 6.5	16,0	-13,80	-4,82	
349	LwK 6.5	31,0	1,20	0,42	
363	LwK 6.5	38,0	8,20	2,87	

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

(\*\*) Dieser Wert wurde bei den wiederholten Berechnungen nicht berücksichtigt.

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

**5.16.2 Laborergebnisse jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,50	1,63	
13	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	9,50	3,45	
17	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-2,50	-0,91	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	20,0	-8,50	-3,09	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-3,50	-1,27	
20	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,2	2,70	0,98	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-1,50	-0,54	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-0,50	-0,18	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,50	0,18	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	17,50	6,35	(*)
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-7,50	-2,72	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,2	-5,32	-1,93	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-3,50	-1,27	
35	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	3,50	1,27	
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,0	-5,50	-2,00	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,5	1,00	0,36	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	6,50	2,36	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	44,0	15,50	5,63	(*)
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,50	0,54	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-1,50	-0,54	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,6	8,10	2,94	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	11,50	4,18	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	9,50	3,45	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,8	5,30	1,92	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	10,50	3,81	
76	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,50	0,18	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-0,50	-0,18	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,9	-4,60	-1,67	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	22,0	-6,50	-2,36	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,0	5,50	2,00	
92	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-2,50	-0,91	
95	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,5	-3,00	-1,09	

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

**5.16.3 Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,0	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,0	1,00	0,35	0,36	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	-3,00	-1,04	-1,09	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	-10,00	-3,48	-3,63	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,5	-11,51	-4,00	-4,18	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	6,00	2,09	2,18	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,0	-9,00	-3,13	-3,27	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	42,0	12,00	4,17	4,36	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	-5,00	-1,74	-1,82	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	4,00	1,39	1,45	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	2,00	0,70	0,73	
44	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,0	3,00	1,04	1,09	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	9,00	3,13	3,27	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	5,00	1,74	1,82	
66	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,0	-9,00	-3,13	-3,27	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,9	-0,10	-0,03	-0,04	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	-3,00	-1,04	-1,09	
98	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,0	10,00	3,48	3,63	

Methodenkode **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteiltMethodenkode **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet

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

**5.16.4 Deskriptive Ergebnisse für Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren**

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation		Destillation + Photometrie	
	alle Daten	$Z_{Max} = 4,5$ ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	10	9	18	17
Minimalwert	23,1	23,1	22,6	22,6
Mittelwert	30,79	29,19	30,13	29,24
Median	30,70	30,40	30,10	29,80
Maximalwert	45,2	34,6	45,2	42,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	6,165	3,740	6,091	4,942
Standardfehler des Mittelwertes	1,950	1,247	1,436	1,199
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,934	2,909	2,885	2,861
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )				
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	<b>2,10</b>	1,29	2,11	<b>1,73</b>
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )				
Quotient ( $u_M/s_H$ )	<b>0,66</b>	0,43	0,50	<b>0,42</b>
Quotient ( $u_M/s_{exp,herk.}$ )				

**5.16.5 Deskriptive Ergebnisse jodometrischer Verfahren**

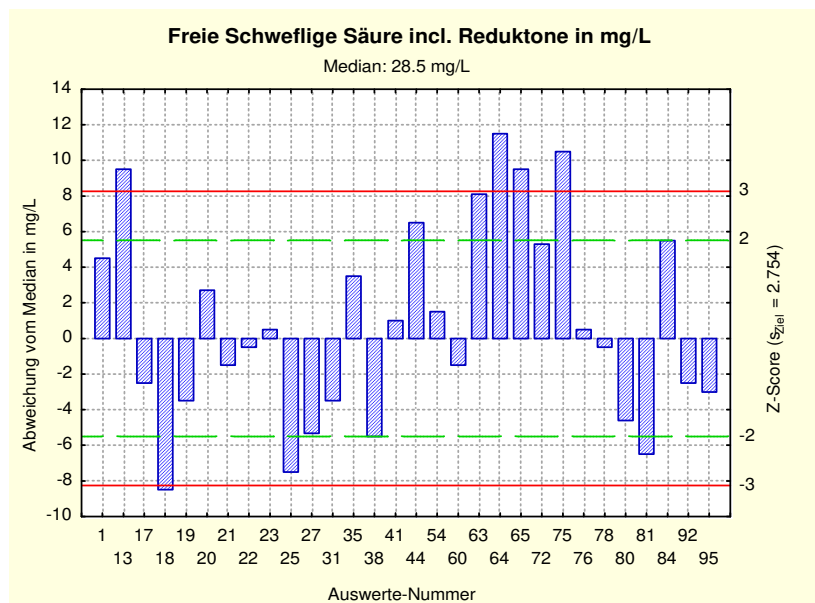
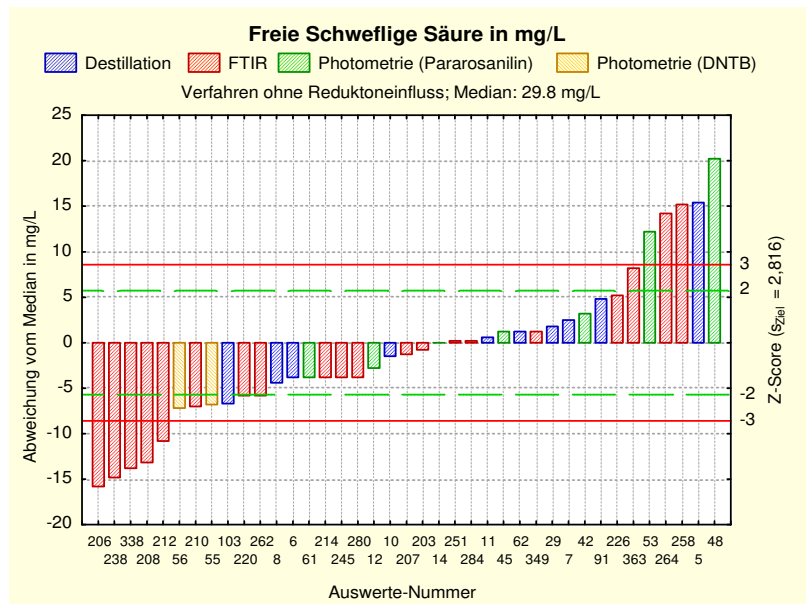
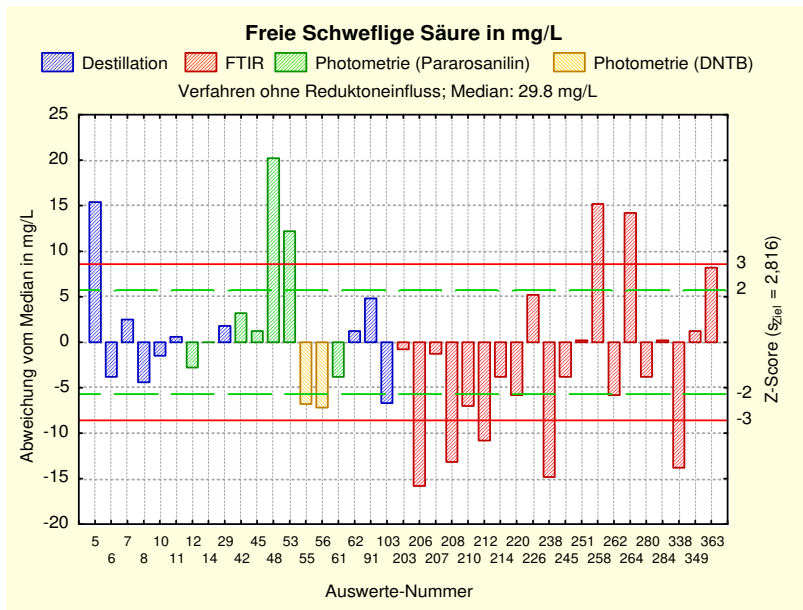
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	incl. Reduktone alle Daten	excl. Reduktone alle Daten	
		mitgeteilt	erweitert
Gültige Werte	30	11	19
Minimalwert	20,0	21,0	18,5
Mittelwert	29,29	31,26	30,07
Median	28,50	30,00	30,00
Maximalwert	40,0	42,0	42,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	5,619	6,375	6,886
Standardfehler des Mittelwertes	1,026	1,922	1,580
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,754	2,877	2,877
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_H$ incl. Red.) *)		2,754	2,754
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,04	2,22	2,39
Quotient ( $s_L/s_H$ incl. Red.)		<b>2,31</b>	<b>2,50</b>
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,37	0,67	0,55
Quotient ( $u_M/s_H$ incl. Red.)		<b>0,70</b>	<b>0,57</b>

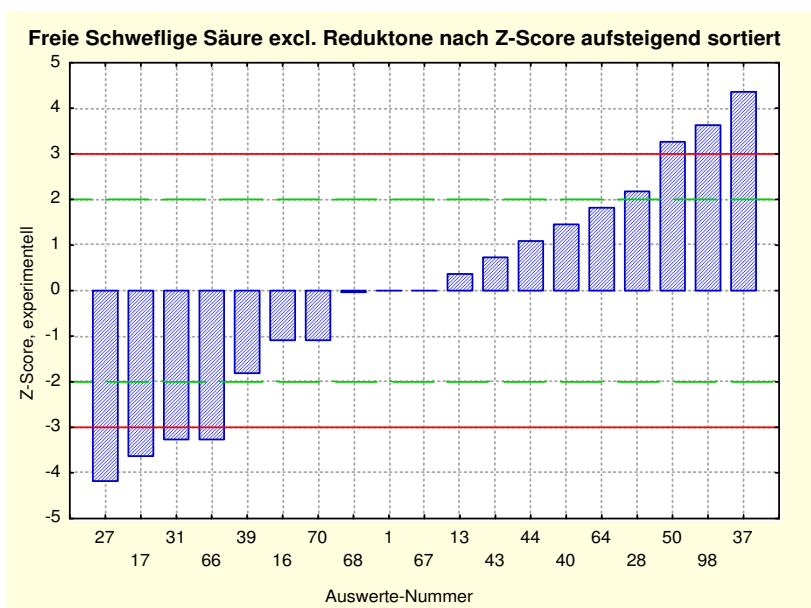
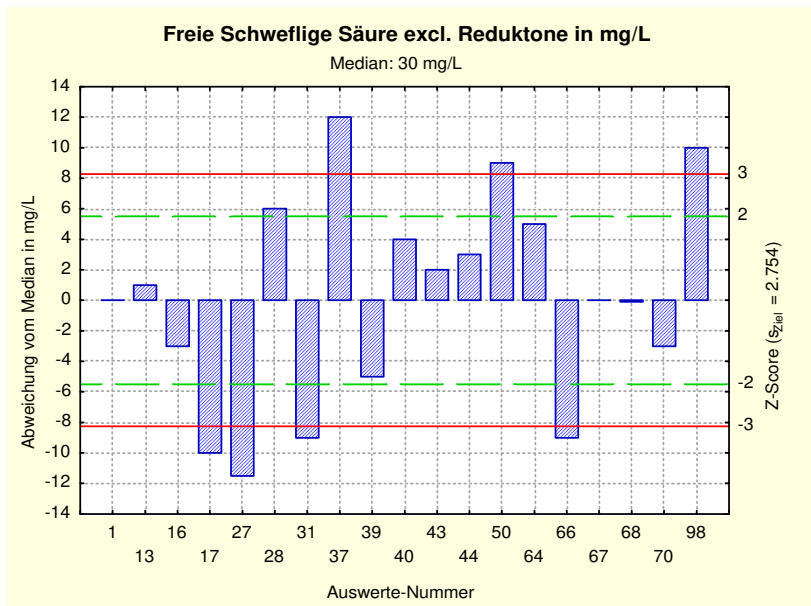
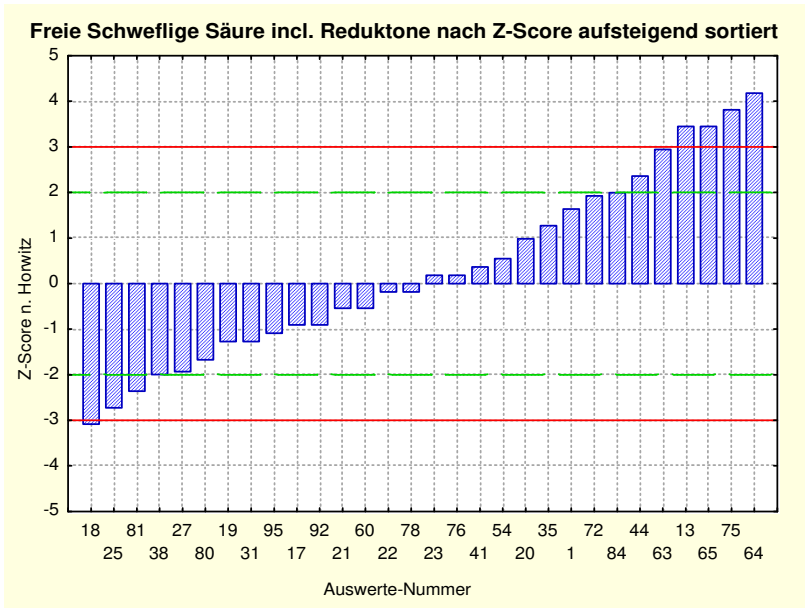
\*)  $s_H$  incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

**5.16.6 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl.Red.)	- ohne Abzug der Reduktone	32	29,96	6,85
(excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	11	31,14	6,95
Basis erweitert	- mit Abzug der Reduktone einschl. nachberechnete Werte	19	30,06	7,77
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	29,98	5,42
IFU 7 gek.	Verfahren nach IFU Nr. 7 mit Kühlung	1	31,00	
	Destillationsverfahren	10	30,06	4,83
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	7	33,71	9,00
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	2	22,80	0,32
	Destillations- und photometrische Verfahren	19	30,15	6,04
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	20	26,61	8,88
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	39	28,53	7,63







## 5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 5.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	234,0	21,50	1,42	4,01	
02	LwK 7.3	218,0	5,50	0,36	1,03	
05	LwK 7.3	218,6	6,06	0,40	1,13	
06	LwK 7.3	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	
07	LwK 7.3	225,6	13,10	0,86	2,45	
08	LwK 7.3	219,1	6,60	0,43	1,23	
10	LwK 7.3	222,0	9,50	0,63	1,77	
11	LwK 7.3	214,1	1,60	0,11	0,30	
12	LwK 7.4.2	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	
13	LwK 7.3	230,0	17,50	1,15	3,27	
14	LwK 7.4.2	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	-7,50	-0,49	-1,40	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	173,0	-39,50	-2,60	-7,37	(***)
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	199,0	-13,50	-0,89	-2,52	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	203,0	-9,50	-0,63	-1,77	
21	LwK 7.4.2	208,0	-4,50	-0,30	-0,84	
22	LwK 7.4.2	213,0	0,50	0,03	0,09	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
24	LwK 7.4.2m	206,0	-6,50	-0,43	-1,21	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	-7,50	-0,49	-1,40	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	203,4	-9,11	-0,60	-1,70	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	
29	LwK 7.3	244,0	31,54	2,08	5,89	(**)
31	LwK 7.4.1	207,0	-5,50	-0,36	-1,03	
35	LwK 7.4.1	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	235,0	22,50	1,48	4,20	
38	LwK 7.4.1	185,5	-27,00	-1,78	-5,04	(**)
39	LwK 7.7	218,0	5,50	0,36	1,03	
40	LwK 7.5.1(excl. Red.)	221,0	8,50	0,56	1,59	
41	LwK 7.4.1	209,5	-3,00	-0,20	-0,56	
42	LwK 7.7	225,0	12,50	0,82	2,33	
43	LwK 7.4.2	222,0	9,50	0,63	1,77	
44	LwK 7.5.1(incl. Red.)	214,0	1,50	0,10	0,28	
45	LwK 7.4.2	222,0	9,50	0,63	1,77	
48	LwK 7.7	191,0	-21,50	-1,42	-4,01	
50	LwK 7.7	216,0	3,50	0,23	0,65	
52	LwK 7.4.1	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
53	LwK 7.7	220,0	7,50	0,49	1,40	
54	LwK 7.8	204,0	-8,50	-0,56	-1,59	
55	LwK 7.7	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
56	LwK 7.7	224,6	12,10	0,80	2,26	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	220,0	7,50	0,49	1,40	
61	LwK 7.6	202,0	-10,50	-0,69	-1,96	
62	IFU 7	220,3	7,75	0,51	1,45	
63	LwK 7.4.2	213,5	1,00	0,07	0,19	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	218,0	5,50	0,36	1,03	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	2,50	0,16	0,47	
66	LwK 7.4.2	206,0	-6,50	-0,43	-1,21	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	202,0	-10,50	-0,69	-1,96	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	209,6	-2,89	-0,19	-0,54	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	198,0	-14,50	-0,96	-2,71	
72	LwK 7.1	201,6	-10,90	-0,72	-2,03	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	217,0	4,50	0,30	0,84	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	-7,50	-0,49	-1,40	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	199	-13,50	-0,89	-2,52	
80	LwK 7.2	210,9	-1,60	-0,11	-0,30	
81	LwK 7.4.1	206,0	-6,50	-0,43	-1,21	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	

Die mit (\*\*) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.  
Der mit (\*\*\*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

**Fortsetzung: Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
88	LwK 7.4.2	212,0	-0,50	-0,03	-0,09	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	208,0	-4,50	-0,30	-0,84	
93	LwK 7.4.2	210,0	-2,50	-0,16	-0,47	
95	LwK 7.5.1(incl. Red.)	204,0	-8,50	-0,56	-1,59	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	201,0	-11,50	-0,76	-2,15	
98	LwK 7.5.1(excl. Red.)	228,0	15,50	1,02	2,89	
99	LwK 7.4.2	216,0	3,50	0,23	0,65	
103	LwK 7.3	219,4	6,90	0,45	1,29	
203	LwK 7.8	211,5	-0,98	-0,06	-0,18	
206	LwK 7.8	211,0	-1,50	-0,10	-0,28	
207	LwK 7.8	232,1	19,60	1,29	3,66	
208	LwK 7.8	218,9	6,41	0,42	1,20	
209	FTIR(direkt)	143,0	-69,50	-4,58	-12,97	
210	LwK 7.8	245,0	32,50	2,14	6,07	
212	LwK 7.8	239,0	26,50	1,75	4,95	
214	LwK 7.8	216,0	3,50	0,23	0,65	
220	LwK 7.8	173,0	-39,50	-2,60	-7,37	
226	LwK 7.8	223,0	10,50	0,69	1,96	
238	LwK 7.8	198,0	-14,50	-0,96	-2,71	
245	LwK 7.8	223,0	10,50	0,69	1,96	
251	LwK 7.8	205,0	-7,50	-0,49	-1,40	
258	LwK 7.8	225,0	12,50	0,82	2,33	
262	LwK 7.8	193,0	-19,50	-1,28	-3,64	
264	LwK 7.8	264,0	51,50	3,39	9,61	
280	LwK 7.8	259,0	46,50	3,06	8,68	
284	LwK 7.8	206,0	-6,50	-0,43	-1,21	
338	LwK 7.8	196,0	-16,50	-1,09	-3,08	
349	LwK 7.8	224,0	11,50	0,76	2,15	
363	LwK 7.8	237,0	24,50	1,61	4,57	

Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score<sub>Horwitz</sub> gültig. Die Z-Score<sub>exper.</sub> in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

**5.17.2 Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	173,0	-32,00	-2,17	-5,97	(**)
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	199,0	-6,00	-0,41	-1,12	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	203,0	-2,00	-0,14	-0,37	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	210,0	5,00	0,34	0,93	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	203,4	-1,61	-0,11	-0,30	
44	LwK 7.5.1(incl. Red.)	214,0	9,00	0,61	1,68	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	220,0	15,00	1,02	2,80	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	218,0	13,00	0,88	2,43	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	10,00	0,68	1,87	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	217,0	12,00	0,82	2,24	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	205,0	0,00	0,00	0,00	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	199	-6,00	-0,41	-1,12	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	212,0	7,00	0,48	1,31	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	208,0	3,00	0,20	0,56	
95	LwK 7.5.1(incl. Red.)	204,0	-1,00	-0,07	-0,19	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	201,0	-4,00	-0,27	-0,75	

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

**5.17.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	210,0	-1,00	-0,07	-0,19	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	199,0	-12,00	-0,80	-2,24	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	198,7	-12,30	-0,82	-2,30	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	212,0	1,00	0,07	0,19	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	235,0	24,00	1,59	4,48	
40	LwK 7.5.1(excl. Red.)	221,0	10,00	0,66	1,87	
44	LwK 7.5.1(excl. Red.)	212,0	1,00	0,07	0,19	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	213,0	2,00	0,13	0,37	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	202,0	-9,00	-0,60	-1,68	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	209,6	-1,39	-0,09	-0,26	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	198,0	-13,00	-0,86	-2,43	
98	LwK 7.5.1(excl. Red.)	228,0	17,00	1,13	3,17	

**5.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		incl. Reduktone		excl. Reduktone
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	32	30	18	17	12
Minimalwert	185,5	201,6	173,0	199,0	198,0
Mittelwert	214,69	214,68	206,19	208,14	211,53
Median	212,50	212,50	205,00	205,00	211,00
Maximalwert	244,0	234,0	220,0	220,0	235,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	10,384	7,496	10,561	6,754	11,739
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,836	1,369	2,489	1,638	3,389
Zielstandardabweichung					
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	15,177	15,177	14,720	14,720	15,086
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,68	0,49	0,72	0,46	0,78
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,94	1,40	1,97	1,26	2,19
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,12	0,09	0,17	0,11	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,34	0,26	0,46	0,31	0,63

**5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	201,60	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	1	210,90	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	221,04	7,25
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	207,58	4,41
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	12	213,73	6,04
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	206,00	
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	220,25	
	alle Destillationsverfahren	32	214,32	8,05
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	14	205,93	6,59
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	1	220,00	
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein	3	209,67	11,01
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	18	207,35	8,05
	wie mitgeteilt			
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	7	216,79	13,19
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	198,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	8	214,40	14,25
	erweiterte Basis			
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	10	212,43	13,05
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	2	205,50	12,03
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	12	211,06	12,25
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	1	202,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	216,72	8,85
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	21	218,86	21,36
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	143,00	

