



Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

Wissenschaftlicher Arbeitsausschuss
FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinuntersuchung

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2016“

Teil 2
Durchführung und Ergebnisse
der Untersuchung eines Weißweines FT16P02
und eines Rotweines FT16P03

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

Stand: 23.01.2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	7
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	8
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT16P02 und FT16P03	8
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	14
3	Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT16P02 und FT16P03	15
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	15
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	19
4	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P02	23
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	23
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	23
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	24
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	25
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	25
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	27
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)	27
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	28
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	29
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	29
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	31
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	31
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	31
4.3.3	Angaben zu den Analyseverfahren	32
4.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	33
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	35
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	35
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	36
4.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	37
4.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	37
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	39
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	40
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	40
4.5	Glucose [g/L]	44
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	44
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	44
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	46
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	46
4.6	Fructose [g/L]	48
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	48
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	48
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	50
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	50

4.7	Glycerin [g/L]	52
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	52
4.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	52
4.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	52
4.7.4	FTIR-Laborergebnisse	53
4.8	pH-Wert	55
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	55
4.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	55
4.8.3	FTIR-Laborergebnisse	56
4.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	57
4.9	Gesamtsäure [g/L]	59
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	59
4.9.2	FTIR-Laborergebnisse	60
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	61
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	61
4.10	Weinsäure [g/L]	63
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	63
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	63
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	65
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	65
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	67
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	67
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	67
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	69
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	69
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	71
4.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	71
4.12.2	Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren	71
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	72
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	73
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	73
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	73
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	73
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	75
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	75
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	77
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	77
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	77
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	77
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	79
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	79
4.15	Reduktone [mg/L]	81
4.15.1	Laborergebnisse	81
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	81
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	82
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	83
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	83
4.16.2	Laborergebnisse jodometrisch einschließlich Reduktone	83
4.16.3	Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	84
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	85
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	85

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	87
4.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	87
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	88
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	89
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	89
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	90
5	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P03	92
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	92
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	92
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	93
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	94
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	94
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	96
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	96
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	97
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	98
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	98
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	100
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	100
5.3.2	Angaben zu den Analyseverfahren	100
5.3.3	FTIR-Laborergebnisse	101
5.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	102
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	104
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	104
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	105
5.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	106
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	106
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	108
5.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	109
5.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	109
5.5	Glucose [g/L]	113
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	113
5.5.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	113
5.5.3	FTIR-Laborergebnisse	114
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	115
5.6	Fructose [g/L]	117
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	117
5.6.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	117
5.6.3	FTIR-Laborergebnisse	118
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	119
5.7	Glycerin [g/L]	121
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	121
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	121
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	121
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	122
5.8	pH-Wert	124
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	124
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	124
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	125
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	126

5.9	Gesamtsäure [g/L]	128
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	128
5.9.2	Angaben zu den Analyseverfahren	128
5.9.3	FTIR-Laborergebnisse	129
5.9.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	130
5.10	Weinsäure [g/L]	132
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	132
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	132
5.10.3	Angaben zu den Analyseverfahren	133
5.10.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	134
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	136
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	136
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	136
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	138
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	138
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	140
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	140
5.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	140
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	141
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	142
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	142
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	142
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	143
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	144
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	144
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	146
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	146
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	146
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	147
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	148
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	148
5.15	Reduktone [mg/L]	150
5.15.1	Laborergebnisse	150
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	150
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	151
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	152
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	152
5.16.2	Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone	152
5.16.3	Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone	153
5.16.4	Deskriptive Ergebnisse	154
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	154
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	156
5.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	156
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone	157
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	158
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	158
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	159

1 Einleitung

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

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

Neben einem halbtrockenen Verschnitt aus roten Qualitätsweinen des Anbaugebietes Rheinhessen, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung ein weiterer Rotwein, zwei Weißweine und eine Roséwein sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Die Proben wurden für die Untersuchung und Auswertung in der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung als FT16LnnP01 bis FT16LnnP05 kodiert. Hierbei vertreten die Buchstaben "Lnn" eine Teilnehmer-Nummer, die bereits bei der Anmeldung vergeben wird. Sie dient der eindeutigen Identifizierung von Rohdaten der FTIR-Untersuchung. Bei der Dokumentation und Besprechung der Ergebnisse entfällt dieser Teil der Probenkodierung. Teil 1 der Berichte behandelt neben Aspekten, die für die gesamte Laborvergleichsuntersuchung von Bedeutung sind, die Ergebnisse für das Prüfgut FT16P01. Der vorliegende Teil 2 betrifft die Ergebnisse der Untersuchung der Prüfgüter FT16P02 und FT16P03. Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT16P04 und FT16P05. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 der Berichte behandelt wurden. In einigen Gliederungspunkten wird daher auf Teil 1 verwiesen.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT16P02 bzw. FT16P03, die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung und der Untersuchung dieser Prüfgüter durch die teilnehmenden Laboratorien behandelt.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

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

Das Prüfgut FT16P02 war ein trockener Mosel-Riesling des Jahrganges 2015, der eine für das Herkunftsgebiet untypische vollständige malo-laktische Vergärung erfahren hatte und einen darauf beruhenden Gehalt von 1,4 g/L Kohlendioxid aufwies.

Das Prüfgut FT16P03 bestand aus einem süßen Pfälzer Dornfelder des Jahrgangs 2015. Es handelte sich um eine unveränderte Kellereiabfüllung.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde mit beiden Proben durchgeführt.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT16P02 und FT16P03

Vom Prüfgut **FT16P02** wurden 292 Flaschen a 0,33L abgefüllt. Während der Füllung wurden wie zum Prüfgut FT16P01 bereits näher dargestellt insgesamt 18 Proben gezogen. Von diesen wurden 12 Flaschen als Probe für die Homogenitätsprüfung ausgelost. Aus jeder Probe wurden vier Serien von je zwei Messproben erstellt. Jeweils zwei Messproben wurden unter Wiederholbedingungen untersucht. Für jede Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. An einer Probenserie wurde die Relative Dichte mit elektronischer Densitometrie (Biegeschwinger) und der Vorhandene Alkohol mit Nahinfrarotspektroskopie bestimmt. Die zweite Serie wurde mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie auf Ethanol, Glucose, Fructose und Glycerin untersucht. Eine dritte Serie diente zur Bestimmung der Gesamtsäure, sowie die vierte Serie zur jodometrischen Bestimmung von Freier und Gesamter Schwefliger Säure sowie der Reduktone. Die Untersuchungen wurden an rechnergesteuerten Systemen mit automatischer Probenezuführung durchgeführt, wodurch eine geringe Wiederholstreuung begünstigt wird. Die erhaltenen Daten sind Tabelle 1 aufgeführt.

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT16P02** wurden wie in Teil 1 beschrieben graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen und auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge bzw. Probenfolge geprüft. Die densitometrischen Messergebnisse der Relativen Dichte zeigten bei der Probe 14 einen stark abweichenden Messwert unter der laufenden Nummer vier. Zugleich lag der zweite Messwert dieser Probe an der unteren Grenze der anderen Messungen.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P02

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol	Ethanol HPLC	Gesamt-extrakt	Glucose	Fructose	Zucker nach Inv.	Glycerin	Ges. Säure	pH-Wert	Reduktone	Freie SO2	Gesamte SO2
1	1	0,99373	96,16	98,93	25,2	0,27	5,73	6,00	5,99	4,90	3,37	5,2	24,0	79,5
2	3	0,99365	97,97	101,23	25,7	0,27	5,80	6,06	6,12	4,99	3,40	5,2	27,6	86,2
3	13	0,99366	98,13	101,08	25,8	0,21	5,76	5,97	6,10	4,97	3,41	5,7	31,3	89,8
4	14	0,99314	98,13	101,05	24,4	0,22	5,76	5,97	6,07	4,99	3,42	6,3	31,3	89,8
5	10	0,99359	98,05	101,12	25,6	0,26	5,78	6,05	6,11	4,97	3,42	5,7	31,8	92,0
6	6	0,99366	98,05	100,96	25,8	0,16	5,76	5,92	6,06	4,97	3,42	6,3	29,7	88,8
7	18	0,99362	98,13	100,97	25,7	-	5,76	5,76	6,08	4,93	3,41	5,7	31,3	89,1
8	11	0,99363	98,21	101,10	25,7	0,21	5,74	5,94	6,08	4,95	3,41	6,1	31,8	92,0
9	5	0,99366	98,13	101,02	25,8	0,21	5,71	5,92	6,09	4,97	3,43	5,7	29,7	88,0
10	16	0,99363	98,21	100,87	25,7	0,25	5,71	5,96	6,07	5,00	3,44	5,7	31,8	91,3
11	9	0,99355	98,21	100,80	25,5	0,27	5,74	6,00	6,08	4,94	3,44	6,8	31,3	90,6
12	8	0,99361	98,21	100,68	25,7	0,17	5,63	5,80	6,03	5,00	3,44	5,7	32,3	91,1
13	13	0,99365	98,13	98,34	25,8	0,24	5,85	6,08	6,11	4,95	3,38	6,1	31,8	89,7
14	1	0,99374	96,16	96,51	25,3	0,18	5,68	5,86	5,93	4,90	3,39	5,2	23,4	79,7
15	3	0,99367	98,05	98,20	25,8	0,13	5,67	5,80	6,03	4,97	3,40	5,7	27,6	84,7
16	10	0,99349	98,13	98,30	25,3	0,18	5,74	5,92	6,06	4,99	3,41	6,3	32,3	91,1
17	6	0,99342	98,13	98,31	25,2	0,25	5,70	5,94	6,07	4,96	3,42	6,8	30,2	90,2
18	16	0,99366	98,13	98,24	25,8	0,20	5,66	5,85	6,08	4,99	3,43	5,7	31,8	91,3
19	8	0,99361	98,13	98,33	25,7	0,23	5,75	5,97	6,05	4,99	3,43	5,7	31,8	91,3
20	18	0,99363	98,21	98,10	25,7	0,21	5,73	5,94	6,06	4,94	3,42	5,6	31,3	90,6
21	5	0,99355	98,13	97,93	25,5	0,18	5,70	5,88	6,05	4,99	3,44	6,1	29,7	88,0
22	14	0,99340	98,05	97,88	25,1	0,19	5,71	5,90	6,05	4,96	3,42	6,1	31,8	91,3
23	9	0,99356	98,05	97,71	25,5	0,12	5,68	5,80	6,00	4,96	3,43	5,7	31,3	89,8
24	11	0,99367	98,05	97,71	25,8	0,17	5,69	5,85	6,02	4,92	3,42	6,8	31,8	91,3

Abgesehen von den Messergebnissen für den Gesamtextrakt, auf die sich diese Beobachtung übertrug, zeigte kein weiterer Parameter eine auffällige Abweichung bei der Probe 14. Die Nachmessung weiterer Messproben aus diesem Gebinde ergab wiederholt den unauffälligen Wert 0,99352. Danach liegt kein Anzeichen einer Inhomogenität sondern eine fehlerhafte Beschaffenheit der ersten Messprobe oder deren erster Messung vor. Weiterhin präsentierten sich bei den Parametern Vorhandener Alkohol (NIR), Glycerin und Gesamtsäure die Messwerte der Probe 1 als Ausreißer. Dies trifft auch auf die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure zu, bei denen allerdings zusätzlich die Messwerte der Probe 3 unterhalb des Datenschwerpunktes liegen. Bei den Messergebnissen mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie zeigte sich bei dem Parameter Ethanol ein systematischer Unterschied von etwa 3 g/L zwischen beiden Messreihen. Ferner wiesen die Werte für Glycerin, Fructose und Glucose eine mäßige und schwach signifikante bis signifikante Korrelation zur Messfolge auf. Wie die Tabelle 2 aufzeigt, führte dies nicht dazu, dass bei der anschließenden Varianzanalyse der Wert für $s_r/s_{Ziel} > 0,5$ und damit die Aussagekraft der Varianzanalyse beeinträchtigt war. Wie die beobachtete Korrelation wurden auch die weiteren Beobachtungen bei der varianzanalytischen Prüfung berücksichtigt, deren wesentliche Ergebnisse in Tabelle 2 zusammengefasst sind.

Tabelle 2: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT16P02

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_r)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_z)	s_r/s_z	s_{Pr}/s_z	
Rel. Dichte, dens.	0,993591	24	4,2663	0,0096	0,000079	0,000101	0,000132	0,600	0,767	0,000091
ohne Probe 14	0,993620	22	1,8528	0,1631	0,000061	0,000040	0,000132	0,465	0,304	0,000080
Vorh. Alkohol (NIR)	97,956	24	160,956	0,0000	0,063	0,566	0,535	0,118	1,057	0,2225
ohne Probe 1	98,119	22	1,0400	0,4713	0,066	0,009	0,535	0,123	0,017	0,2263
Ethanol HPLC	99,390	24	0,1436	0,9985	2,029		0,535	3,793		1,8926
ohne Probe 1	99,542	22	0,0099	1,0000	2,056		0,535	3,843		1,9910
Gesamtextrakt	25,546	24	4,0059	0,0123	0,211	0,259	0,594	0,355	0,436	0,3084
ohne Probe 14	25,618	22	2,2103	0,1047	0,162	0,126	0,594	0,273	0,213	0,2873
Vergärbare Zucker	5,923	24	0,4188	0,9199	0,1010		0,203	0,498		0,1240
Glucose	0,208	23	0,0970	0,9997	0,0584		0,049	1,204		0,0575
Fructose	5,727	24	0,8968	0,5682	0,0497		0,198	0,251		0,0916
Glycerin	6,058	24	2,2654	0,0879	0,0337	0,0268	0,261	0,129	0,103	0,1094
ohne Probe 1	6,067	22	0,6895	0,7171	0,0328		0,262	0,125		0,1108
pH-Wert	3,417	24	7,5636	0,0008	0,0091	0,0165	0,0476	0,192	0,347	0,0209
Gesamtsäure	4,963	24	9,1169	0,0003	0,0132	0,0267	0,107	0,124	0,249	0,0446
ohne Probe 1	4,968	22	4,7286	0,0086	0,0138	0,0189	0,107	0,129	0,176	0,0454
Reduktone	5,912	24	2,6519	0,0541	0,349	0,318	0,724	0,483	0,439	0,4350
Freie SO ₂	30,363	24	181,689	0,0000	0,259	2,462	2,906	0,089	0,847	1,1905
ohne Probe 1	30,968	22	65,5120	0,0000	0,238	1,354	2,955	0,081	0,458	1,2214
ohne Proben 1+3	31,305	20	21,8036	0,0000	0,250	0,806	2,983	0,084	0,270	1,2524
Gesamte SO ₂	89,050	24	53,2108	0,0000	0,669	3,418	5,357	0,125	0,638	2,2369
ohne Probe 1	89,909	22	13,7938	0,0001	0,697	1,764	5,357	0,130	0,329	2,2758
ohne Proben 1+3	90,355	20	6,1393	0,0045	0,650	1,042	5,357	0,121	0,195	2,2983

N = Anzahl der Messwerte

Die Varianzanalyse zeigte bei den Parametern Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Gesamtextrakt, pH-Wert, Gesamtsäure, Freie und Gesamte Schweflige Säure signifikante Unterschiede zwischen den Proben. Bis auf die Parameter Ethanol HPLC und Glucose ist für die übrigen Parameter die Homogenität nachgewiesen, da der Quotient der Wiederholstandardabweichung (Fehler s_r) und der Zielstandardabweichung (s_z) unter dem möglichst einzuhaltenden Wert von 0,5 liegt. Dies trifft auch bei den Parametern Relative Dichte, Vorhandener Alkohol (NIR) und Gesamtextrakt nach Ausschluss der jeweils auffälligen Probe zu. Bei dem Parameter

Ethanol HPLC beruht die Überschreitung auf dem bereits angesprochenen systematischen Unterschied zwischen den Wiederholungen, während bei dem Parameter Glucose davon auszugehen ist, dass der sehr geringe Messwert von rund 0,2 g/L im Bereich der Bestimmungsgrenze der Hochleistungsflüssigkeitschromatographie liegt und daher die Wiederholbarkeit der Bestimmung beeinträchtigt ist. Damit tragen die Messergebnisse für diese Parameter nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei, widersprechen ihr aber nicht. Bei dem Parameter Gesamtsäure liegt der im Falle nachgewiesener Inhomogenität zu beachtende Quotient s_{Pr}/s_{Ziel} unter dem zulässigen Höchstwert von 0,3 und auch die Standardabweichung der Proben s_{Pr} liegt mit $\pm 0,027$ g/L bzw. $\pm 0,019$ g/L deutlich unterhalb des nach Fearn und Thompson ermittelten maximal tolerierbaren Wertes von rund $\pm 0,045$ g/L, der in der letzten Spalte der Tabelle 2 aufgeführt ist. Bei dem Parameter pH-Wert wird zwar der Höchstwert von 0,3 für den Quotienten s_{Pr}/s_{Ziel} überschritten, der maximale Wert für s_{Pr} jedoch ebenfalls nicht erreicht. Überschritten wird dieser Wert aber bei den Parametern Freie Schweflige Säure und Gesamte Schweflige Säure solange kein Ausschluss der auffälligen Probe 1 bei beiden und zusätzlich der Probe 3 bei der Freien Schwefligen Säure erfolgt. Bei diesen Parametern ist eine mangelnde Homogenität des Probenmaterials zu Beginn der Abfüllung zu berücksichtigen. Der betroffene Teil der abgefüllten Proben wurde für die Laborvergleichsuntersuchung nicht eingesetzt. Damit ist für das an die Teilnehmer versandte Prüfgut von einer ausreichenden Homogenität für die Laborvergleichsuntersuchung auszugehen.

Von dem Prüfgut **FT16P03** wurden 252 Flaschen a 0,25L in 21 Kartons a 12 Flaschen bezogen. Die Kartons wurden nummeriert und aus 12 durch Zufallsgenerator bestimmten Kartons je eine Flasche als Probe gezogen. Aus jeder Probe wurden 4 Serien von Messproben erstellt. Zwei Serien dienten zur Bestimmung der Relativen Dichte, des Vorhandenen Alkohols und der Gesamtsäure wie bei dem Prüfgut FT16P02 beschrieben. Von den beiden anderen Serien wurde eine zur Bestimmung von Relativer Dichte, Vorhandenem Alkohol, Gesamtextrakt, Gesamtsäure, Vergärbare Zucker(r), Glucose, Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtigiger Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) die andere zur jodometrischen Bestimmung der Freien, Gebundenen und Gesamten Schweflige Säure mit elektrometrischer Endpunktbestimmung an einem automatisierten Titrator verwendet. Die verwendeten Messergebnisse sind in Tabelle 3 und Tabelle 4 enthalten, wobei die Messwerte für Parameter die sowohl mittels FTIR als auch mit einem anderen Verfahren gemessen wurden, in der Tabelle 4 zusammengefasst sind. In der Tabelle 3 wurden die Messergebnisse für Äpfelsäure nicht berücksichtigt, da die Messwerte bei 0,5 g/L und damit an der Untergrenze der Anwendbarkeit des FTIR-Verfahrens lagen.

Tabelle 3: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P03, Teil 1 Messergebnisse mit FTIR und Jodometrie

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Vergärbare Zucker (r) g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Glycerin g/L	pH-Wert	Weinsäure g/L	Milchsäure g/L	Flüchtige Säure g/L	Freie SO ₂ mg/L	Gebundene SO ₂ mg/L	Gesamte SO ₂ mg/L
1	19	34,70	17,37	18,15	5,49	3,40	3,13	1,45	0,73	61,98	60,42	122,4
2	1	34,61	17,31	18,22	5,45	3,40	3,20	1,44	0,73	64,06	60,42	124,48
3	15	34,83	17,35	18,06	5,42	3,40	3,13	1,47	0,73	60,42	60,42	120,84
4	5	34,61	17,37	18,10	5,49	3,40	3,14	1,49	0,73	61,46	59,38	120,84
5	2	34,32	17,33	18,12	5,61	3,41	3,18	1,42	0,73	60,94	60,42	121,36
6	20	34,75	17,27	18,30	5,65	3,39	3,14	1,43	0,74	63,54	61,46	125,00
7	7	34,72	17,29	18,24	5,63	3,40	3,15	1,44	0,72	63,54	60,42	123,96
8	10	34,61	17,33	18,14	5,49	3,40	3,16	1,41	0,72	59,90	61,46	121,36
9	17	35,05	17,57	18,30	5,39	3,40	3,15	1,49	0,73	61,98	60,42	122,40
10	8	34,65	17,32	18,18	5,55	3,40	3,15	1,44	0,73	62,50	59,38	121,88
11	4	34,47	17,26	18,20	5,63	3,40	3,19	1,44	0,73	62,50	59,38	121,88
12	12	34,71	17,30	18,27	5,52	3,40	3,13	1,47	0,72	63,02	59,38	122,40
13	7	34,53	17,71	18,04	5,58	3,40	3,28	1,37	0,75	64,06	58,33	122,39
14	15	34,70	17,59	18,13	5,50	3,40	3,23	1,41	0,74	61,98	58,33	120,31
15	4	34,35	17,42	18,30	5,67	3,40	3,20	1,42	0,73	64,06	58,33	122,39
16	20	34,61	17,71	18,05	5,50	3,40	3,21	1,44	0,73	65,63	61,46	127,09
17	2	34,68	17,48	18,22	5,59	3,40	3,22	1,42	0,74	62,50	59,38	121,88
18	1	34,67	17,50	18,27	5,61	3,40	3,21	1,42	0,73	65,10	60,42	125,52
19	17	34,86	17,49	18,36	5,70	3,40	3,24	1,46	0,74	62,50	60,42	122,92
20	19	34,53	17,55	18,18	5,52	3,41	3,23	1,44	0,73	63,02	60,42	123,44
21	12	34,92	17,65	18,30	5,43	3,41	3,22	1,43	0,71	64,06	59,38	123,44
22	5	34,53	17,52	18,22	5,64	3,40	3,17	1,49	0,73	63,02	59,38	122,40
23	10	34,66	17,29	18,27	5,62	3,40	3,22	1,46	0,73	61,46	58,33	119,79
24	8	34,90	17,75	18,16	5,59	3,40	3,17	1,46	0,72	64,58	59,38	123,96

Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P03, Teil 2

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte		Vorhand. Alkohol		Gesamtextrakt		Gesamtsäure	
		dens.	FTIR	NIR g/L	FTIR g/L	dens/NIR g/L	FTIR g/L	acid. g/L	FTIR g/L
1	19	1,00819	1,00820	81,55	82,01	57,1	58,03	5,73	5,43
2	1	1,00822	1,00818	81,47	81,92	57,1	57,96	5,75	5,43
3	15	1,00821	1,00821	81,47	82,13	57,1	58,08	5,73	5,43
4	5	1,00821	1,00817	81,55	82,02	57,2	58,04	5,75	5,43
5	2	1,00822	1,00815	81,47	81,81	57,1	58,00	5,74	5,43
6	20	1,00823	1,00828	81,47	81,84	57,2	58,10	5,71	5,42
7	7	1,00819	1,00817	81,55	82,03	57,1	58,03	5,72	5,42
8	10	1,00823	1,00822	81,47	82,00	57,2	58,04	5,70	5,43
9	17	1,00829	1,00825	81,95	82,59	57,5	58,35	5,75	5,45
10	8	1,00819	1,00821	81,55	82,05	57,1	58,04	5,71	5,42
11	4	1,00822	1,00820	81,55	81,94	57,2	58,04	5,71	5,41
12	12	1,00823	1,00822	81,55	82,06	57,2	58,06	5,66	5,42
13	7	1,00820	1,00805	81,55	81,32	57,1	57,84	5,70	5,37
14	15	1,00823	1,00812	81,55	81,51	57,2	57,93	5,77	5,39
15	4	1,00822	1,00813	81,47	81,65	57,1	57,92	5,77	5,37
16	20	1,00822	1,00812	81,47	81,90	57,1	57,95	5,75	5,44
17	2	1,00823	1,00820	81,47	81,55	57,2	57,99	5,75	5,38
18	1	1,00824	1,00817	81,47	81,71	57,2	58,03	5,74	5,38
19	17	1,00829	1,00820	81,95	82,24	57,5	58,30	5,80	5,42
20	19	1,00825	1,00810	81,39	81,76	57,2	57,91	5,75	5,44
21	12	1,00820	1,00815	81,55	81,84	57,1	58,09	5,76	5,40
22	5	1,00822	1,00816	81,55	81,99	57,2	57,98	5,73	5,41
23	10	1,00823	1,00821	81,47	81,63	57,2	57,98	5,73	5,40
24	8	1,00823	1,00821	81,47	81,85	57,2	58,05	5,72	5,41

Mit den Messergebnissen des Prüfgutes **FT16P03** wurde ebenso verfahren wie bei dem Prüfgut FT16P02. Die graphischen Auswertungen zeigten bei den densitometrischen Messungen der Relativen Dichte sowie des Vorhandenen Alkohols mittels NIR und folglich auch für den Gesamtextrakt deutlich abweichende Messwerte für die Probe 17 (Lfd. Nr. 7 und 19). Eine Wiederholung der Messungen an dieser Probe sowie den benachbarten Proben zeigte keine Unterschiede zwischen den Proben. Die FTIR-Messung dieser Parameter zeigte ebenfalls keine Auffälligkeit. Wie bei der Probe 14 des Prüfgutes FT16P02 muss daher von einer an das Gefäß der Messprobe gebundenen Störung und nicht von einer Inhomogenität ausgegangen werden. Schwache und schwach signifikante Korrelationen der Messergebnisse zur laufenden Nummer der Messung wurde bei Freier Schwefliger Säure, sowie bei den FTIR-Messwerten der Parameter Gesamtsäure und Weinsäure sowie bei dem Parameter Vergärbare Zucker zur Probennummer beobachtet, während die Messungen des pH-Wertes überwiegend identische Werte erbrachten, sodass insgesamt vier Werte, die um jeweils eine Einheit auf der letzten ausgegebenen Stelle abweichen, graphisch zu Unrecht als auffällig erscheinen.

Wie die Tabelle 5 mit den Ergebnissen der anschließenden Varianzanalyse aufzeigt, lag der Wert für s_r/s_{Ziel} nie über 0,5. Auch die beobachteten schwachen Korrelationen führten somit nicht dazu, dass die Aussagekraft der Varianzanalyse beeinträchtigt war. Die auffälligen Abweichungen bei der Probe 17 bei den Parametern Relative Dichte (densitometrisch), Vorhandener Alkohol (NIR) und den daraus berechneten Werten für den Gesamtextrakt haben zwar ein signifikantes Ergebnis der Varianzanalyse zur Folge, doch sind die weiterhin zu berücksichtigenden Werte des Quotienten s_{Pr}/s_{Ziel} unauffällig und der für s_{Pr} höchstens zu tolerierende Wert

wird ebenfalls nicht überschritten. Dies trifft auch auf die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure zu, für die die Varianzanalyse ebenfalls eine Inhomogenität anzeigt. Die Prüfungen führen für alle Parameter zu dem Ergebnis, dass eine ausreichende Homogenität für die Laborvergleichsuntersuchung gegeben ist.

Tabelle 5: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT16P03

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für S_{Pr}
					Fehler (S_r)	Proben (S_{Pr})	Ziel (S_z)	S_r/S_z	S_{Pr}/S_z	
Rel. Dichte dens. (d)	1,00822	24	3,3910	0,0232	0,000017	0,000019	0,000132	0,132	0,144	0,000055
Rel. Dichte FTIR	1,00818	24	0,6597	0,7506	0,000055		0,000132	0,418		0,0001
Vorh. Alkohol NIR (N)	81,540	24	19,0519	0,0000	0,043	0,130	0,535	0,081	0,243	0,2184
Vorh. Alkohol FTIR	81,890	24	1,1992	0,3783	0,250	0,079	0,535	0,467	0,147	0,3158
Gesamtextrakt (d/N)	57,183	24	6,3636	0,0017	0,058	0,095	0,594	0,097	0,159	0,2443
Gesamtextrakt FTIR	58,031	24	3,7623	0,0157	0,072	0,085	0,594	0,122	0,143	0,2476
Gesamtsäure acidim.	5,735	24	0,8391	0,6108	0,030		0,107	0,281		0,0512
Gesamtsäure FTIR	5,410	24	0,4372	0,9093	0,0247		0,107	0,231		0,0487
Vergärbare Zucker	34,665	24	2,5681	0,0600	0,129	0,114	0,979	0,132	0,117	0,4106
Glucose	17,447	24	0,2697	0,9811	0,192		0,514	0,373		0,2722
Fructose	18,199	24	1,2684	0,3435	0,0834	0,031	0,534	0,156	0,057	0,2279
Glycerin	5,553	24	0,6994	0,7194	0,0924		0,243	0,381		0,1297
pH-Wert	3,401	24	1,0000	0,4965	0,0041	0,000	0,0476	0,086	0,000	0,0195
Weinsäure	3,185	24	0,2376	0,9882	0,0519		0,151	0,343		0,0775
Milchsäure	1,442	24	1,6907	0,1901	0,0249	0,015	0,077	0,323	0,190	0,0386
Flüchtige Säure	0,730	24	1,0909	0,4392	0,0082	0,002	0,0286	0,285	0,061	0,0137
Freie SO ₂	62,825	24	3,1177	0,0313	1,013	1,043	5,390	0,188	0,193	2,3578
Gebundene SO ₂	59,855	24	1,1953	0,3803	0,929	0,290	5,173	0,180	0,056	2,2470
Gesamte SO ₂	122,680	24	6,1073	0,0021	0,922	1,473	5,357	0,172	0,275	2,3128

2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

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

Wie bereits in Teil 1 der Berichte angemerkt, wurden in Einzelfällen in den TXT-Dateien Alkoholgehalte in der Einheit %vol mitgeteilt. Diese wurden mit dem Faktor 7,8924 in die weit überwiegend verwendete Einheit g/L umgerechnet, die in der Ergebnismappe für die Ergebnismitteilung zu diesem Parameter vorgegeben ist.

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

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT16P02 und FT16P03

3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT16P02 wird durch die in Tabelle 6 und für das Prüfgut FT16P03 durch die in Tabelle 7 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter belegt. In beiden Tabellen wird wie in Teil 1 das Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden dargestellt. Auf den Teil 1 wird auch hinsichtlich der Bedeutung der zur Bewertung des Gesamtergebnisses herangezogenen Größen und der Regeln zu ihrer Interpretation Bezug genommen. Eine Betrachtung des Gesamtergebnisses der FTIR-Messungen auf der Basis der Vergleichsstandardabweichungen dieses Verfahrens erfolgt im Abschnitt 3.2.

Für das **Prüfgut FT16P02** kam es bei 19 der 25 Datengruppen zu keinem Ergebnisausschluss, wobei grob fehlerhafte Werte, die bei 9 Datengruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Mit Ausnahme des Parameters Reduktone, bei dem vier um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte vorlagen, handelte es sich jeweils um ein Laborergebnis je Datengruppe. Wo derartige Ausreißer bei einem Teilnehmer wiederholt auftraten, deutet dies auf den Eintrag von Ergebnissen, die bei der Untersuchung einer anderen Probe erhalten wurden. Wegen einer Abweichung um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median wurden nur bei den Parametern Relative Dichte, pH-Wert und Gesamtsäure sowie Flüchtige Säure und Acetat einzelne Laborergebnisse ausgeschlossen. Auch die maßgeblichen Quotienten s_L/s_{Ziel} lagen in der Regel unter dem Richtwert 1,5. Dieser wurde nur bei den Parametern Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Weinsäure, Flüchtige Säure, Acetat, Gesamte Äpfelsäure und Reduktone eindeutig überschritten. 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 alle diese Parameter bereits in Teil 1 des Berichtes dargestellt und diskutiert. Bei dem Parameter **Weinsäure** sind – wie regelmäßig – die Ergebnisse photometrischer Bestimmungen für den erhöhten Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} ursächlich, während die nach Horwitz zu berechnende Zielstandardabweichung von den Ergebnissen hochleistungsflüssigkeitschromatographischer Bestimmungen eingehalten wurde. Besondere Verhältnisse liegen auch bei dem Parameter **Glucose** vor, die sich aber in den unauffälligen Werten der Quotienten s_L/s_{Ziel} und u_M/s_{Ziel} nicht widerspiegeln. Der vorliegende Gehalt von rund 0,23 g/L liegt offensichtlich im Bereich der Bestimmungsgrenze falls der Parameter mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie bestimmt wird. Sieben Teilnehmer haben deren Unterschreitung mitgeteilt. Obwohl die verbleibenden Werte um 0,2 g/L unauffällige Z-Score ergaben, sollte dies Anlass geben zu prüfen, ob unter den gewählten Arbeitsbedingungen die Bestimmungsgrenze nicht bereits erreicht oder sogar unterschritten wird und das Ergebnis daher nur zufällig befriedigend ist. Bei den Parametern **Flüchtige Säure** und **Acetat** ist die **Zuverlässigkeit der Z-Score eingeschränkt** und für die Parameter **Gesamte Äpfelsäure** und **Reduktone** können **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Für **alle anderen Parameter** sind die erhaltenen **Z-Score aussagekräftig**.

Tabelle 6: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT16P02

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. SL	Zielstdabw n. Horwitz		Zielstdabw exp. herk.		Zielstdabw exp. FTIR		Quotienten		
						SH	S _{exp}	S _L	S _Ü	S _L /S _H	S _L /S _{exp}	S _L /S _Ü	u _M /s _{Ziel}	u _M /s _Ü
Relative Dichte 20 °C/20 °C	59	58	0,99353	0,99353	0,000147			0,000132	0,000190		1,12	0,77	0,15	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	31	31	96,674	96,700	0,680	2,749		0,535	0,886	0,25	1,27	0,77	0,23	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	52	52	25,07	25,10	0,477	0,874		0,594	0,594	0,55	0,80	0,80	0,11	0,11
Vergärbare Zucker (g/L)														
- enzymatisch + HPLC	37	37	5,631	5,640	0,206	0,246		0,195	0,584	0,84	1,06	0,35	0,17	0,06
- reduktometrisch	18	15	5,577	5,550	0,487	0,243		0,193	0,584	2,01	2,53	0,83	0,65	0,22
Glucose (g/L)	30 (1)	30	0,229	0,233	0,048	0,0164		0,0492	0,408	2,91	0,97	0,19	0,18	0,02
Fructose (g/L)	38	38	5,440	5,400	0,205	0,237		0,189	0,330	0,86	1,08	0,62	0,18	0,10
Glycerin (g/L)	23 (1)	23	6,036	6,000	0,277	0,259		0,348		1,07		0,80	0,22	0,17
pH-Wert	49	48	3,552	3,560	0,0650			0,0476	0,0493		1,37	1,32	0,20	0,19
Gesamtsäure (g/L)	56	54	4,976	4,965	0,128	0,221		0,107	0,145	0,58	1,20	0,88	0,16	0,12
Weinsäure (g/L)	31	31	1,749	1,735	0,163	0,0903			0,227	1,80		0,72	0,32	0,13
Flüchtige Säure (g/L)	24 (1)	23	0,485	0,480	0,0580	0,0303		0,0286	0,0891	1,91	2,03	0,74	0,42	0,15
Acetat als Essigsäure (g/L)	22 (1)	21	0,454	0,450	0,0556	0,0287				1,94			0,42	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	10 (1)	10	0,120	0,108	0,0478	0,0085		0,0206	0,218	5,61	2,32	0,22	0,73	0,07
L-Äpfelsäure (g/L)	22	22	0,114	0,110	0,0218	0,0087		0,0207		2,51	1,05		0,22	
Gesamte Milchsäure (g/L)	18 (1)	18	3,293	3,330	0,228	0,157		0,209		1,45		1,09	0,34	0,26
L-Milchsäure (g/L)	20 (1)	20	3,168	3,224	0,217	0,153		0,161		1,42	1,34		0,30	
Reduktone (mg/L)	27 (4)	27	5,34	5,00	1,78	0,628				2,83			0,55	
Freie Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillation+ Photometrie	16	16	23,41	23,65	2,93	2,35				1,24			0,31	
- wie vorstehend + FTIR	32 (1)	32	23,68	23,65	3,81	2,35				1,62			0,29	
- jodometr. incl. Reduktone	49	49	26,11	26,00	3,64	2,55				1,43			0,20	
- jodometr. excl. Reduktone	29	29	20,71	21,00	3,85	2,12	2,55			1,81	1,51		0,28	
Gesamte Schweflige Säure(mg/L)														
- Destillationsverfahren	32	32	77,71	77,00	6,56	6,41	5,36			1,02	1,22		0,22	
- jodometr. incl. Reduktone	35	35	78,61	78,30	5,58	6,50	5,36			0,86	1,04		0,18	
- jodometr. excl. Reduktone	21	21	72,90	74,00	6,65	6,19	5,36			1,07	1,24		0,27	

Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7:

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

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

Weitere Erläuterungen zur Tabelle 6 und zur Tabelle 7 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Bei dem Prüfgut **FT16P03** war in der Auswertung bei 21 von 26 Wertegruppen kein Laborergebnis auszuschließen, wobei wiederum grob fehlerhafte Werte, die in sechs Gruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Bei vier Wertegruppen war aufgrund eines absoluten Betrages des Z-Score über 5 nur jeweils ein Laborergebnis auszuschließen. Lediglich bei dem Parameter Acetat wurden aus diesem Grund vier Laborergebnisse, entsprechend rund 14 %, bei der wiederholten Berechnung ausgeschlossen. Mit dieser Ausnahme traten keine auffällig hohen Ausschussquoten auf. Mit 18 Wertegruppen lag bei zwei Dritteln der Quotient s_L/s_Z im unauffälligen Bereich bis zu 1,5. Bei vier Wertegruppen (vergärbare Zucker (reduktometrisch), Weinsäure, Gesamte Äpfelsäure und Freie Schweflige Säure bei Einschluss aller Verfahren, die Reduktone nicht erfassen) war der Quotient mäßig auf einen Betrag bis zu 1,7 und bei drei weiteren (Flüchtige Säure, L-Äpfelsäure und Freie Schweflige Säure bei Einschluss von Destillations- und photometrischen Verfahren) deutlich auf 1,8 oder fast 2,0 erhöht, während nur bei zwei Wertegruppen (Reduktone und Gesamte Schweflige Säure, jodometrisch mit Abzug der Reduktone) der Höchstwert 2,0 überschritten wurde. Mit Ausnahme der Parameter Weinsäure und Freie Schweflige Säure (bei Einschluss aller Verfahren, die Reduktone nicht erfassen) ist in diesen Fällen auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt und für die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure unter Abzug der Reduktone nicht gegeben. Bei dem Parameter Weinsäure tragen, wie die Aufgliederung nach den Untersuchungsmethoden im Abschnitt 5.10.3 zeigt, bei dem Prüfgut FT16P02 auch die mittels HPLC erhaltenen Laborergebnisse zu der erhöhten Streuung der Laborergebnisse bei, wie dies bei Rotweinen in der Regel beobachtet wird. Auf die weiteren Parameter, bei denen erhöhte bzw. über dem Höchstwert liegende Quotienten s_L/s_Z vorliegen, ist bereits bei der Besprechung der Gesamtergebnisse im Abschnitt 4 des Teiles 1 der Berichte eingegangen worden, so dass hier nur darauf verwiesen wird. Bei zusammenfassender Betrachtung werden – **mit Ausnahme** der Parameter Reduktone und Gesamte Schweflige Säure (jodometrisch unter Abzug der Reduktone) – **gültige Z-Score** erhalten, wobei bei den Parametern Flüchtige Säure und Acetat die eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes zu berücksichtigen ist.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT16P03

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. S _L	Zielstdabw n. Horwitz S _H	Zielstdabw exp. herk. S _{exp}	Zielstdabw exp. FTIR S _Ü	Quotienten				
									S _L /S _H	S _L /S _{exp}	S _L /S _Ü	u _M /S _{Ziel}	u _M /S _Ü
Relative Dichte 20 °C/20 °C	55	54	1,00822	1,00821	0,000121		0,000132	0,000190		0,92	0,64	0,13	0,09
Vorhandener Alkohol (g/L)	28	28	80,810	80,920	0,547	2,363	0,535	0,886	0,23	1,02	0,62	0,19	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	45	45	57,03	57,00	0,437	1,755	0,594	0,594	0,25	0,74	0,74	0,11	0,11
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch + HPLC	35	35	34,44	34,50	0,802	1,145	0,974	0,584	0,70	0,82	1,37	0,14	0,23
- reduktometrisch	13	13	35,05	35,00	1,559	1,159	0,988	0,584	1,34	1,58	2,67	0,44	0,74
Glucose (g/L)	42	42	16,80	16,71	0,436	0,619	0,494	0,408	0,71	0,88	1,07	0,14	0,17
Fructose (g/L)	41	41	17,69	17,63	0,455	0,648	0,519	0,330	0,70	0,88	1,38	0,14	0,22
Glycerin (g/L)	24	24	5,864	5,824	0,271	0,253		0,384	1,07		0,78	0,22	0,16
pH-Wert	45	45	3,415	3,420	0,068		0,0476	0,0493		1,43	1,39	0,21	0,21
Gesamtsäure (g/L)	50	50	5,485	5,485	0,118	0,240	0,107	0,145	0,49	1,10	0,81	0,16	0,11
Weinsäure (g/L)	30	30	2,999	2,970	0,242	0,143		0,227	1,70		1,07	0,31	0,19
Flüchtige Säure (g/L)	23	23	0,366	0,370	0,0517	0,0243	0,0286	0,0891	2,13	1,81	0,58	0,38	0,12
Acetat als Essigsäure (g/L)	28	24	0,329	0,330	0,0254	0,0221			1,15			0,24	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	14 (1)	13	0,801	0,809	0,0595	0,0472	0,0384	0,218	1,26	1,55	0,49	0,43	0,13
L-Äpfelsäure (g/L)	26	26	0,771	0,775	0,0738	0,0456	0,0376		1,62	1,96		0,38	
Gesamte Milchsäure (g/L)	20 (1)	19	1,595	1,600	0,0783	0,0843		0,209	0,93		0,58	0,21	0,13
L-Milchsäure (g/L)	23 (1)	23	1,307	1,300	0,103	0,0707	0,0756		1,46	1,36		0,28	
Reduktone (mg/L)	32 (11)	32	22,01	22,00	4,80	2,21			2,17			0,38	
Freie Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillation	10	10	62,52	62,40	3,54	5,36			0,66			0,21	
- Destillation + Photometrie	18	18	57,25	60,25	9,32	5,20			1,79			0,42	
- wie vorstehend + FTIR	35	35	56,36	58,80	8,68	5,10			1,70			0,29	
- jodometrisch incl. Reduktone	39 (1)	39	63,55	65,00	6,89	5,55			1,24			0,20	
- jodometrisch excl. Reduktone	38 (1)	38	37,67	39,00	8,08	3,60	5,55		2,25	1,46		0,24	
Gesamte Schweflige Säure(mg/L)													
- Destillationsverfahren	34	33	108,17	107,00	6,81	8,47	5,36		0,80	1,27		0,22	
- jodometr. incl. Reduktone	27	27	111,02	110,00	7,52	8,67	5,36		0,87	1,40		0,27	
- jodometr. excl. Reduktone	26	26	84,97	84,50	14,77	6,93	5,36		2,13	2,76		0,54	

3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5 begründet, wurden auch für die Prüfgüter FT16P02 und FT16P03 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unter geänderter Berechnung insbesondere von Mittelwert und Standardabweichung der Laborergebnisse durch ein robustes Verfahren unterzogen. Hierbei werden insbesondere die Standardabweichungen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT16P02 in der Tabelle 8 und für das Prüfgut FT16P03 in der Tabelle 9 zusammengefasst. Wie in Abschnitt 5 des Teiles 1 der Berichte für das Prüfgut FT16P01, werden für den Parameter Fructose die Werte der Zielstandardabweichungen ($s_{\text{Ü}} = \pm 0,330 \text{ g/L}$ und $s_{\text{FTIR}} = \pm 0,222 \text{ g/L}$) eingesetzt, die für die Basiskalibrierung ermittelt wurden, die in der Produktkalibrierung AP_2011 enthalten ist.

Wie bereits in Teil 1 der Berichte für das Prüfgut FT16P01 angesprochen, weisen auch bei den Prüfgütern **FT16P02** und **FT16P03** die Messergebnisse für fast alle Parameter bei Gegenüberstellung mit der Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens **erhöhte Quotienten $s_{\text{L}}/s_{\text{FTIR}}$** auf und zeigen damit eine mangelhafte Nutzung der Möglichkeiten des Verfahrens an. Eine durchgehende Ausnahme besteht nur für den Parameter Vorhandener Alkohol.

Völlig untypisch für einen Riesling von der Mosel weist das Prüfgut **FT16P02** einen Gehalt an **Gesamter Äpfelsäure** auf, der unter der Bestimmungsgrenze des FTIR-Verfahrens liegt. Außerdem liegt der Restgehalt an **Glucose** bei diesem Prüfgut unter der Bestimmungsgrenze dieses Verfahrens. Um zu verdeutlichen, dass mit der **Unterschreitung der Bestimmungsgrenze** statistische Bewertungen eingeschränkt und insbesondere **keine Ermittlung gültiger Z-Score** verbunden ist, sind die beschreibenden statistischen Kennzahlen für diese Parameter in der Tabelle 8 in grauer Schriftfarbe dargestellt. Wegen Unterschreitung der Bestimmungsgrenze sind für die angesprochenen Parameter/Prüfgut-Kombinationen in den Datentabellen der Abschnitte 4.5.2 und 4.13.3 sowie in den Laborergebnismitteilungen keine Z-Score ausgewiesen. Schließlich ist bei diesem Prüfgut auffällig, dass die Laborergebnisse für **Freie und Gesamte Schweflige Säure** abweichend von den übrigen Prüfgütern und der bisherigen Erfahrung aus Laborvergleichsuntersuchungen eine so große Streuung aufweisen, dass bei alleiniger Betrachtung diese Ergebnisse keine gültigen Z-Score ermittelt werden könnten. Dies trifft für den Parameter Gesamte Schweflige Säure auch beim Vergleich mit der nach der Regel von Horwitz erwarteten und im methodenprüfenden Ringversuch eingehaltenen Vergleichsstandardabweichung zu. Für beide Parameter ist auch keine ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben, wie sich aus den über 0,5 liegenden Werten des Quotienten $u_{\text{M}}/s_{\text{FTIR}}$ ergibt. Eine Ursache ist aus den Daten dieser Laborvergleichsuntersuchung nicht erkennbar. Es kann allenfalls erwogen werden, ob flüchtige Nebenprodukte der malo-laktischen Gärung oder eine unzureichende Entfernung des in erhöhter Konzentration vorhandenen Kohlendioxyds zu diesem Befund beigetragen haben.

Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT16P02

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. (s _L)	Zielstdabw n. Horwitz (s _H)	Zielstdabw exp. FTIR (s _{FTIR})	Quotient s _L /s _H	Quotient s _L /s _{FTIR}	Quotient u _M /s _{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	82	0,99358	0,99359	0,000298		0,000146		2,04	0,23
Vorhandener Alkohol (g/L)	86	96,623	96,550	0,962	2,745	0,739	0,35	1,30	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	52	24,959	25,000	0,599	0,871	0,415	0,69	1,44	0,20
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	83	5,988	6,000	0,783	0,259	0,354	3,02	2,21	0,24
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	83	5,667	5,700	0,690	0,248	0,354	2,78	1,95	0,21
Glucose (g/L)	66	0,264	0,290	0,471	0,0198	0,288	23,84	1,64	0,20
Fructose (g/L)	82	5,424	5,410	0,493	0,237	0,222	2,08	2,22	0,25
Glycerin (g/L)	69	6,038	6,050	0,503	0,261	0,265	1,93	1,90	0,23
pH-Wert	81	3,526	3,200	0,0779		0,0188		4,15	0,46
Gesamtsäure (g/L)	84	4,828	4,805	0,174	0,215	0,0816	0,81	2,14	0,23
Weinsäure (g/L)	76	1,800	1,765	0,290	0,0917	0,132	3,16	2,20	0,25
Flüchtige Säure (g/L)	76	0,5747	0,5600	0,1123	0,0346	0,0427	3,25	2,63	0,30
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	58	0,1562	0,1200	0,2404	0,0093	0,0975	25,74	2,47	0,32
Gesamte Milchsäure (g/L)	76	2,937	2,900	0,333	0,140	0,0805	2,38	4,13	0,47
Freie Schweflige Säure (mg/L)	17	24,44	24,10	5,425	2,388			2,27	0,55
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	75,47	75,00	12,045	6,266	5,357	1,92	2,25	0,52

Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut FT16P03

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. s _L	Zielstdabw n. Horwitz s _H	Zielstdabw exp. FTIR s _{FTIR}	Quotient s _L /s _H	Quotient s _L /s _{FTIR}	Quotient u _M /s _{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	82	1,00828	1,00822	0,000274		0,000146		1,88	0,21
Vorhandener Alkohol (g/L)	86	80,683	80,601	1,059	2,355	0,739	0,45	1,43	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	52	57,749	57,760	0,815	1,774	0,415	0,46	1,96	0,27
Vergärbare Zucker (r)	82	34,783	34,885	1,024	1,156	0,354	0,89	2,89	0,32
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	83	34,933	34,900	0,958	1,157	0,354	0,83	2,71	0,30
Glucose (g/L)	82	16,992	17,000	0,657	0,628	0,288	1,05	2,28	0,25
Fructose (g/L)	82	17,931	17,920	0,724	0,657	0,222	1,10	3,26	0,36
Glycerin (g/L)	70	5,863	5,785	0,645	0,252	0,265	2,57	2,43	0,29
pH-Wert	82	3,414	3,410	0,0637		0,0188		3,39	0,37
Gesamtsäure (g/L)	84	5,468	5,470	0,173	0,240	0,0816	0,72	2,12	0,23
Weinsäure (g/L)	76	2,901	2,900	0,241	0,140	0,132	1,78	1,89	0,22
Flüchtige Säure (g/L)	76	0,4169	0,4100	0,1139	0,0265	0,0427	4,29	2,67	0,31
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	76	0,591	0,600	0,2642	0,0367	0,0975	7,21	2,71	0,31
Gesamte Milchsäure (g/L)	75	1,358	1,370	0,257	0,074	0,0805	3,48	3,19	0,37
Freie Schweflige Säure (mg/L)	17	56,26	55,00	6,354	4,814			1,32	0,32
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	105,39	106,00	7,444	8,406	5,357	0,89	1,39	0,32

Erläuterungen zu Tabelle 8 und Tabelle 9:**Labor-Stdabw. (s_L)** = Standardabweichung der Werte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz (s_H)** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. FTIR (s_{FTIR})** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten

(Vergleichsstandardabweichung aus der Methodenvalidierung des FTIR-Verfahrens)

Quotient (s_L/s_H) = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient (s_L/s_{FTIR})** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient (u_M/s_{FTIR})** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

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

Tabelle 10: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse der Probe FT16P02

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99358	0,99353	0,000057	0,000190	0,30
Vorhandener Alkohol (g/L)	96,550	96,700	-0,150	0,886	-0,17
Gesamtextrakt(g/L)	25,000	25,100	-0,100	0,594	-0,17
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	6,000	5,640	0,360	0,584	0,62
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	6,000	5,550	0,450	0,584	0,77
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	5,700	5,640	0,060	0,584	0,10
Glucose (g/L)	0,290	0,233	0,057	0,408	0,14
Fructose (g/L)	5,410	5,400	0,010	0,330	0,03
Glycerin (g/L)	6,050	6,000	0,050	0,348	0,14
pH-Wert	3,520	3,560	-0,040	0,049	-0,81
Gesamtsäure (g/L)	4,805	4,965	-0,160	0,145	-1,10
Weinsäure (g/L)	1,765	1,735	0,030	0,227	0,13
Flüchtige Säure (g/L)	0,560	0,480	0,080	0,089	0,90
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	0,120	0,108	0,012	0,218	0,06
Gesamte Milchsäure (g/L)	2,90	3,330	-0,430	0,209	-2,06
Freie Schweflige Säure (mg/L)	24,10	23,65	0,45	2,35	0,19
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	75,00	77,00	-2,00	5,36	-0,37

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

Eine mäßige Auswirkung von Matrixeffekten zeigt sich bei dem Prüfgut **F16P02** für den Parameter Gesamtsäure, wobei hier die Ursache eher in einem mäßig überhöhten Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden infolge unzureichender Entfernung des Kohlendioxids zu suchen ist. Dahingegen deutet der erhebliche Matrixeffekt bei dem Parameter **Gesamte Milch-**

säure, der ähnlich auch bei den anderen Prüfgütern gefunden wurde, die einer malo-laktischen Gärung unterworfen waren, und bisher als typisch für Rotweine angesehen wurde, darauf hin, dass bei diesem Parameter eine generelle Schwäche der überwiegend eingesetzten Parameterkalibrierung vorliegt.

Abgesehen von dem Parameter Gesamte Milchsäure werden beim Prüfgut **FT16P03** mäßige Matrixeffekte bei den Parametern **Gesamtextrakt** und **Freie Schweflige Säure** beobachtet, die im Falle eines einzelnen Prüfgutes aber noch nicht auf eine generelle Schwäche zumindest der jeweils überwiegend eingesetzten Parameterkalibrierungen hindeuten.

Deutliche Matrixeffekte bei mehreren Prüfgütern zeigen jedoch an, dass die eingesetzten Kalibrierungen materialspezifische Einflüsse nicht genügend ausgleichen oder in der Regel einer Slope-Interzept-Korrektur bedürfen, auf die vor allem bei den Säuren, außer Gesamtsäure, häufig verzichtet wird. In derartigen Fällen ist eine sorgfältige Interpretation unbefriedigender Z-Score von Laborergebnissen erforderlich. **Erhöhte Beträge der Z-Score können in diesen Fällen nicht zu Lasten der Teilnehmer gewertet werden**, solange nicht nachgewiesen ist, dass der Matrixeffekt durch die Auswahl einer geeigneteren Kalibrierung oder eine Slope-Interzept-Korrektur zu beheben ist.

Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse der Probe FT16P03

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00822	1,00822	0,000010	0,000190	0,05
Vorhandener Alkohol g/L	80,601	80,920	-0,319	0,886	-0,36
Gesamtextrakt (g/L)	57,760	57,000	0,760	0,594	1,28
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	34,885	34,500	0,385	0,974	0,40
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	34,885	35,000	-0,115	0,988	-0,12
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	34,900	34,500	0,400	0,974	0,41
Glucose (g/L)	17,000	16,714	0,286	0,494	0,58
Fructose (g/L)	17,920	17,630	0,290	0,519	0,56
Glycerin (g/L)	5,785	5,824	-0,038	0,348	-0,11
pH-Wert	3,410	3,420	-0,010	0,049	-0,20
Gesamtsäure (g/L)	5,470	5,485	-0,015	0,145	-0,10
Weinsäure (g/L)	2,900	2,970	-0,070	0,227	-0,31
Flüchtige Säure (g/L)	0,410	0,370	0,040	0,089	0,45
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	0,600	0,809	-0,209	0,218	-0,96
Gesamte Milchsäure (g/L)	1,370	1,600	-0,230	0,209	-1,10
Freie Schweflige Säure (mg/L)	55,00	60,25	-5,25	5,20	-1,01
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	106,00	107,00	-1,00	5,36	-0,19

4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P02

4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99352	-0,000003	-0,02	
04	LwK 8.4	0,99351	-0,000018	-0,13	
05	LwK 8.4	0,99346	-0,000067	-0,51	
06	LwK 8.4	0,99359	0,000062	0,47	
07	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
08	LwK 8.4	0,99343	-0,000097	-0,74	
09	LwK 8.1	0,99360	0,000073	0,55	
10	LwK 8.1	0,99334	-0,000188	-1,42	
12	LwK 8.4	0,99355	0,000023	0,17	
13	LwK 8.4	0,99355	0,000023	0,17	
14	LwK 8.4	0,99355	0,000023	0,17	
15	LwK 8.4	0,99340	-0,000128	-0,97	
16	LwK 8.4	0,99360	0,000073	0,55	
18	LwK 8.4	0,99330	-0,000228	-1,72	
21	LwK 8.4	0,99351	-0,000018	-0,13	
22	LwK 8.4	0,99354	0,000012	0,09	
23	LwK 8.4	0,99360	0,000073	0,55	
24	LwK 8.4	0,99325	-0,000278	-2,10	
25	LwK 8.4	0,99356	0,000032	0,25	
26	LwK 8.4	0,99338	-0,000147	-1,12	
27	LwK 8.4	0,99359	0,000062	0,47	
28	LwK 8.4	0,99330	-0,000228	-1,72	
29	LwK 8.4	0,99355	0,000023	0,17	
30	LwK 8.1	0,99350	-0,000027	-0,21	
31	LwK 8.2	0,99370	0,000173	1,31	
32	LwK 8.4	0,99340	-0,000128	-0,97	
33	LwK 8.4	0,99372	0,000193	1,46	
34	LwK 8.1	0,99360	0,000073	0,55	
38	LwK 8.4	0,99360	0,000073	0,55	
39	LwK 8.3	0,99364	0,000112	0,85	
40	LwK 8.4	0,99360	0,000073	0,55	
41	LwK 8.4	0,99353	0,000003	0,02	
44	LwK 8.4	0,99362	0,000092	0,70	
46	LwK 8.4	0,99369	0,000162	1,23	
47	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
48	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
50	LwK 8.4	0,99351	-0,000018	-0,13	
51	LwK 8.4	0,99361	0,000082	0,62	
52	LwK 8.4	0,99368	0,000152	1,16	
54	LwK 8.4	0,99348	-0,000047	-0,35	
55	LwK 8.4	0,99370	0,000173	1,31	
57	LwK 8.4	0,99347	-0,000058	-0,44	
58	LwK 8.4	0,99345	-0,000077	-0,59	
59	LwK 8.4	0,99340	-0,000128	-0,97	
62	LwK 8.4	0,99360	0,000073	0,55	
63	LwK 8.4	0,99340	-0,000127	-0,97	
64	LwK 8.3	0,99400	0,000472	3,58	
66	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
67	LwK 8.4	0,99330	-0,000228	-1,72	
69	LwK 8.1	0,99340	-0,000128	-0,97	
70	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
71	LwK 8.1	0,99360	0,000073	0,55	
72	LwK 8.4	0,99370	0,000173	1,31	
78	LwK 8.4	0,99310	-0,000428	-3,24	
79	LwK 8.4	0,99388	0,000352	2,67	
80	LwK 8.4	0,99140	-0,002128	-16,12	(**)
95	LwK 8.4	0,99340	-0,000128	-0,97	
99	LwK 8.4	0,99350	-0,000027	-0,21	
100	LwK 8.4	0,99370	0,000173	1,31	

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

4.1.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
202	FTIR	0,99359	0,000062	0,33	
203	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
204	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
205	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
206	FTIR	0,99300	-0,000528	-2,78	
207	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
208	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
209	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
210	FTIR	0,99455	0,001023	5,38	(**)
211	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
212	FTIR	0,99310	-0,000428	-2,25	
213	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
215	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
216	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
217	FTIR	0,99320	-0,000328	-1,72	
218	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
219	FTIR	0,99352	-0,000008	-0,04	
220	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
221	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
222	FTIR	0,99420	0,000672	3,54	
223	FTIR	0,99388	0,000352	1,86	
224	FTIR	0,99323	-0,000298	-1,57	
225	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
226	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
227	FTIR	0,99362	0,000092	0,49	
228	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
229	FTIR	0,99373	0,000202	1,07	
230	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
231	FTIR	0,99424	0,000713	3,75	
232	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
234	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
236	FTIR	0,99358	0,000053	0,28	
238	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
239	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
243	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
244	FTIR	0,99325	-0,000278	-1,46	
245	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
247	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
248	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
249	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
251	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
252	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
253	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
254	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
256	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
257	FTIR	0,99370	0,000173	0,91	
258	FTIR	0,99299	-0,000537	-2,83	
259	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
260	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
261	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
262	FTIR	0,99357	0,000042	0,22	
263	FTIR	0,99300	-0,000528	-2,78	
264	FTIR	0,99400	0,000472	2,49	
265	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
266	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
267	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
268	FTIR	0,99380	0,000273	1,43	
269	FTIR	0,99395	0,000422	2,22	
270	FTIR	0,99362	0,000092	0,49	
271	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
272	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
273	FTIR	0,99410	0,000572	3,01	
274	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
275	FTIR	0,99300	-0,000528	-2,78	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

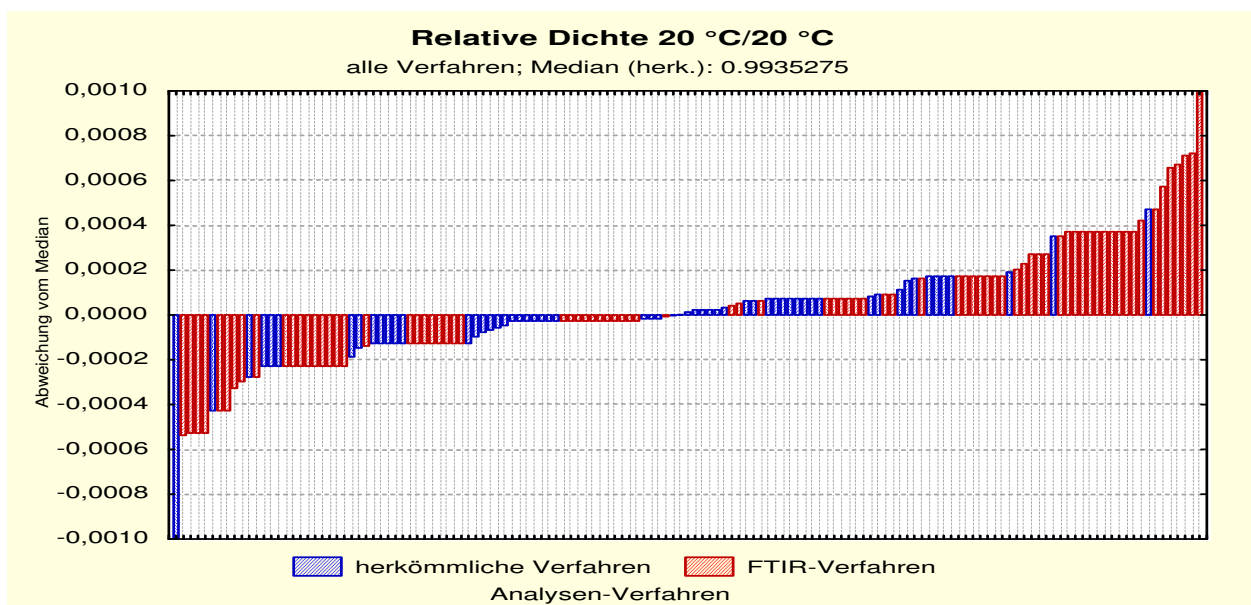
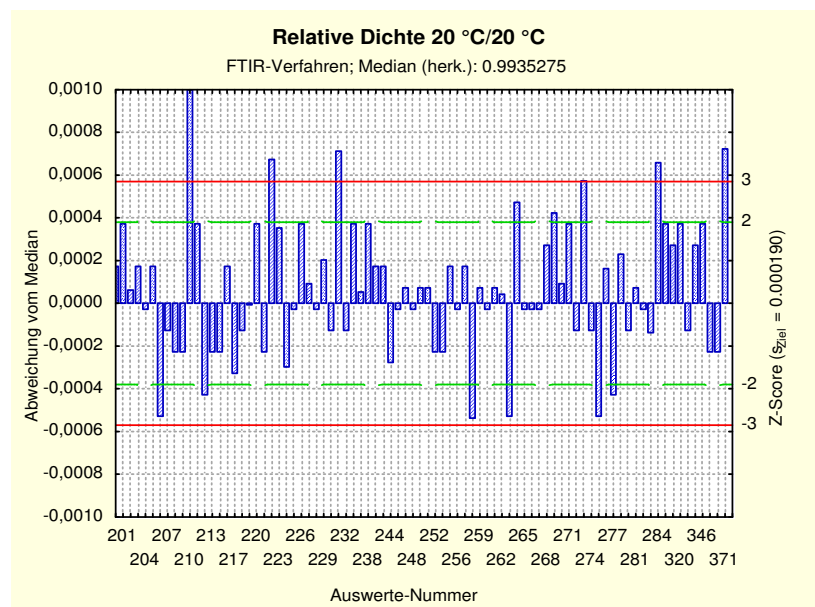
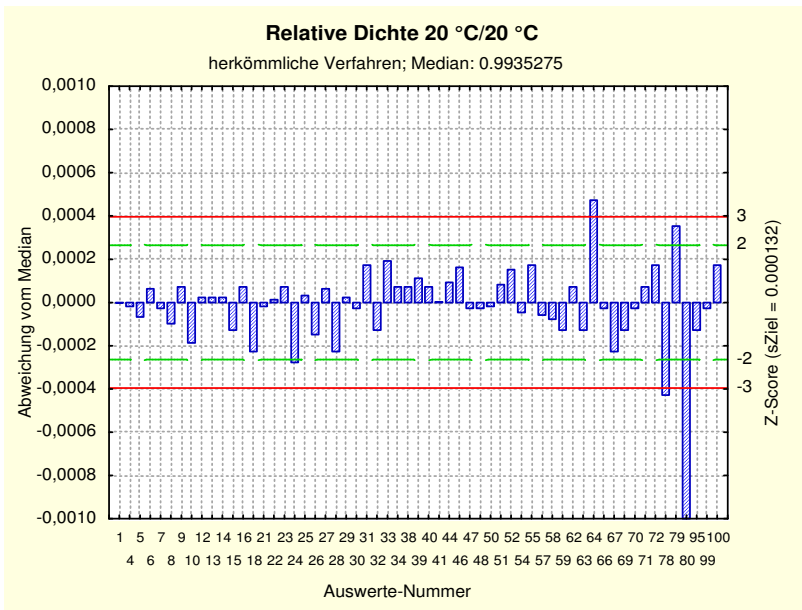
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	0,99369	0,000162	0,86	
277	FTIR	0,99310	-0,000428	-2,25	
278	FTIR	0,99376	0,000229	1,21	
279	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
281	FTIR	0,99360	0,000073	0,38	
282	FTIR	0,99350	-0,000027	-0,14	
283	FTIR	0,99339	-0,000138	-0,72	
284	FTIR	0,99418	0,000657	3,46	
285	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
286	FTIR	0,99380	0,000273	1,43	
320	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
321	FTIR	0,99340	-0,000128	-0,67	
339	FTIR	0,99380	0,000273	1,43	
346	FTIR	0,99390	0,000372	1,96	
351	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
366	FTIR	0,99330	-0,000228	-1,20	
371	FTIR	0,99425	0,000722	3,80	

4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	59	58
Minimalwert	0,99140	0,99310
Mittelwert	0,993493	0,993529
Median	0,993525	0,993528
Maximalwert	0,99400	0,99400
Standardabweichung (s_L)	0,000313	0,000147
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000041	0,000019
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,37	1,12
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,65	0,77
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,31	0,15
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,21	0,10

4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	7	0,99351	0,000118
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99370	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	2	0,99382	0,000289
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	49	0,99351	0,000133
	herkömmliche Verfahren	59	0,99352	0,000131
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	0,99358	0,000298



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	97,10	0,400	0,15	0,75	
04	LwK 2.9	98,21	1,510	0,55	2,82	
05	LwK 2.9	97,00	0,298	0,11	0,56	
06	LwK 2.4	96,19	-0,510	-0,19	-0,95	
07	LwK 2.4	95,80	-0,900	-0,33	-1,68	
08	LwK 2.4	96,70	0,000	0,00	0,00	
09	LwK 2.4	95,66	-1,040	-0,38	-1,94	
10	LwK 2.4	97,89	1,190	0,43	2,22	
12	LwK 2.1	96,99	0,286	0,10	0,53	
13	LwK 2.1	97,40	0,700	0,25	1,31	
14	LwK 2.1	97,20	0,500	0,18	0,93	
15	LwK 2.9	97,50	0,800	0,29	1,50	
16	LwK 2.1	97,00	0,300	0,11	0,56	
18	LwK 2.9	98,00	1,300	0,47	2,43	
19	LwK 2.7	96,45	-0,250	-0,09	-0,47	
21	LwK 2.7	97,03	0,330	0,12	0,62	
22	LwK 2.4	96,50	-0,200	-0,07	-0,37	
23	LwK 2.7	96,74	0,040	0,01	0,07	
24	LwK 2.9	97,80	1,100	0,40	2,06	
25	LwK 2.5	97,50	0,800	0,29	1,50	
26	LwK 2.9	98,80	2,100	0,76	3,93	
27	LwK 2.1	96,45	-0,250	-0,09	-0,47	
28	LwK 2.4	97,40	0,700	0,25	1,31	
29	LwK 2.5	95,70	-1,000	-0,36	-1,87	
30	LwK 2.4	98,10	1,400	0,51	2,62	
31	LwK 2.4	97,00	0,300	0,11	0,56	
32	LwK 2.1	96,90	0,200	0,07	0,37	
33	LwK 2.9	97,90	1,200	0,44	2,24	
34	LwK 2.4	96,06	-0,640	-0,23	-1,20	
39	LwK 2.2	96,60	-0,100	-0,04	-0,19	
40	LwK 2.9	98,10	1,400	0,51	2,62	
44	LwK 2.4	96,80	0,100	0,04	0,19	
46	LwK 2.9	97,45	0,750	0,27	1,40	
47	LwK 2.1	96,70	0,000	0,00	0,00	
48	LwK 2.5	97,10	0,400	0,15	0,75	
50	LwK 2.4	95,80	-0,900	-0,33	-1,68	
51	LwK 2.4	97,00	0,300	0,11	0,56	
52	LwK 2.9	98,10	1,400	0,51	2,62	
54	LwK 2.9	98,31	1,610	0,59	3,01	
55	LwK 2.9	95,40	-1,300	-0,47	-2,43	
57	LwK 2.1	96,78	0,080	0,03	0,15	
58	LwK 2.9	97,99	1,290	0,47	2,41	
59	LwK 2.5	96,50	-0,200	-0,07	-0,37	
62	LwK 2.1	96,70	0,000	0,00	0,00	
63	LwK 2.7	98,90	2,200	0,80	4,11	
64	LwK 2.1	96,50	-0,200	-0,07	-0,37	
66	LwK 2.5	96,20	-0,500	-0,18	-0,93	
69	LwK 2.1	97,40	0,700	0,25	1,31	
70	LwK 2.4	96,50	-0,200	-0,07	-0,37	
71	LwK 2.4	96,00	-0,700	-0,25	-1,31	
72	LwK 2.9	96,94	0,240	0,09	0,45	
75	LwK 2.3	94,40	-2,300	-0,84	-4,30	
78	LwK 2.1	94,79	-1,910	-0,69	-3,57	
79	LwK 2.9	96,80	0,100	0,04	0,19	
91	LwK 2.1	96,68	-0,018	-0,01	-0,03	
92	LwK 2.9	97,00	0,300	0,11	0,56	
93	LwK 2.5	97,20	0,500	0,18	0,93	
94	LwK 2.9	97,90	1,200	0,44	2,24	
97	LwK 2.5	96,78	0,080	0,03	0,15	
99	LwK 2.9	97,10	0,400	0,15	0,75	
100	LwK 2.9	97,50	0,800	0,29	1,50	
102	LwK 2.9	98,20	1,500	0,55	2,80	
103	LwK 2.1	96,00	-0,700	-0,25	-1,31	
104	LwK 2.9	97,48	0,780	0,28	1,46	
107	LwK 2.4	96,90	0,200	0,07	0,37	

4.2.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	96,36	-0,340	-0,12	-0,38	
202	LwK 2.8	97,10	0,400	0,15	0,45	
203	LwK 2.8	96,40	-0,300	-0,11	-0,34	
204	LwK 2.8	96,10	-0,600	-0,22	-0,68	
205	LwK 2.8	95,50	-1,202	-0,44	-1,36	
206	LwK 2.8	98,36	1,660	0,60	1,87	
207	LwK 2.8	97,40	0,700	0,25	0,79	
208	LwK 2.8	95,90	-0,800	-0,29	-0,90	
209	LwK 2.8	97,96	1,260	0,46	1,42	
210	LwK 2.8	97,00	0,300	0,11	0,34	
211	LwK 2.8	96,70	0,000	0,00	0,00	
212	LwK 2.8	97,53	0,830	0,30	0,94	
213	LwK 2.8	96,80	0,100	0,04	0,11	
215	LwK 2.8	96,80	0,100	0,04	0,11	
216	LwK 2.8	96,40	-0,300	-0,11	-0,34	
217	LwK 2.8	97,80	1,100	0,40	1,24	
218	LwK 2.8	98,40	1,700	0,62	1,92	
219	LwK 2.8	96,90	0,200	0,07	0,23	
220	LwK 2.8	99,10	2,400	0,87	2,71	
221	LwK 2.8	95,20	-1,500	-0,55	-1,69	
222	LwK 2.8	95,44	-1,260	-0,46	-1,42	
223	LwK 2.8	96,50	-0,200	-0,07	-0,23	
224	LwK 2.8	98,40	1,700	0,62	1,92	
225	LwK 2.8	96,40	-0,300	-0,11	-0,34	
226	LwK 2.8	97,82	1,120	0,41	1,26	
227	LwK 2.8	97,04	0,340	0,12	0,38	
228	LwK 2.8	95,64	-1,060	-0,39	-1,20	
229	LwK 2.8	97,20	0,500	0,18	0,56	
230	LwK 2.8	97,10	0,400	0,15	0,45	
231	LwK 2.8	92,71	-3,990	-1,45	-4,50	
232	LwK 2.8	97,10	0,400	0,15	0,45	
234	LwK 2.8	96,20	-0,500	-0,18	-0,56	
236	LwK 2.8	95,70	-1,000	-0,36	-1,13	
238	LwK 2.8	97,00	0,300	0,11	0,34	
239	LwK 2.8	96,10	-0,600	-0,22	-0,68	
243	LwK 2.8	95,90	-0,800	-0,29	-0,90	
244	LwK 2.8	97,69	0,990	0,36	1,12	
245	LwK 2.8	97,00	0,300	0,11	0,34	
247	LwK 2.8	95,97	-0,730	-0,27	-0,82	
248	LwK 2.8	96,65	-0,050	-0,02	-0,06	
249	LwK 2.8	96,38	-0,320	-0,12	-0,36	
250	LwK 2.8	96,26	-0,440	-0,16	-0,50	
251	LwK 2.8	95,70	-1,000	-0,36	-1,13	
252	LwK 2.8	96,27	-0,430	-0,16	-0,49	
253	LwK 2.8	96,60	-0,100	-0,04	-0,11	
254	LwK 2.8	96,60	-0,100	-0,04	-0,11	
256	LwK 2.8	98,60	1,900	0,69	2,14	
257	LwK 2.8	96,20	-0,500	-0,18	-0,56	
258	LwK 2.8	97,70	1,000	0,36	1,13	
259	LwK 2.8	95,30	-1,400	-0,51	-1,58	
260	LwK 2.8	96,80	0,100	0,04	0,11	
261	LwK 2.8	97,10	0,400	0,15	0,45	
262	LwK 2.8	94,81	-1,890	-0,69	-2,13	
263	LwK 2.8	98,90	2,200	0,80	2,48	
264	LwK 2.8	97,10	0,400	0,15	0,45	
265	LwK 2.8	97,40	0,700	0,25	0,79	
266	LwK 2.8	94,80	-1,900	-0,69	-2,14	
267	LwK 2.8	96,33	-0,370	-0,13	-0,42	
268	LwK 2.8	96,47	-0,230	-0,08	-0,26	
269	LwK 2.8	97,30	0,600	0,22	0,68	
270	LwK 2.8	97,00	0,300	0,11	0,34	
271	LwK 2.8	96,65	-0,050	-0,02	-0,06	
272	LwK 2.8	96,07	-0,630	-0,23	-0,71	
273	LwK 2.8	94,23	-2,470	-0,90	-2,79	
274	LwK 2.8	96,02	-0,680	-0,25	-0,77	
275	LwK 2.8	96,00	-0,700	-0,25	-0,79	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

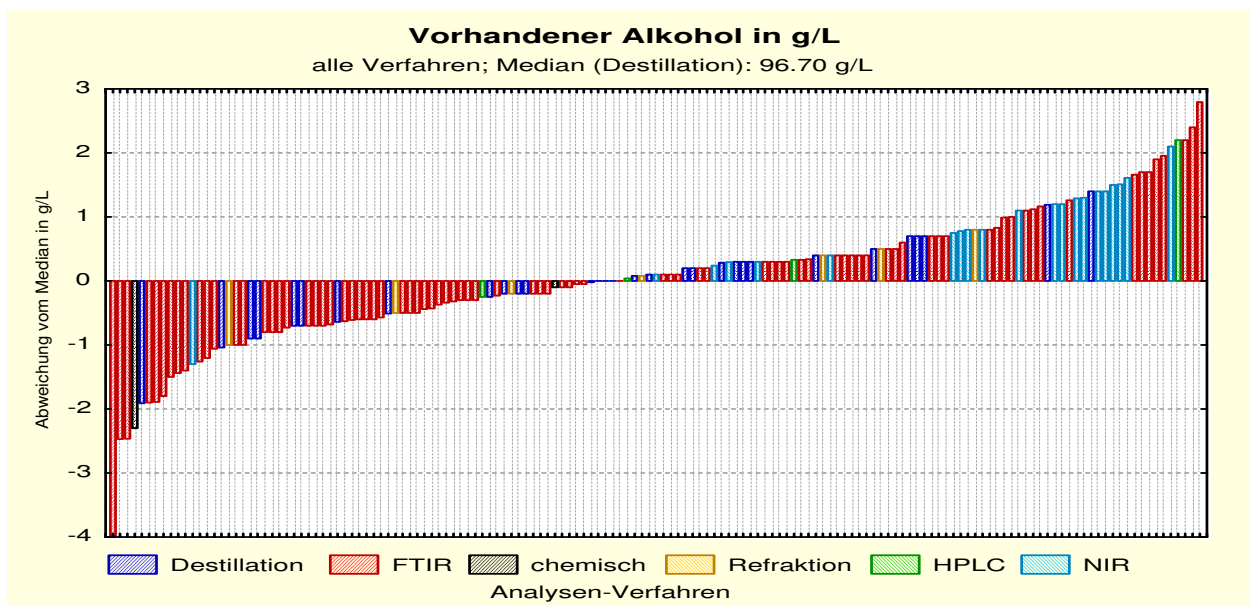
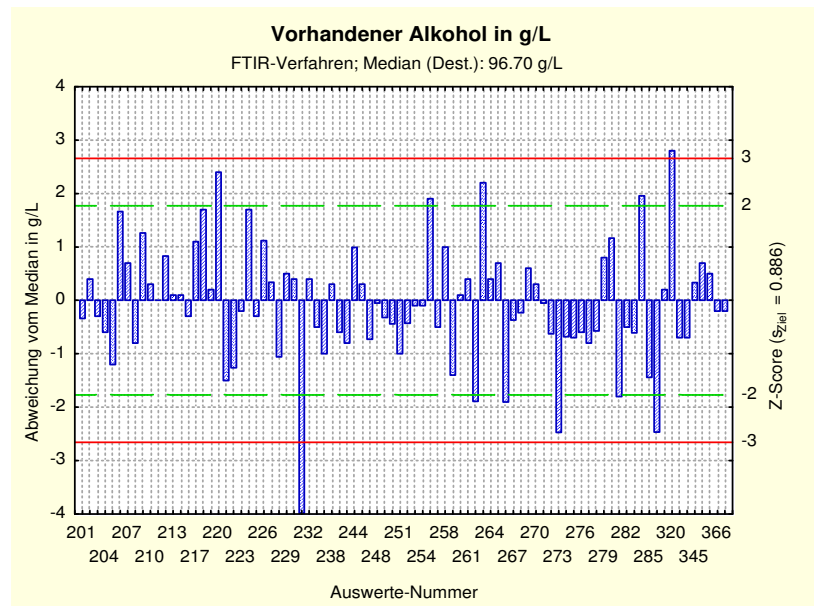
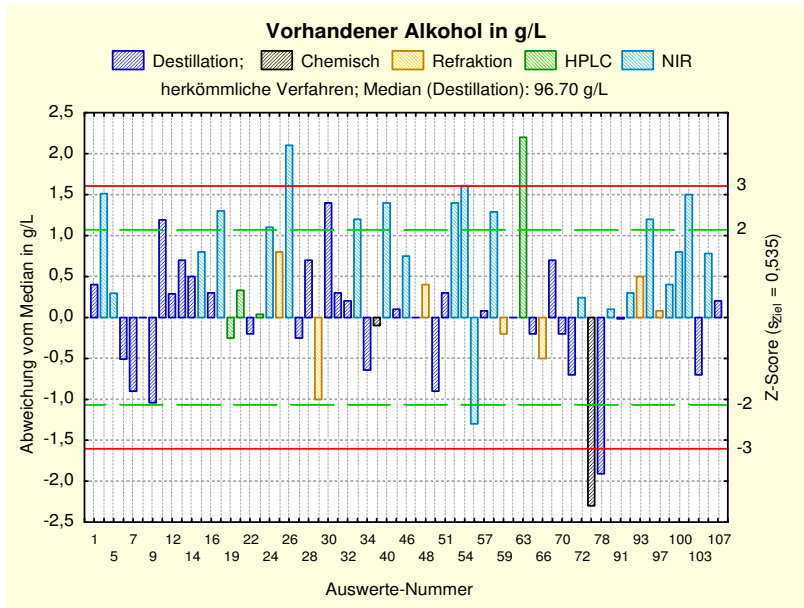
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 2.8	96,10	-0,600	-0,22	-0,68	
277	LwK 2.8	95,90	-0,800	-0,29	-0,90	
278	LwK 2.8	96,13	-0,571	-0,21	-0,64	
279	LwK 2.8	97,50	0,800	0,29	0,90	
280	LwK 2.8	97,87	1,166	0,42	1,32	
281	LwK 2.8	94,90	-1,800	-0,65	-2,03	
282	LwK 2.8	96,20	-0,500	-0,18	-0,56	
283	LwK 2.8	96,09	-0,610	-0,22	-0,69	
284	LwK 2.8	98,66	1,955	0,71	2,21	
285	LwK 2.8	95,26	-1,440	-0,52	-1,63	
286	LwK 2.8	94,24	-2,465	-0,90	-2,78	
313	LwK 2.8	96,90	0,200	0,07	0,23	
320	LwK 2.8	99,50	2,800	1,02	3,16	
321	LwK 2.8	96,00	-0,700	-0,25	-0,79	
339	LwK 2.8	96,00	-0,700	-0,25	-0,79	
345	LwK 2.8	97,03	0,330	0,12	0,37	
346	LwK 2.8	97,40	0,700	0,25	0,79	
351	LwK 2.8	97,20	0,500	0,18	0,56	
366	LwK 2.8	96,50	-0,200	-0,07	-0,23	
371	LwK 2.8	96,50	-0,200	-0,07	-0,23	

4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	31
Minimalwert	94,79
Mittelwert	96,674
Median	96,700
Maximalwert	98,10
Standardabweichung (s_L)	0,680
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,122
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,749
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,25
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,27
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,77
Quotient (u_M/s_H)	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,23
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,14

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	15	96,804	0,449
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	16 31	96,614 96,684	0,762 0,617
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	96,600	
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	94,400	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	7	96,716	0,699
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	4	97,246	1,178
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	86	96,623	0,962
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	21	97,654	0,611



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	23,50	-1,60	-1,83	-2,69	
04	LwK 3.3	25,50	0,40	0,46	0,67	
06	LwK 3.3	24,90	-0,20	-0,23	-0,34	
07	LwK 3.3	24,50	-0,60	-0,69	-1,01	
08	LwK 3.3	24,40	-0,70	-0,80	-1,18	
09	LwK 3.1	24,65	-0,45	-0,51	-0,76	
10	LwK 3.1	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
12	LwK 3.3	25,15	0,05	0,06	0,08	
13	LwK 3.2	25,40	0,30	0,34	0,51	
14	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
15	LwK 3.3	25,80	0,70	0,80	1,18	
16	LwK 3.3	25,10	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 3.3	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
21	LwK 3.3	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
22	LwK 3.3	24,90	-0,20	-0,23	-0,34	
23	LwK 3.3	25,10	0,00	0,00	0,00	
24	LwK 3.3	24,50	-0,60	-0,69	-1,01	
25	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
26	LwK 3.3	25,30	0,20	0,23	0,34	
27	LwK 3.2	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
28	LwK 3.3	25,03	-0,07	-0,08	-0,11	
29	LwK 3.3	24,60	-0,50	-0,57	-0,84	
30	LwK 3.1	25,40	0,30	0,34	0,51	
31	LwK 3.2	25,40	0,30	0,34	0,51	
32	LwK 3.2	24,60	-0,50	-0,57	-0,84	
33	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
34	LwK 3.3	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
39	LwK 3.3	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
40	LwK 3.3	25,50	0,40	0,46	0,67	
41	LwK 3.3	25,52	0,42	0,48	0,71	
44	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
46	LwK 3.3	25,60	0,50	0,57	0,84	
47	LwK 3.2	25,10	0,00	0,00	0,00	
50	LwK 3.3	24,50	-0,60	-0,69	-1,01	
51	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
52	LwK 3.3	25,80	0,70	0,80	1,18	
54	LwK 3.3	25,40	0,30	0,34	0,51	
55	LwK 3.3	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
58	LwK 3.3	25,20	0,10	0,11	0,17	
59	LwK 3.3	24,60	-0,50	-0,57	-0,84	
62	LwK 3.2	25,10	0,00	0,00	0,00	
63	LwK 3.3	25,90	0,80	0,92	1,35	
64	LwK 3.2	26,00	0,90	1,03	1,52	
69	LwK 3.3	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
70	LwK 3.3	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
71	LwK 3.3	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
79	LwK 3.3	26,10	1,00	1,14	1,68	
95	LwK 3.2	24,50	-0,60	-0,69	-1,01	
97	LwK 3.3	25,10	0,00	0,00	0,00	
99	LwK 3.3	24,90	-0,20	-0,23	-0,34	
100	LwK 3.3	25,70	0,60	0,69	1,01	

4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	23,76	-1,34	-1,53	-2,26	
202	FTIR	24,65	-0,45	-0,51	-0,76	
203	FTIR	25,50	0,40	0,46	0,67	
204	FTIR	25,50	0,40	0,46	0,67	
206	FTIR	26,14	1,04	1,19	1,75	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
209	FTIR	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
210	FTIR	27,60	2,50	2,86	4,21	
211	FTIR	25,30	0,20	0,23	0,34	
216	FTIR	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
217	FTIR	24,19	-0,91	-1,04	-1,53	
218	FTIR	24,00	-1,10	-1,26	-1,85	
219	FTIR	24,50	-0,60	-0,69	-1,01	
221	FTIR	25,30	0,20	0,23	0,34	
223	FTIR	27,30	2,20	2,52	3,70	
225	FTIR	25,20	0,10	0,11	0,17	
227	FTIR	24,70	-0,40	-0,46	-0,67	
228	LwK 3.3	24,37	-0,73	-0,84	-1,23	
229	FTIR	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
230	FTIR	26,60	1,50	1,72	2,53	
231	FTIR	24,69	-0,41	-0,47	-0,69	
232	FTIR	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
234	FTIR	25,48	0,38	0,43	0,64	
238	FTIR	24,90	-0,20	-0,23	-0,34	
239	FTIR	25,10	0,00	0,00	0,00	
244	FTIR	24,60	-0,50	-0,57	-0,84	
248	FTIR	24,70	-0,40	-0,46	-0,67	
249	FTIR	24,90	-0,20	-0,23	-0,34	
251	FTIR	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
253	FTIR	24,80	-0,30	-0,34	-0,51	
254	FTIR	25,40	0,30	0,34	0,51	
256	FTIR	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
257	FTIR	25,10	0,00	0,00	0,00	
260	FTIR	24,40	-0,70	-0,80	-1,18	
261	FTIR	25,26	0,16	0,18	0,27	
264	FTIR	25,20	0,10	0,11	0,17	
265	FTIR	23,80	-1,30	-1,49	-2,19	
266	FTIR	25,30	0,20	0,23	0,34	
268	FTIR	23,80	-1,30	-1,49	-2,19	
269	FTIR	25,80	0,70	0,80	1,18	
270	FTIR	24,40	-0,70	-0,80	-1,18	
271	FTIR	25,40	0,30	0,34	0,51	
272	FTIR	24,60	-0,50	-0,57	-0,84	
273	FTIR	25,00	-0,10	-0,11	-0,17	
274	FTIR	24,86	-0,24	-0,27	-0,40	
275	FTIR	24,00	-1,10	-1,26	-1,85	
276	FTIR	24,70	-0,40	-0,46	-0,67	
279	FTIR	24,84	-0,26	-0,30	-0,44	
281	FTIR	25,40	0,30	0,34	0,51	
282	FTIR	64,60	39,50	45,19	66,50	(*)
283	FTIR	24,40	-0,70	-0,80	-1,18	
321	FTIR	24,10	-1,00	-1,14	-1,68	
339	FTIR	25,10	0,00	0,00	0,00	
366	FTIR	25,40	0,30	0,34	0,51	

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

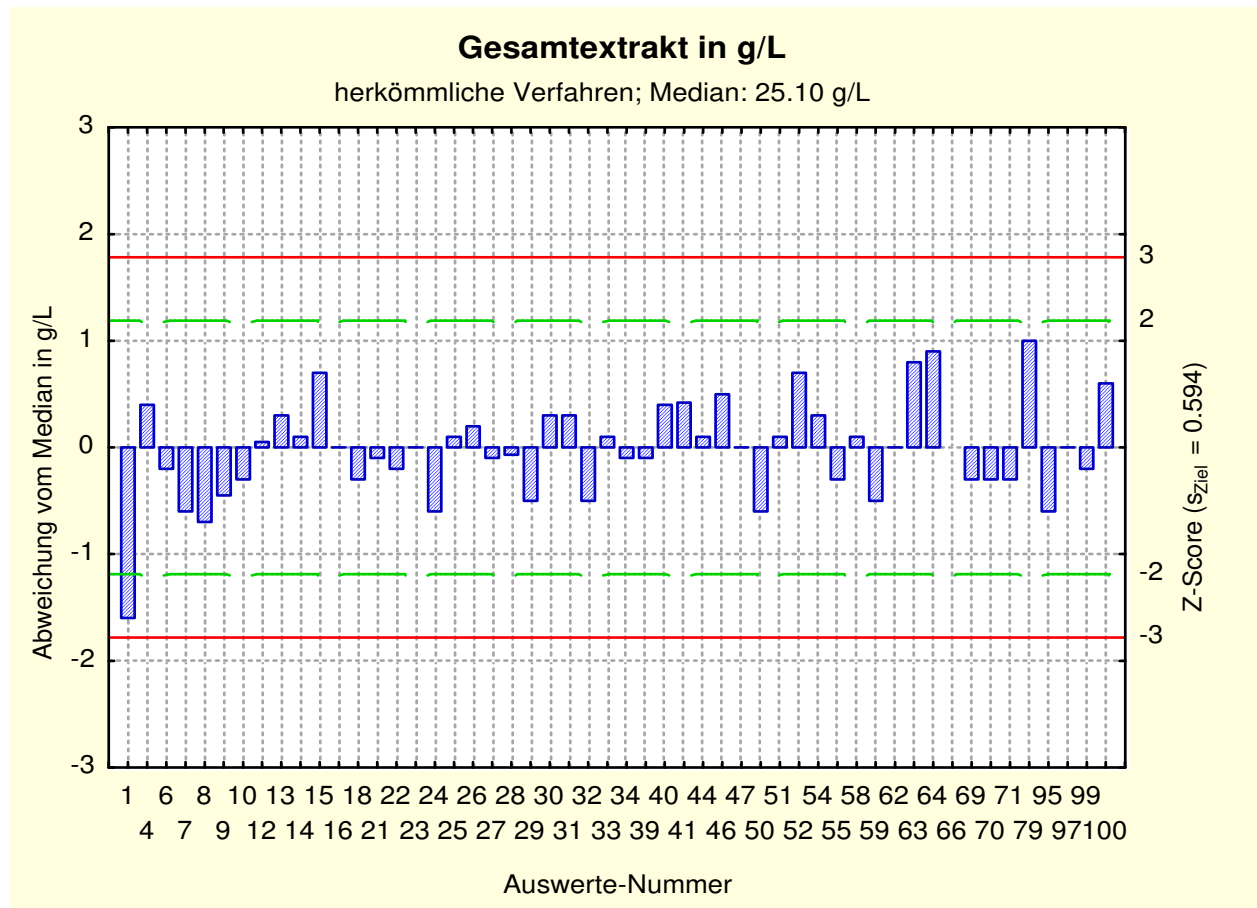
4.3.3 Angaben zu den Analyseverfahren

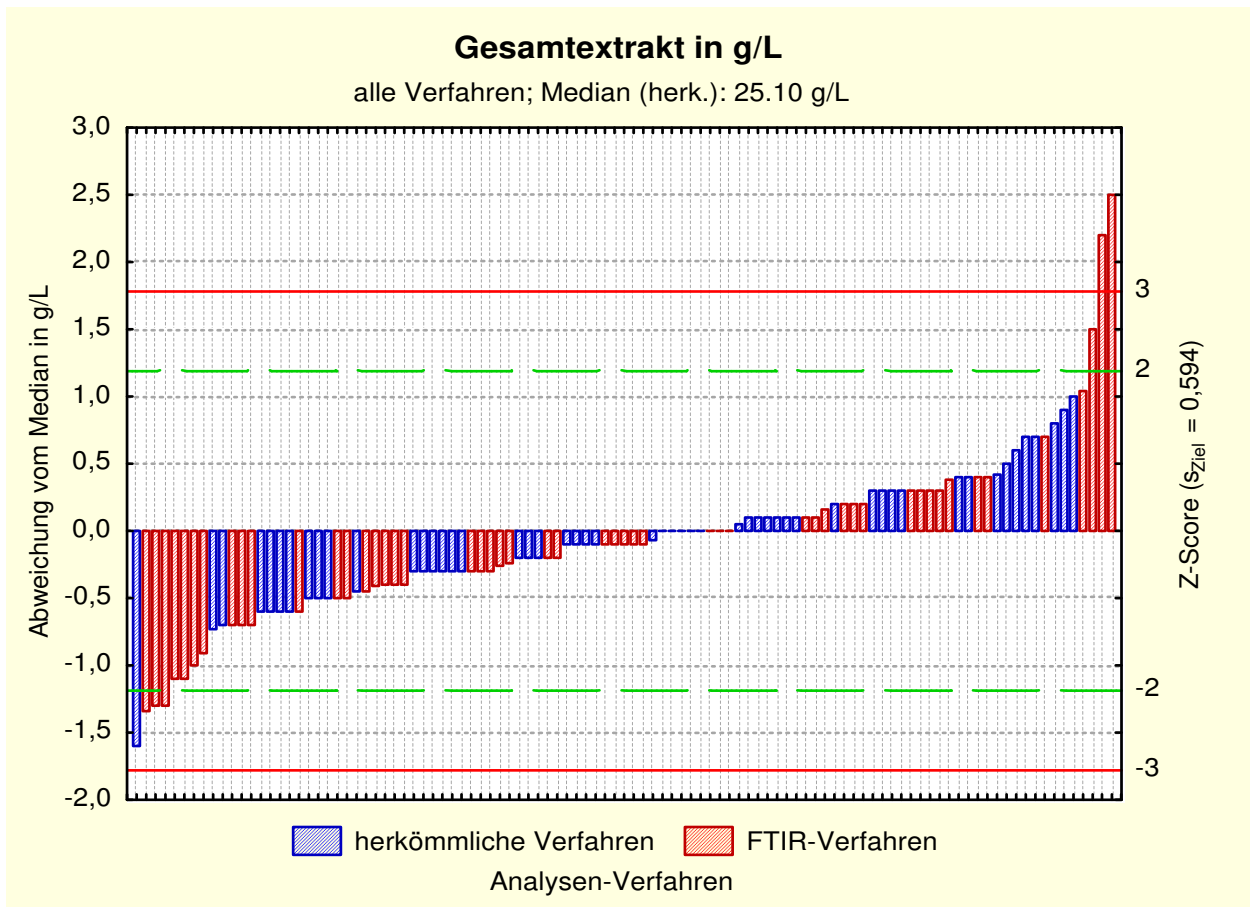
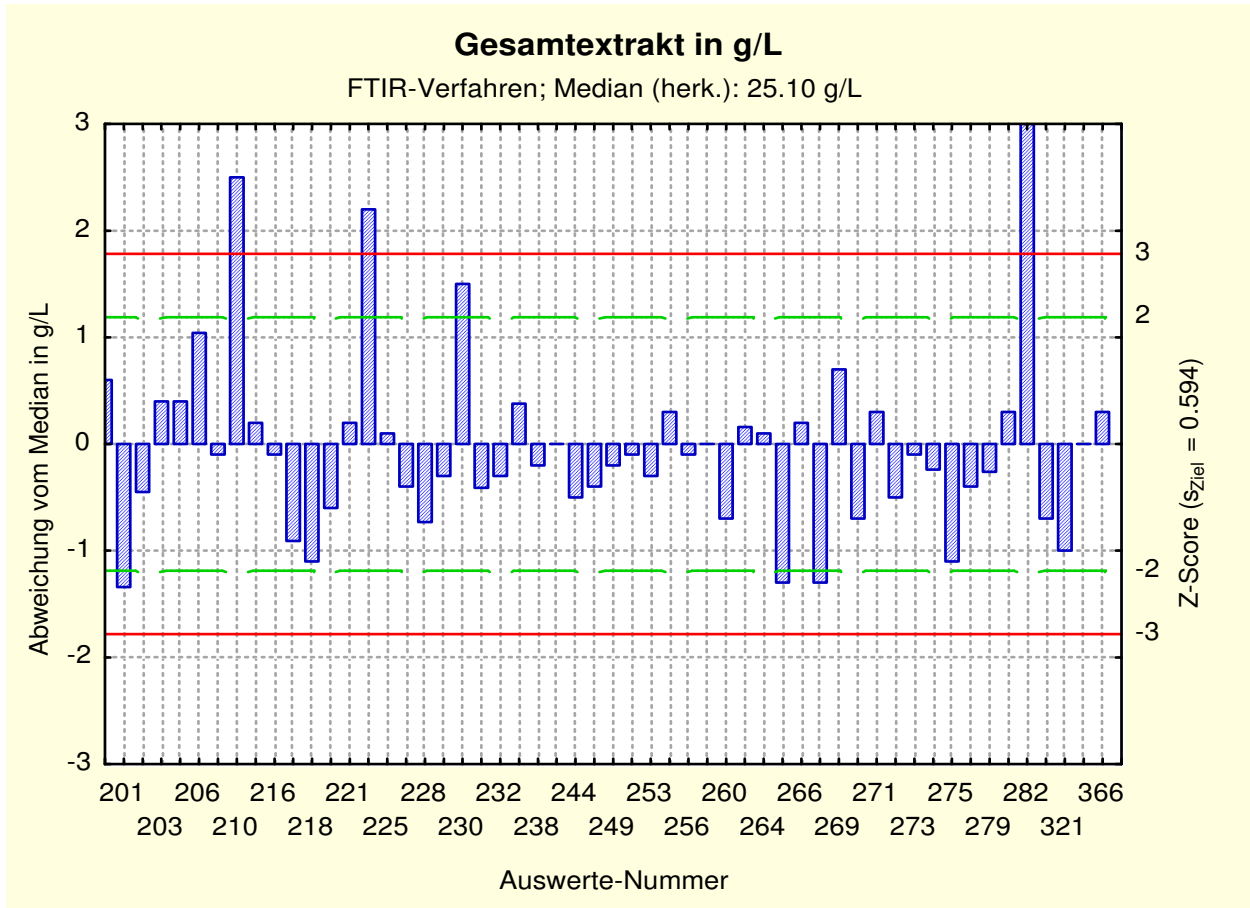
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	24,911	0,375
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	9	25,014	0,658
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	40	25,087	0,452
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	52	25,068	0,455
		47	51,930	0,967

4.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	52
Minimalwert	23,5
Mittelwert	25,07
Median	25,10
Maximalwert	26,1
Standardabweichung (s_L)	0,477
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,066
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,874
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,565)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,55
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,80
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,84)
Quotient (u_M/s_H)	0,08
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,12)

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





4.4 Vergärbare Zucker [g/L]

4.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 4.5	5,67	0,030	0,12	0,15	
04	LwK 4.7	5,75	0,110	0,45	0,56	
06	LwK 4.5	5,53	-0,110	-0,45	-0,56	
07	LwK 4.5	5,70	0,060	0,24	0,31	
08	LwK 4.5	6,00	0,360	1,46	1,84	
09	LwK 4.7	5,40	-0,240	-0,98	-1,23	
10	LwK 4.5	5,64	0,000	0,00	0,00	
12	LwK 4.5	5,34	-0,295	-1,20	-1,51	
13	LwK 4.7	5,60	-0,040	-0,16	-0,20	
14	LwK 4.7	5,70	0,060	0,24	0,31	
15	LwK 4.5	5,70	0,060	0,24	0,31	
16	LwK 4.5	5,70	0,060	0,24	0,31	
18	LwK 4.8	6,70	1,060	4,31	5,43	(**)
19	LwK 4.7	6,29	0,650	2,64	3,33	
21	LwK 4.7	5,76	0,120	0,49	0,61	
22	LwK 4.5	5,67	0,030	0,12	0,15	
23	LwK 4.7	5,46	-0,180	-0,73	-0,92	
24	NMR	5,57	-0,070	-0,28	-0,36	
25	LwK 4.4	6,10	0,460	1,87	2,36	
26	LwK 4.4	6,90	1,260	5,12	6,46	(**)
27	LwK 4.5	5,67	0,030	0,12	0,15	
28	LwK 4.7	5,10	-0,540	-2,20	-2,77	
29	LwK 4.4	6,20	0,560	2,28	2,87	
30	LwK 4.4	5,60	-0,040	-0,16	-0,20	
31	LwK 4.4	5,20	-0,440	-1,79	-2,25	
32	LwK 4.5	5,90	0,260	1,06	1,33	
33	LwK 4.7	5,80	0,160	0,65	0,82	
34	LwK 4.4	4,90	-0,740	-3,01	-3,79	
39	LwK 4.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,20	
40	LwK 4.5	5,70	0,060	0,24	0,31	
41	LwK 4.7	5,78	0,140	0,57	0,72	
42	LwK 4.5	5,51	-0,130	-0,53	-0,67	
44	LwK 4.7	5,43	-0,207	-0,84	-1,06	
46	LwK 4.5	5,81	0,170	0,69	0,87	
47	LwK 4.5	5,45	-0,190	-0,77	-0,97	
48	LwK 4.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,72	
50	LwK 4.5	5,34	-0,305	-1,24	-1,56	
51	LwK 4.4	5,00	-0,640	-2,60	-3,28	
52	LwK 4.7	5,82	0,180	0,73	0,92	
54	LwK 4.5	5,59	-0,050	-0,20	-0,26	
55	LwK 4.5	5,60	-0,040	-0,16	-0,20	
57	LwK 4.5	5,70	0,060	0,24	0,31	
58	LwK 4.5	5,62	-0,020	-0,08	-0,10	
59	LwK 4.4	5,90	0,260	1,06	1,33	
62	LwK 4.4	6,80	1,160	4,72	5,94	(**)
63	LwK 4.7	5,50	-0,140	-0,57	-0,72	
64	LwK 4.4	7,20	1,560	6,34	7,99	(**)
66	LwK 4.4	5,55	-0,090	-0,37	-0,46	
69	LwK 4.4	5,20	-0,440	-1,79	-2,25	
70	LwK 4.1	5,30	-0,340	-1,38	-1,74	
71	LwK 4.4	5,00	-0,640	-2,60	-3,28	
72	LwK 4.5	5,52	-0,120	-0,49	-0,61	
78	LwK 4.4	6,40	0,760	3,09	3,89	
79	LwK 4.4	6,20	0,560	2,28	2,87	
95	LwK 4.5	5,61	-0,030	-0,12	-0,15	
97	LwK 4.7	5,48	-0,160	-0,65	-0,82	
100	LwK 4.7	5,50	-0,140	-0,57	-0,72	

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

4.4.2 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	5,62	-0,020	-0,08	-0,03	
203	LwK 4.8	5,20	-0,440	-1,79	-0,75	
204	LwK 4.8	5,98	0,340	1,38	0,58	
206	LwK 4.8	5,89	0,250	1,02	0,43	
207	LwK 4.8	6,00	0,360	1,46	0,62	
208	LwK 4.8	6,00	0,360	1,46	0,62	
209	LwK 4.8	4,82	-0,820	-3,33	-1,40	
210	LwK 4.8	5,77	0,130	0,53	0,22	
211	LwK 4.8	6,50	0,860	3,50	1,47	
212	LwK 4.8	5,05	-0,590	-2,40	-1,01	
213	LwK 4.8	6,33	0,690	2,81	1,18	
215	LwK 4.8	5,50	-0,140	-0,57	-0,24	
216	LwK 4.8	5,67	0,030	0,12	0,05	
217	LwK 4.8	6,69	1,050	4,27	1,80	
218	LwK 4.8	6,73	1,090	4,43	1,87	
219	LwK 4.8	6,12	0,480	1,95	0,82	
220	LwK 4.8	7,10	1,460	5,94	2,50	
221	LwK 4.8	4,41	-1,230	-5,00	-2,11	
222	LwK 4.8	5,94	0,300	1,22	0,51	
223	LwK 4.8	7,39	1,750	7,12	3,00	
224	LwK 4.8	5,60	-0,040	-0,16	-0,07	
225	LwK 4.8	6,80	1,160	4,72	1,99	
226	LwK 4.8	6,85	1,210	4,92	2,07	
227	LwK 4.8	6,05	0,410	1,67	0,70	
228	LwK 4.8	4,90	-0,740	-3,01	-1,27	
229	LwK 4.8	6,77	1,130	4,60	1,93	
230	LwK 4.8	5,38	-0,260	-1,06	-0,45	
231	LwK 4.8	4,77	-0,870	-3,54	-1,49	
232	LwK 4.8	5,90	0,260	1,06	0,45	
234	LwK 4.8	4,81	-0,830	-3,38	-1,42	
236	LwK 4.8	5,60	-0,040	-0,16	-0,07	
238	LwK 4.8	5,92	0,280	1,14	0,48	
239	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	
243	LwK 4.8	6,90	1,260	5,12	2,16	
244	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
245	LwK 4.8	6,10	0,460	1,87	0,79	
247	LwK 4.8	6,65	1,010	4,11	1,73	
248	LwK 4.8	5,80	0,160	0,65	0,27	
249	LwK 4.8	6,12	0,480	1,95	0,82	
250	LwK 4.8	5,49	-0,150	-0,61	-0,26	
251	LwK 4.8	6,80	1,160	4,72	1,99	
252	LwK 4.8	5,56	-0,080	-0,33	-0,14	
253	LwK 4.8	5,05	-0,590	-2,40	-1,01	
254	LwK 4.8	5,80	0,160	0,65	0,27	
256	LwK 4.8	6,70	1,060	4,31	1,82	
257	LwK 4.8	6,40	0,760	3,09	1,30	
258	LwK 4.8	5,20	-0,440	-1,79	-0,75	
259	LwK 4.8	6,30	0,660	2,68	1,13	
260	LwK 4.8	6,39	0,750	3,05	1,28	
261	LwK 4.8	8,17	2,530	10,29	4,33	
262	LwK 4.8	6,77	1,130	4,60	1,93	
263	LwK 4.8	6,80	1,160	4,72	1,99	
264	LwK 4.8	6,70	1,060	4,31	1,82	
265	LwK 4.8	5,00	-0,640	-2,60	-1,10	
266	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
267	LwK 4.8	4,90	-0,740	-3,01	-1,27	
268	LwK 4.8	5,21	-0,430	-1,75	-0,74	
269	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	
270	LwK 4.8	4,70	-0,940	-3,82	-1,61	
271	LwK 4.8	5,55	-0,090	-0,37	-0,15	
272	LwK 4.8	6,06	0,420	1,71	0,72	
273	LwK 4.8	4,80	-0,840	-3,42	-1,44	
274	LwK 4.8	7,23	1,590	6,47	2,72	
275	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
276	LwK 4.8	6,51	0,870	3,54	1,49	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	LwK 4.8	5,10	-0,540	-2,20	-0,92	
278	LwK 4.8	5,64	0,000	0,00	0,00	
279	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	
280	LwK 4.8	7,61	1,970	8,01	3,37	
281	LwK 4.8	6,11	0,470	1,91	0,80	
282	LwK 4.8	6,50	0,860	3,50	1,47	
283	LwK 4.8	5,60	-0,040	-0,16	-0,07	
284	LwK 4.8	5,40	-0,240	-0,98	-0,41	
285	LwK 4.8	6,60	0,960	3,90	1,64	
286	LwK 4.8	5,40	-0,240	-0,98	-0,41	
320	LwK 4.8	7,20	1,560	6,34	2,67	
321	LwK 4.8	7,06	1,420	5,77	2,43	
339	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	
346	LwK 4.8	6,10	0,460	1,87	0,79	
351	LwK 4.8	5,30	-0,340	-1,38	-0,58	
366	LwK 4.8	6,60	0,960	3,90	1,64	
371	LwK 4.8	5,65	0,010	0,04	0,02	

4.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
25	LwK 4.4	6,10	0,550	2,27	2,85	
26	LwK 4.4	6,90	1,350	5,57	7,00	(**)
29	LwK 4.4	6,20	0,650	2,68	3,37	
30	LwK 4.4	5,60	0,050	0,21	0,26	
31	LwK 4.4	5,20	-0,350	-1,44	-1,82	
34	LwK 4.4	4,90	-0,650	-2,68	-3,37	
39	LwK 4.3	5,60	0,050	0,21	0,26	
48	LwK 4.3	5,50	-0,050	-0,21	-0,26	
51	LwK 4.4	5,00	-0,550	-2,27	-2,85	
59	LwK 4.4	5,90	0,350	1,44	1,82	
62	LwK 4.4	6,80	1,250	5,15	6,49	(**)
64	LwK 4.4	7,20	1,650	6,80	8,56	(**)
66	LwK 4.4	5,55	0,000	0,00	0,00	
69	LwK 4.4	5,20	-0,350	-1,44	-1,82	
70	LwK 4.1	5,30	-0,250	-1,03	-1,30	
71	LwK 4.4	5,00	-0,550	-2,27	-2,85	
78	LwK 4.4	6,40	0,850	3,50	4,41	
79	LwK 4.4	6,20	0,650	2,68	3,37	

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

4.4.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	5,62	0,020	0,08	0,03	
203	LwK 4.8	5,20	-0,400	-1,64	-0,68	
204	LwK 4.8	5,98	0,380	1,55	0,65	
206	LwK 4.8	5,89	0,290	1,19	0,50	
207	LwK 4.8	6,00	0,400	1,64	0,68	
208	LwK 4.8	6,00	0,400	1,64	0,68	
209	LwK 4.8	4,82	-0,780	-3,19	-1,34	
210	LwK 4.8	5,77	0,170	0,70	0,29	
211	LwK 4.8	6,50	0,900	3,68	1,54	
212	LwK 4.8	5,05	-0,550	-2,25	-0,94	
213	LwK 4.8	6,33	0,730	2,99	1,25	
215	LwK 4.8	5,50	-0,100	-0,41	-0,17	
216	LwK 4.8	5,67	0,070	0,29	0,12	
217	LwK 4.8	6,69	1,090	4,46	1,87	
218	LwK 4.8	6,73	1,130	4,62	1,93	
219	LwK 4.8	6,12	0,520	2,13	0,89	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	LwK 4.8	7,10	1,500	6,14	2,57	
221	LwK 4.8	4,41	-1,190	-4,87	-2,04	
222	LwK 4.8	5,94	0,340	1,39	0,58	
223	LwK 4.8	7,39	1,790	7,32	3,07	
224	LwK 4.8	5,60	0,000	0,00	0,00	
225	LwK 4.8	6,80	1,200	4,91	2,05	
226	LwK 4.8	6,85	1,250	5,11	2,14	
227	LwK 4.8	6,05	0,450	1,84	0,77	
228	LwK 4.8	4,90	-0,700	-2,86	-1,20	
229	LwK 4.8	6,77	1,170	4,79	2,00	
230	LwK 4.8	5,38	-0,220	-0,90	-0,38	
231	LwK 4.8	4,77	-0,830	-3,40	-1,42	
232	LwK 4.8	5,90	0,300	1,23	0,51	
234	LwK 4.8	4,81	-0,790	-3,23	-1,35	
236	LwK 4.8	5,60	0,000	0,00	0,00	
238	LwK 4.8	5,92	0,320	1,31	0,55	
239	LwK 4.8	6,20	0,600	2,45	1,03	
243	LwK 4.8	6,90	1,300	5,32	2,23	
244	LwK 4.8	5,70	0,100	0,41	0,17	
245	LwK 4.8	6,10	0,500	2,05	0,86	
247	LwK 4.8	6,65	1,050	4,30	1,80	
248	LwK 4.8	5,80	0,200	0,82	0,34	
249	LwK 4.8	6,12	0,520	2,13	0,89	
250	LwK 4.8	5,49	-0,110	-0,45	-0,19	
251	LwK 4.8	6,80	1,200	4,91	2,05	
252	LwK 4.8	5,56	-0,040	-0,16	-0,07	
253	LwK 4.8	5,05	-0,550	-2,25	-0,94	
254	LwK 4.8	5,80	0,200	0,82	0,34	
256	LwK 4.8	6,70	1,100	4,50	1,88	
257	LwK 4.8	6,40	0,800	3,27	1,37	
258	LwK 4.8	5,20	-0,400	-1,64	-0,68	
259	LwK 4.8	6,30	0,700	2,86	1,20	
260	LwK 4.8	6,39	0,790	3,23	1,35	
261	LwK 4.8	8,17	2,570	10,51	4,40	
262	LwK 4.8	6,77	1,170	4,79	2,00	
263	LwK 4.8	6,80	1,200	4,91	2,05	
264	LwK 4.8	6,70	1,100	4,50	1,88	
265	LwK 4.8	5,00	-0,600	-2,45	-1,03	
266	LwK 4.8	5,70	0,100	0,41	0,17	
267	LwK 4.8	4,90	-0,700	-2,86	-1,20	
268	LwK 4.8	5,21	-0,390	-1,60	-0,67	
269	LwK 4.8	6,20	0,600	2,45	1,03	
270	LwK 4.8	4,70	-0,900	-3,68	-1,54	
271	LwK 4.8	5,55	-0,050	-0,20	-0,09	
272	LwK 4.8	6,06	0,460	1,88	0,79	
273	LwK 4.8	4,80	-0,800	-3,27	-1,37	
274	LwK 4.8	7,23	1,630	6,67	2,79	
275	LwK 4.8	5,70	0,100	0,41	0,17	
276	LwK 4.8	6,51	0,910	3,72	1,56	
277	LwK 4.8	5,10	-0,500	-2,05	-0,86	
278	LwK 4.8	5,64	0,040	0,16	0,07	
279	LwK 4.8	6,20	0,600	2,45	1,03	
280	LwK 4.8	7,61	2,010	8,22	3,44	
281	LwK 4.8	6,11	0,510	2,09	0,87	
282	LwK 4.8	6,50	0,900	3,68	1,54	
283	LwK 4.8	5,60	0,000	0,00	0,00	
284	LwK 4.8	5,40	-0,200	-0,82	-0,34	
285	LwK 4.8	6,60	1,000	4,09	1,71	
286	LwK 4.8	5,40	-0,200	-0,82	-0,34	
320	LwK 4.8	7,20	1,600	6,55	2,74	
321	LwK 4.8	7,06	1,460	5,97	2,50	
339	LwK 4.8	6,20	0,600	2,45	1,03	
346	LwK 4.8	6,10	0,500	2,05	0,86	
351	LwK 4.8	5,30	-0,300	-1,23	-0,51	
366	LwK 4.8	6,60	1,000	4,09	1,71	
371	LwK 4.8	5,65	0,050	0,20	0,09	

4.4.5 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	4,97	-0,670	-2,72	-1,15	
202	LwK 4.8	5,62	-0,020	-0,08	-0,03	
203	LwK 4.8	6,62	0,980	3,99	1,68	
204	LwK 4.8	4,77	-0,870	-3,54	-1,49	
205	LwK 4.8	5,99	0,350	1,42	0,60	
206	LwK 4.8	5,89	0,250	1,02	0,43	
207	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
208	LwK 4.8	6,00	0,360	1,46	0,62	
209	LwK 4.8	4,82	-0,820	-3,33	-1,40	
210	LwK 4.8	5,77	0,130	0,53	0,22	
211	LwK 4.8	5,90	0,260	1,06	0,45	
212	LwK 4.8	5,05	-0,590	-2,40	-1,01	
213	LwK 4.8	5,24	-0,400	-1,63	-0,68	
215	LwK 4.8	5,30	-0,340	-1,38	-0,58	
216	LwK 4.8	5,67	0,030	0,12	0,05	
217	LwK 4.8	4,36	-1,280	-5,21	-2,19	
218	LwK 4.8	11,08	5,440	22,12	9,32	(*)
219	LwK 4.8	5,67	0,030	0,12	0,05	
220	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
221	LwK 4.8	4,67	-0,970	-3,94	-1,66	
222	LwK 4.8	6,83	1,190	4,84	2,04	
223	LwK 4.8	5,24	-0,400	-1,63	-0,68	
224	LwK 4.8	5,60	-0,040	-0,16	-0,07	
225	LwK 4.8	6,10	0,460	1,87	0,79	
226	LwK 4.8	5,77	0,130	0,53	0,22	
227	LwK 4.8	6,22	0,580	2,36	0,99	
228	LwK 4.8	5,58	-0,060	-0,24	-0,10	
229	LwK 4.8	5,63	-0,010	-0,04	-0,02	
230	LwK 4.8	5,50	-0,140	-0,57	-0,24	
231	LwK 4.8	5,81	0,170	0,69	0,29	
232	LwK 4.8	4,80	-0,840	-3,42	-1,44	
234	LwK 4.8	4,31	-1,330	-5,41	-2,28	
236	LwK 4.8	6,15	0,510	2,07	0,87	
238	LwK 4.8	5,93	0,290	1,18	0,50	
239	LwK 4.8	7,30	1,660	6,75	2,84	
243	LwK 4.8	6,00	0,360	1,46	0,62	
244	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
245	LwK 4.8	5,81	0,170	0,69	0,29	
247	LwK 4.8	7,14	1,500	6,10	2,57	
248	LwK 4.8	5,80	0,160	0,65	0,27	
249	LwK 4.8	6,16	0,520	2,11	0,89	
251	LwK 4.8	6,80	1,160	4,72	1,99	
252	LwK 4.8	5,65	0,010	0,04	0,02	
253	LwK 4.8	5,05	-0,590	-2,40	-1,01	
254	LwK 4.8	6,10	0,460	1,87	0,79	
256	LwK 4.8	5,30	-0,340	-1,38	-0,58	
257	LwK 4.8	5,80	0,160	0,65	0,27	
258	LwK 4.8	3,60	-2,040	-8,30	-3,49	
259	LwK 4.8	5,61	-0,030	-0,12	-0,05	
260	LwK 4.8	5,90	0,260	1,06	0,45	
261	LwK 4.8	7,15	1,510	6,14	2,59	
262	LwK 4.8	4,98	-0,660	-2,68	-1,13	
263	LwK 4.8	5,30	-0,340	-1,38	-0,58	
264	LwK 4.8	6,30	0,660	2,68	1,13	
265	LwK 4.8	4,90	-0,740	-3,01	-1,27	
266	LwK 4.8	5,70	0,060	0,24	0,10	
267	LwK 4.8	5,05	-0,590	-2,40	-1,01	
268	LwK 4.8	4,79	-0,850	-3,46	-1,46	
269	LwK 4.8	4,80	-0,840	-3,42	-1,44	
270	LwK 4.8	5,73	0,090	0,37	0,15	
271	LwK 4.8	5,95	0,310	1,26	0,53	
273	LwK 4.8	5,00	-0,640	-2,60	-1,10	
274	LwK 4.8	4,49	-1,150	-4,68	-1,97	
275	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50% vom Median der Ergebnisse mit Enzymatik und HPLC ab.

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

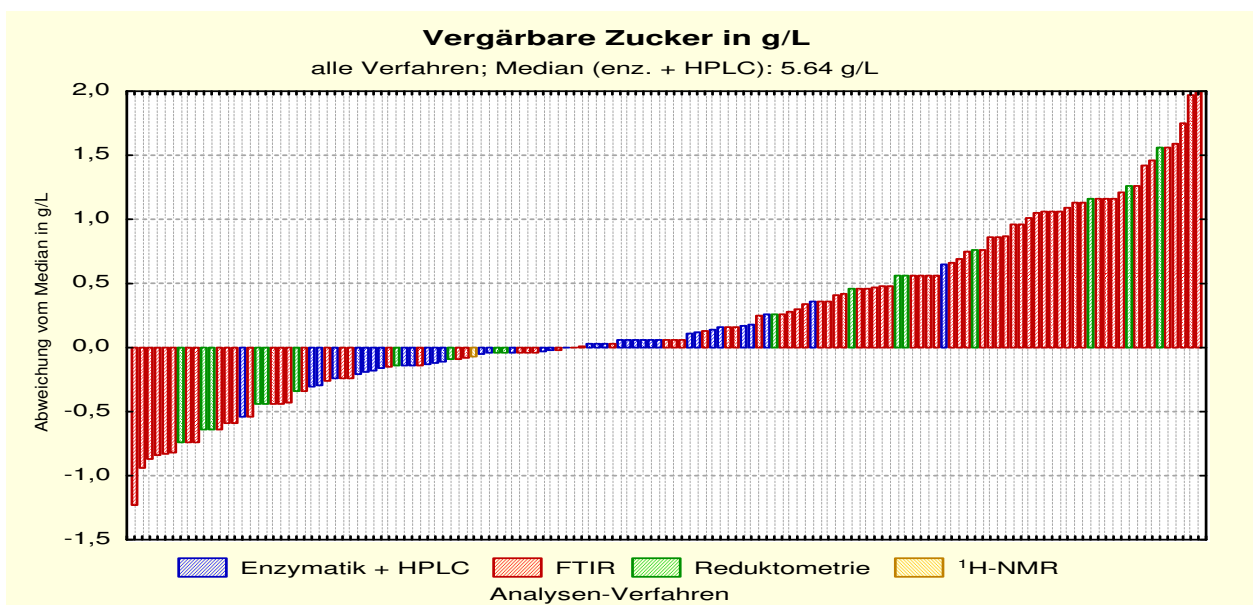
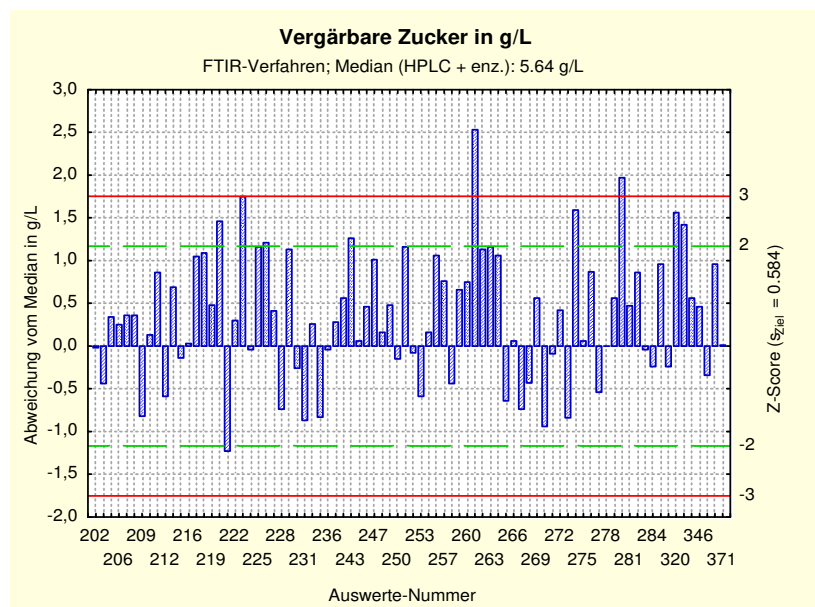
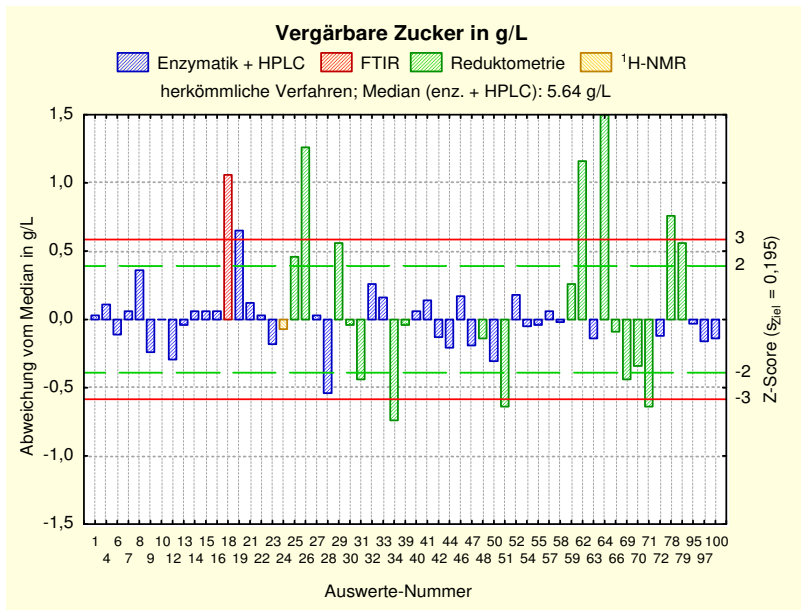
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 4.8	5,62	-0,020	-0,08	-0,03	
277	LwK 4.8	6,20	0,560	2,28	0,96	
279	LwK 4.8	6,50	0,860	3,50	1,47	
281	LwK 4.8	5,58	-0,060	-0,24	-0,10	
282	LwK 4.8	4,90	-0,740	-3,01	-1,27	
283	LwK 4.8	6,34	0,700	2,85	1,20	
284	LwK 4.8	5,40	-0,240	-0,98	-0,41	
285	LwK 4.8	6,60	0,960	3,90	1,64	
286	LwK 4.8	5,39	-0,250	-1,02	-0,43	
313	LwK 4.8	3,95	-1,690	-6,87	-2,89	
320	LwK 4.8	5,60	-0,040	-0,16	-0,07	
321	LwK 4.8	5,08	-0,560	-2,28	-0,96	
339	LwK 4.8	6,30	0,660	2,68	1,13	
345	LwK 4.8	5,92	0,280	1,14	0,48	
346	LwK 4.8	5,20	-0,440	-1,79	-0,75	
351	LwK 4.8	6,80	1,160	4,72	1,99	
366	LwK 4.8	6,10	0,460	1,87	0,79	
371	LwK 4.8	5,55	-0,090	-0,37	-0,15	

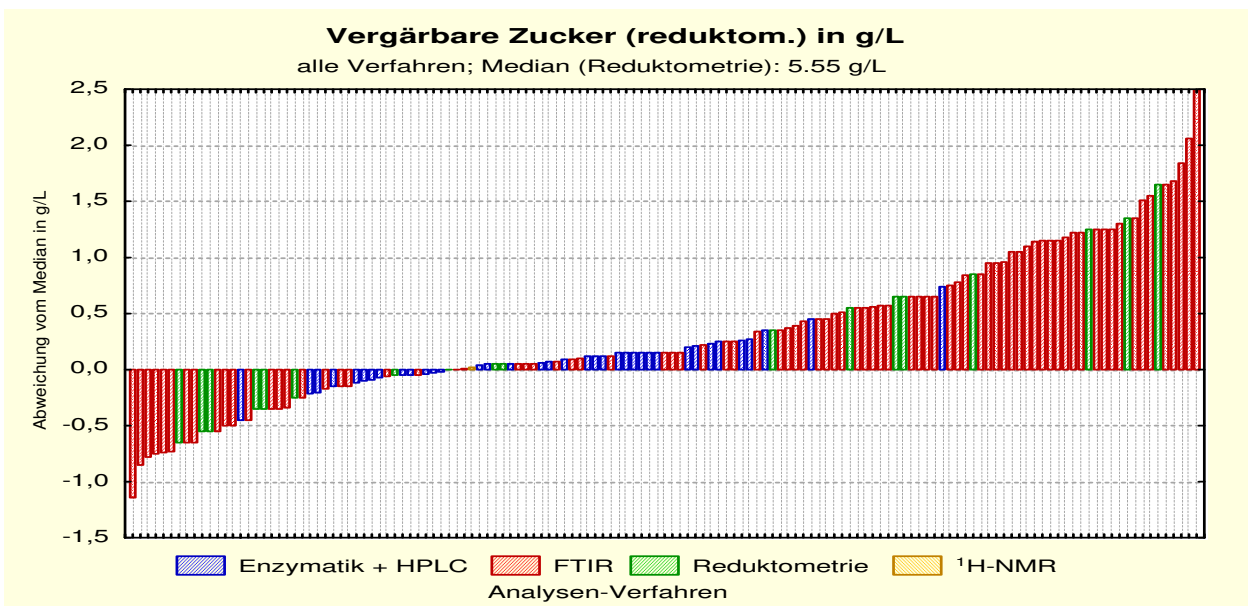
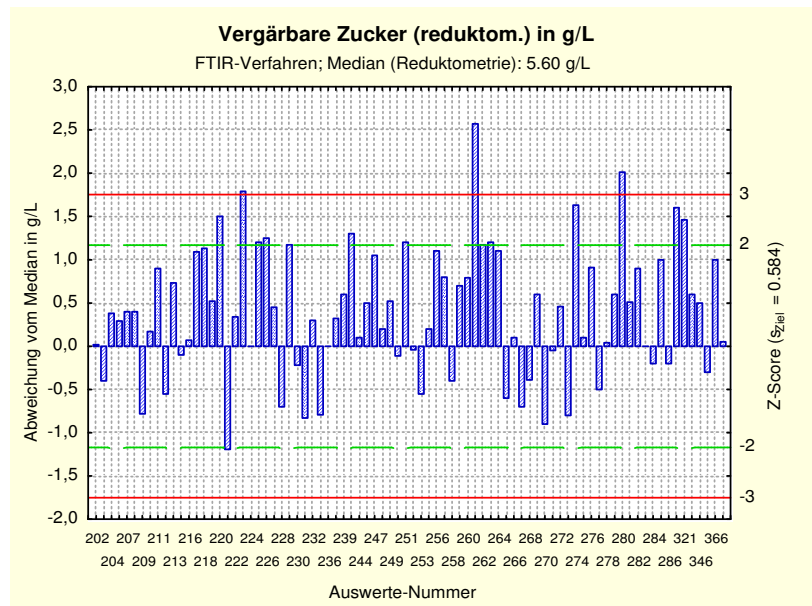
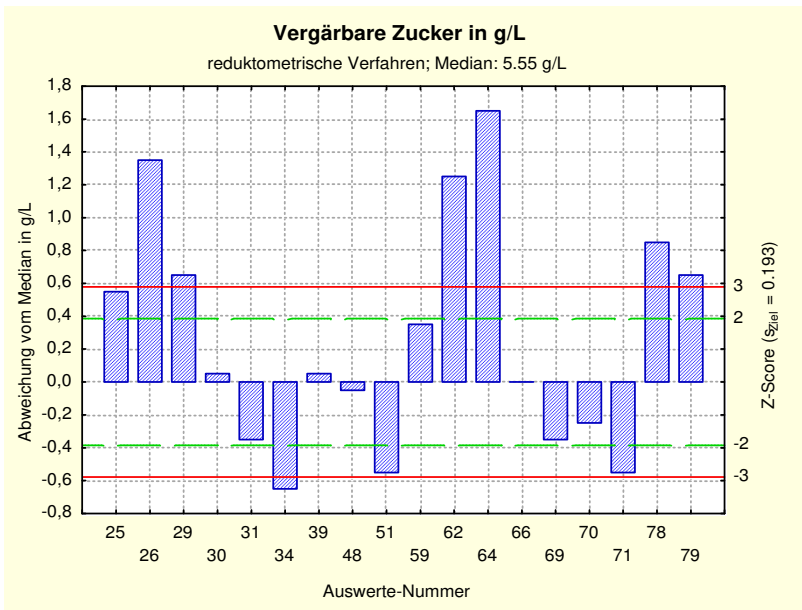
4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

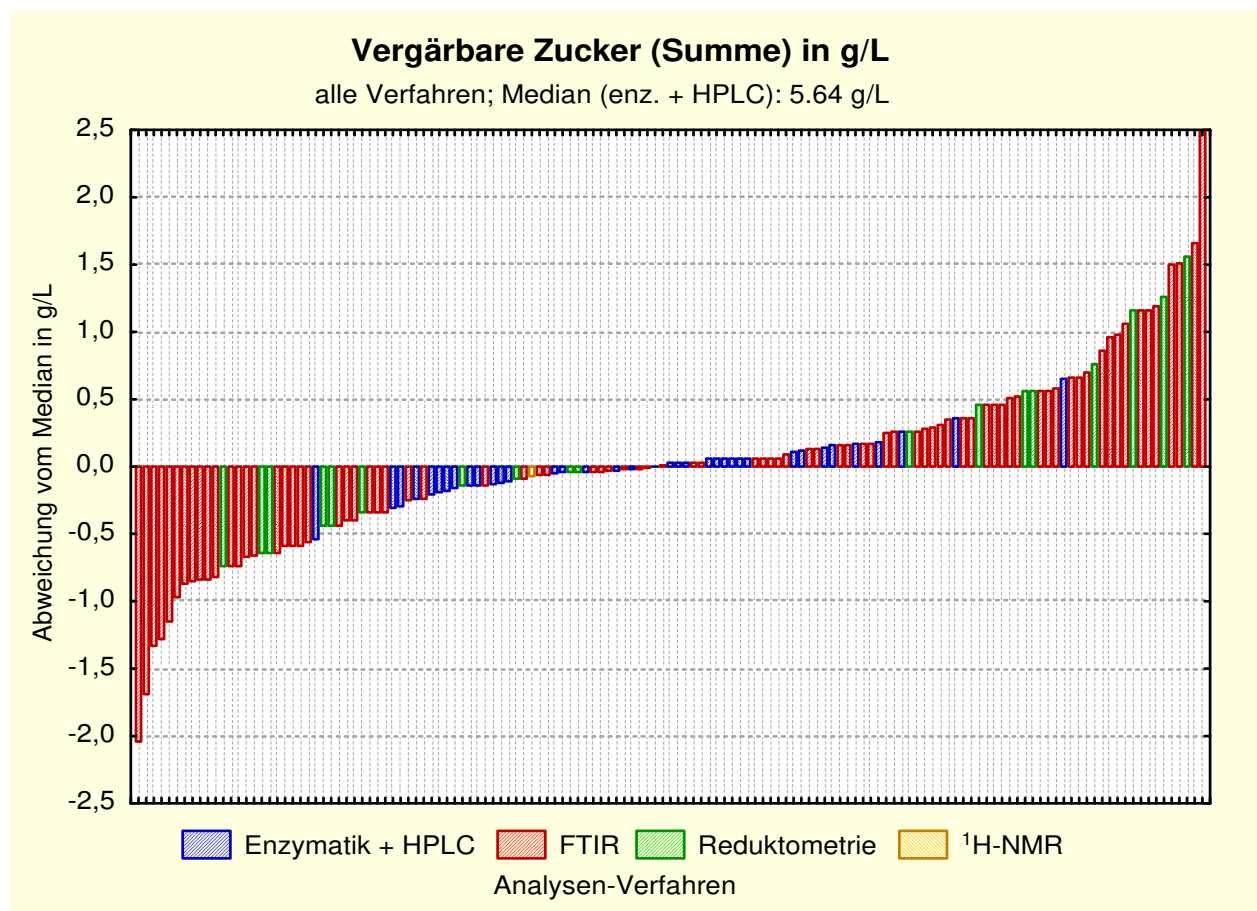
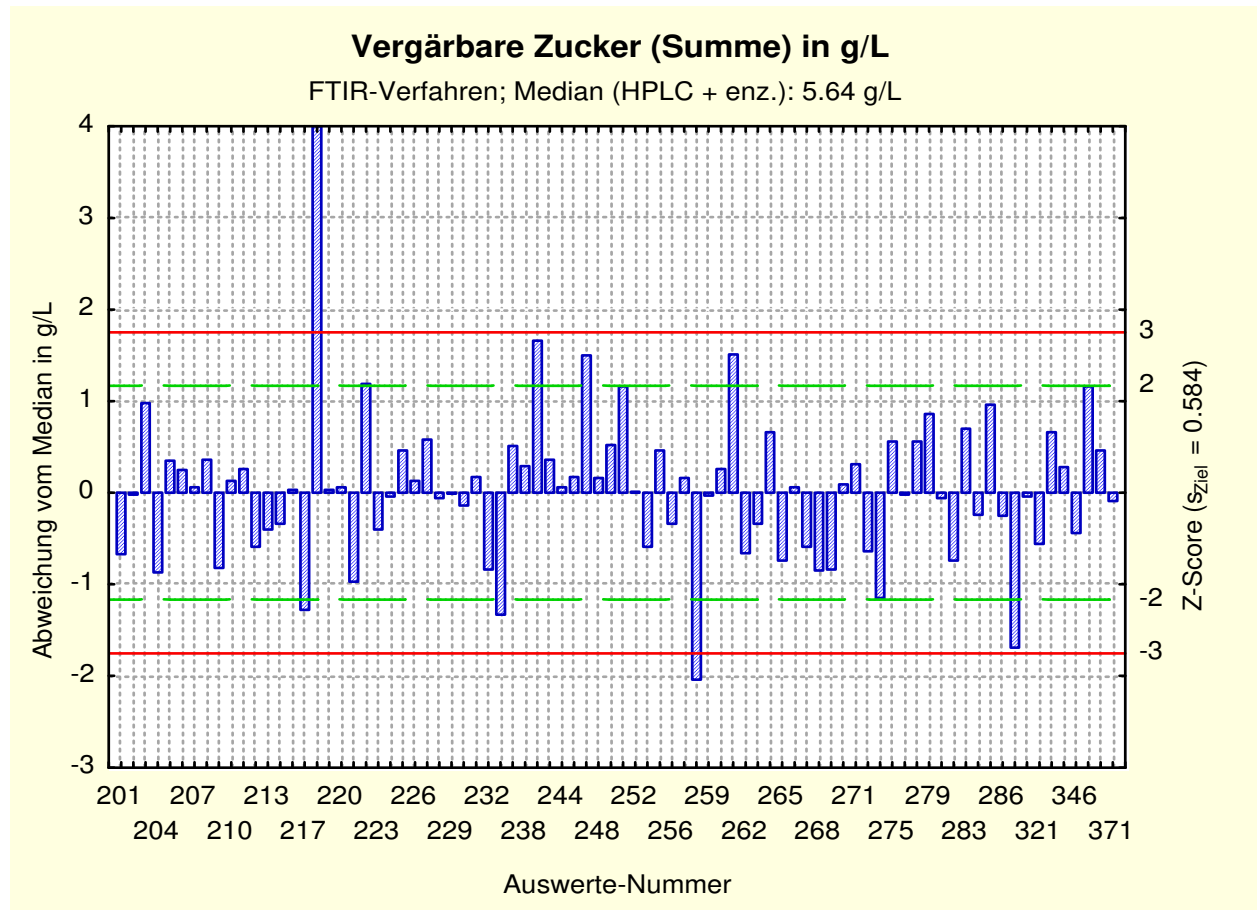
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch		reduktometrisch	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	37	18	15	
Minimalwert	5,10	4,90	4,90	
Mittelwert	5,631	5,808	5,577	
Median	5,640	5,600	5,550	
Maximalwert	6,29	7,20	6,40	
Standardabweichung (s_L)	0,206	0,696	0,487	
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,034	0,164	0,126	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,246	0,244	0,243	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,195	0,194	0,193	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,584	0,584	0,584	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,84	2,85	2,01	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,06	3,59	2,53	
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,35	1,19	0,83	
Quotient (u_M/s_H)	0,14	0,67	0,52	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17	0,85	0,65	
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,06	0,28	0,22	

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	5,300	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	5,550	0,080
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	15	5,872	0,834
	reduktometrische Verfahren	18	5,792	0,754
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	22	5,637	0,127
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;			
	OIV-MA-AS311-03	15	5,614	0,216
	enzymatische und HPLC-Verfahren	37	5,625	0,173
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	83	5,988	0,783
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	83	5,667	0,690
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	5,570	







4.5 Glucose [g/L]

4.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	n.b. (< 0,86)				
04	HPLC	0,17	-0,063	-3,85	-1,29	
05	enzymat., autom.	0,30	0,067	4,06	1,36	
06	enzymat., autom.	0,24	0,007	0,41	0,14	
07	enzymat. Hand	0,25	0,017	1,02	0,34	
08	enzymat. Hand	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
09	HPLC	<0,4				
10	enzymat. Hand	0,24	0,007	0,41	0,14	
12	enzymat., autom.	0,24	0,003	0,20	0,07	
13	HPLC	<=0				
14	HPLC	nn				
15	enzymat., autom.	0,23	-0,003	-0,20	-0,07	
16	enzymat., autom.	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
19	HPLC	0,26	0,027	1,63	0,54	
21	HPLC	0,25	0,017	1,02	0,34	
22	enzymat., autom.	0,23	-0,003	-0,20	-0,07	
23	HPLC	<=0				
24	NMR	0,33	0,097	5,89	1,97	
27	enzymat., autom.	0,27	0,037	2,24	0,75	
28	HPLC	< NG				
32	enzymat., autom.	0,10	-0,133	-8,11	-2,71	
33	HPLC	0,21	-0,023	-1,42	-0,47	
40	enzymat., autom.	0,30	0,067	4,06	1,36	
41	HPLC	<0,3				
44	HPLC	<=0				
46	enzymat., autom.	0,25	0,017	1,02	0,34	
47	enzymat., autom.	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
50	enzymat., autom.	0,17	-0,062	-3,79	-1,27	
52	HPLC	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
54	enzymat., autom.	0,26	0,027	1,63	0,54	
55	enzymat., autom.	0,22	-0,013	-0,81	-0,27	
57	enzymat., autom.	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
58	enzymat., autom.	0,31	0,078	4,73	1,58	
63	HPLC	5,52	5,291	322,08	107,54	(*)
66	enzymat. Hand	0,31	0,077	4,67	1,56	
70	enzymat., autom.	0,14	-0,093	-5,68	-1,90	
72	enzymat., autom.	0,25	0,017	1,02	0,34	
79	enzymat. Hand	0,24	0,007	0,41	0,14	
95	enzymat., autom.	0,22	-0,013	-0,81	-0,27	
97	HPLC	<=0				
99	enzymat., autom.	0,20	-0,033	-2,02	-0,68	
100	HPLC	<=0				

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

<=0: Fehlerhafte Form der Angabe eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

4.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Der Gehalt an Glucose liegt unterhalb der Bestimmungsgrenze. Daher keine Angabe von Z-Score

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	<=0				
202	FTIR	0,22	-0,013			
203	FTIR	0,82	0,587			(*)
204	FTIR	-0,29	-0,523			(*)
205	FTIR	0,29	0,057			
206	FTIR	0,14	-0,093			
207	FTIR	0,50	0,267			(*)
208	FTIR	0,70	0,467			(*)
209	FTIR	<0,5				
210	FTIR	0,12	-0,113			

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

<=0: Fehlerhafte Form der Angabe eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
211	FTIR	-0,40	-0,633			(*)
212	FTIR	0,05	-0,183			
213	FTIR	0,07	-0,163			
215	FTIR	<=0				
216	FTIR	<=0				
217	FTIR	<=0				
218	FTIR	0,56	0,327			(*)
219	FTIR	n.n.				
220	FTIR	0,40	0,167			
221	FTIR	-1,00	-1,233			(*)
222	FTIR	0,28	0,047			
223	FTIR	0,34	0,107			
224	FTIR	0,30	0,067			
225	FTIR	0,40	0,167			
226	FTIR	0,22	-0,013			
227	FTIR	0,35	0,117			
228	FTIR	0,04	-0,193			
229	FTIR	0,41	0,177			
230	FTIR	0,72	0,487			(*)
231	FTIR	-0,98	-1,213			(*)
232	FTIR	-0,60	-0,833			(*)
234	FTIR	-0,50	-0,733			(*)
236	FTIR	0,39	0,157			
238	FTIR	0,62	0,387			(*)
239	FTIR	2,30	2,067			(*)
243	FTIR	0,70	0,467			(*)
244	FTIR	<=0				
245	FTIR	0,39	0,157			
247	FTIR	1,05	0,817			(*)
248	FTIR	<=0				
249	FTIR	0,15	-0,083			
251	FTIR	0,90	0,667			(*)
252	FTIR	0,29	0,057			
253	FTIR	<=0				
254	FTIR	0,43	0,197			
256	FTIR	-0,10	-0,333			(*)
257	FTIR	0,80	0,567			(*)
258	FTIR	-1,00	-1,233			(*)
259	FTIR	0,01	-0,223			
260	FTIR	0,23	-0,003			
261	FTIR	1,38	1,147			(*)
262	FTIR	0,22	-0,013			
263	FTIR	<=0				
264	FTIR	1,30	1,067			(*)
265	FTIR	<=0				
266	FTIR	<=0				
267	FTIR	0,04	-0,193			
268	FTIR	-0,29	-0,523			(*)
269	FTIR	0,30	0,067			
270	FTIR	0,27	0,037			
271	FTIR	<=0				
273	FTIR	0,30	0,067			
274	FTIR	-0,32	-0,553			(*)
275	FTIR	-0,10	-0,333			(*)
276	FTIR	0,06	-0,173			
277	FTIR	0,30	0,067			
279	FTIR	0,90	0,667			(*)
281	FTIR	-0,45	-0,683			(*)
282	FTIR	<=0				
283	FTIR	0,28	0,047			
284	FTIR	0,20	-0,033			
285	FTIR	1,70	1,467			(*)
286	FTIR	0,65	0,417			(*)
313	FTIR	-1,25	-1,483			(*)

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

<=0: Fehlerhafte Form der Angabe eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
320	FTIR	0,40	0,167			
321	FTIR	-0,42	-0,653			(*)
339	FTIR	0,30	0,067			
345	FTIR	0,41	0,177			
346	FTIR	<=0				
351	FTIR	0,90	0,667			(*)
366	FTIR	<=0				
371	FTIR	0,10	-0,133			

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

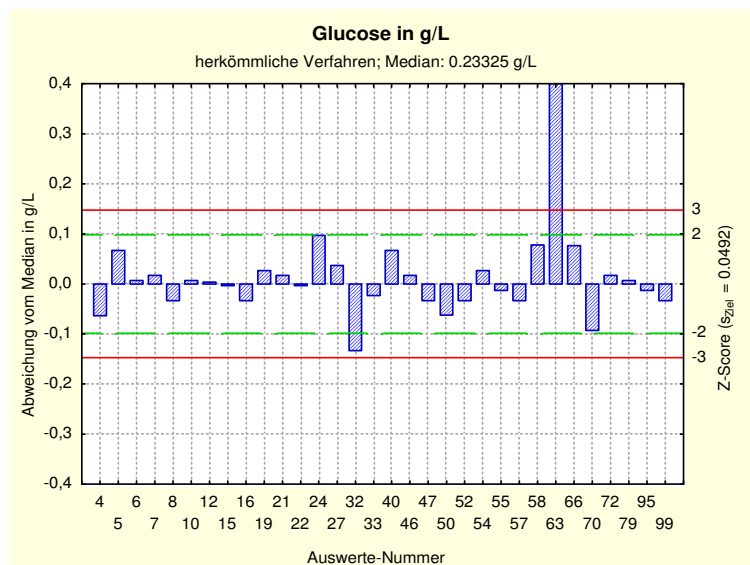
<=0: Fehlerhafte Form der Angabe eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

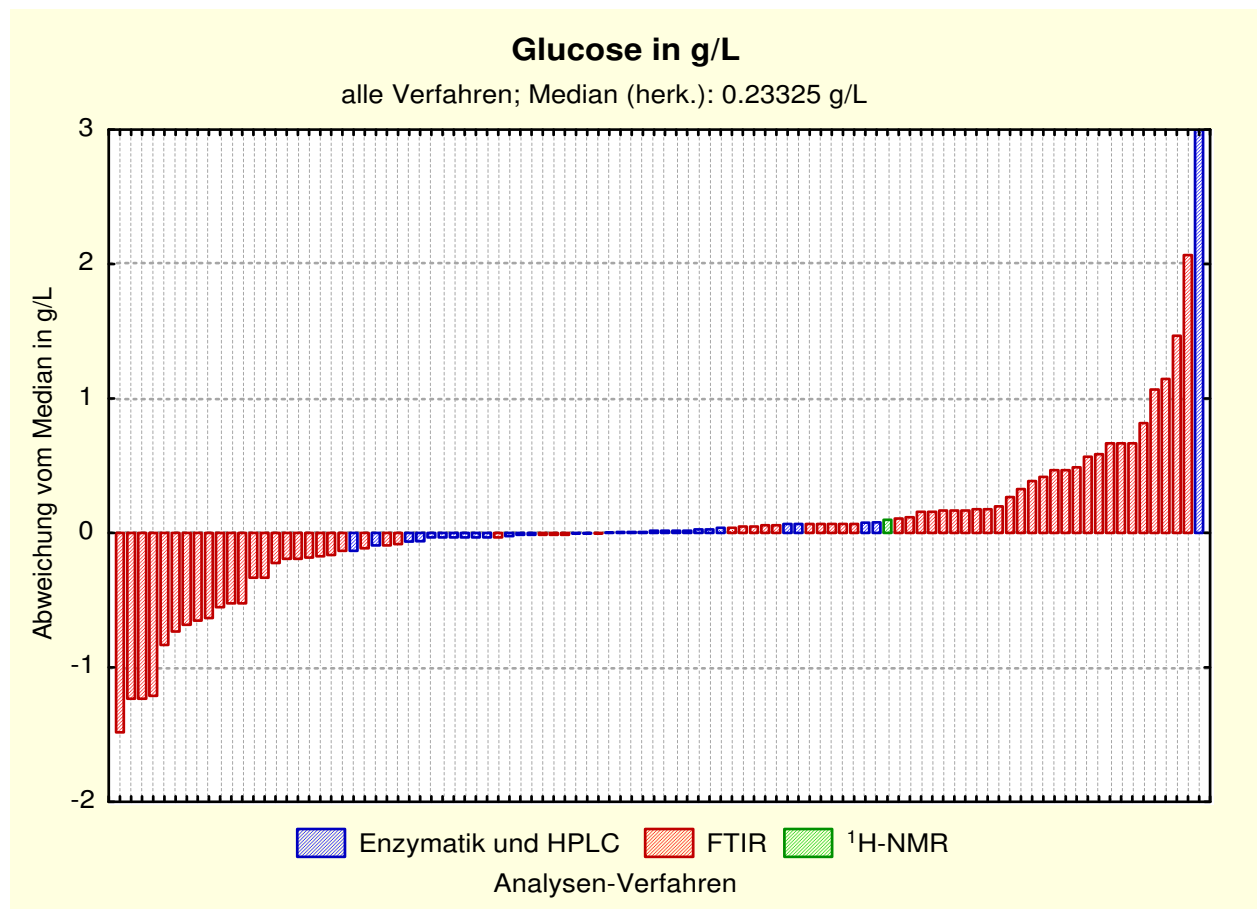
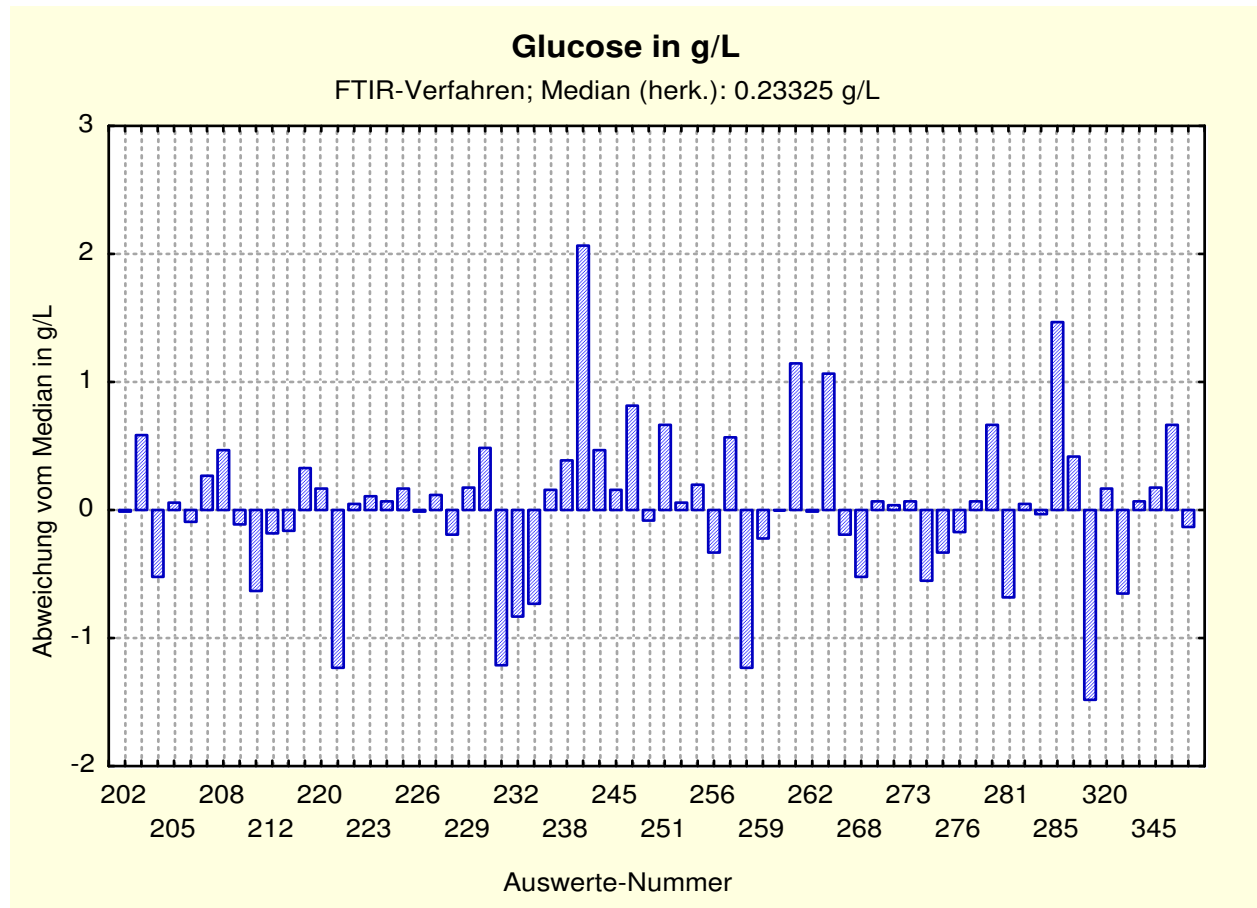
4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	30
Minimalwert	0,10
Mittelwert	0,229
Median	0,233
Maximalwert	0,31
Standardabweichung (s _L)	0,048
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,016
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,049
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,408
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,91
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,97
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,117
Quotient (u _M /s _H)	0,53
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,18
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,02

4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	0,2383	0,0677
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	20	0,2292	0,0496
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	5	0,2478	0,0433
	herkömmliche Verfahren	31	0,2335	0,0485
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	66	0,2639	0,4713
NMR	1H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,3300	





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	5,67	0,270	1,14	1,43	
04	HPLC	5,58	0,180	0,76	0,95	
05	enzymat., autom.	5,55	0,150	0,63	0,79	
06	enzymat., autom.	5,28	-0,120	-0,51	-0,64	
07	enzymat. Hand	5,15	-0,250	-1,05	-1,32	
08	enzymat. Hand	5,80	0,400	1,69	2,12	
09	HPLC	5,40	0,000	0,00	0,00	
10	enzymat. Hand	5,40	0,000	0,00	0,00	
12	enzymat., autom.	5,11	-0,291	-1,23	-1,54	
13	HPLC	5,60	0,200	0,84	1,06	
14	HPLC	5,66	0,256	1,08	1,36	
15	enzymat., autom.	5,45	0,050	0,21	0,26	
16	enzymat., autom.	5,40	0,000	0,00	0,00	
19	HPLC	6,03	0,630	2,66	3,34	
21	HPLC	5,51	0,110	0,46	0,58	
22	enzymat., autom.	5,44	0,040	0,17	0,21	
23	HPLC	5,46	0,060	0,25	0,32	
24	NMR	5,24	-0,160	-0,68	-0,85	
27	enzymat., autom.	5,40	0,000	0,00	0,00	
28	HPLC	5,10	-0,300	-1,27	-1,59	
32	enzymat., autom.	5,80	0,400	1,69	2,12	
33	HPLC	5,62	0,220	0,93	1,17	
40	enzymat., autom.	5,40	0,000	0,00	0,00	
41	HPLC	5,61	0,210	0,89	1,11	
44	HPLC	5,43	0,033	0,14	0,17	
46	enzymat., autom.	5,56	0,160	0,68	0,85	
47	enzymat., autom.	5,25	-0,150	-0,63	-0,79	
50	enzymat., autom.	5,16	-0,236	-1,00	-1,25	
52	HPLC	5,62	0,220	0,93	1,17	
54	enzymat., autom.	5,33	-0,070	-0,30	-0,37	
55	enzymat., autom.	5,29	-0,110	-0,46	-0,58	
57	enzymat., autom.	5,40	0,000	0,00	0,00	
58	enzymat., autom.	5,31	-0,090	-0,38	-0,48	
63	HPLC	<=0				
66	enzymat. Hand	5,34	-0,060	-0,25	-0,32	
70	enzymat., autom.	5,34	-0,060	-0,25	-0,32	
72	enzymat., autom.	5,27	-0,130	-0,55	-0,69	
79	enzymat. Hand	5,11	-0,290	-1,22	-1,54	
95	enzymat., autom.	5,39	-0,010	-0,04	-0,05	
97	HPLC	5,48	0,080	0,34	0,42	

4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,97	-0,430	-1,81	-1,30	
202	FTIR	5,40	0,000	0,00	0,00	
203	FTIR	5,80	0,400	1,69	1,21	
204	FTIR	5,06	-0,340	-1,43	-1,03	
205	FTIR	5,70	0,300	1,27	0,91	
206	FTIR	5,75	0,350	1,48	1,06	
207	FTIR	5,20	-0,200	-0,84	-0,61	
208	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
209	FTIR	4,82	-0,580	-2,45	-1,76	
210	FTIR	5,65	0,250	1,05	0,76	
211	FTIR	6,30	0,900	3,80	2,73	
212	FTIR	5,00	-0,400	-1,69	-1,21	
213	FTIR	5,17	-0,230	-0,97	-0,70	
215	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
216	FTIR	5,67	0,270	1,14	0,82	
217	FTIR	4,36	-1,040	-4,39	-3,15	
218	FTIR	10,52	5,120	21,60	15,52	(*)

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	5,67	0,270	1,14	0,82	
220	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
221	FTIR	5,67	0,270	1,14	0,82	
222	FTIR	6,55	1,150	4,85	3,48	
223	FTIR	4,90	-0,500	-2,11	-1,52	
224	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
225	FTIR	5,70	0,300	1,27	0,91	
226	FTIR	5,55	0,150	0,63	0,45	
227	FTIR	5,87	0,470	1,98	1,42	
228	FTIR	5,54	0,140	0,59	0,42	
229	FTIR	5,22	-0,180	-0,76	-0,55	
230	FTIR	4,78	-0,620	-2,62	-1,88	
231	FTIR	6,79	1,390	5,87	4,21	
232	FTIR	5,40	0,000	0,00	0,00	
234	FTIR	4,81	-0,590	-2,49	-1,79	
236	FTIR	5,76	0,360	1,52	1,09	
238	FTIR	5,31	-0,090	-0,38	-0,27	
239	FTIR	5,00	-0,400	-1,69	-1,21	
243	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
244	FTIR	5,70	0,300	1,27	0,91	
245	FTIR	5,42	0,020	0,08	0,06	
247	FTIR	6,09	0,690	2,91	2,09	
248	FTIR	5,80	0,400	1,69	1,21	
249	FTIR	6,01	0,610	2,57	1,85	
251	FTIR	5,90	0,500	2,11	1,52	
252	FTIR	5,36	-0,040	-0,17	-0,12	
253	FTIR	5,05	-0,350	-1,48	-1,06	
254	FTIR	5,67	0,270	1,14	0,82	
256	FTIR	5,40	0,000	0,00	0,00	
257	FTIR	5,00	-0,400	-1,69	-1,21	
258	FTIR	4,60	-0,800	-3,38	-2,42	
259	FTIR	5,60	0,200	0,84	0,61	
260	FTIR	5,67	0,270	1,14	0,82	
261	FTIR	5,77	0,370	1,56	1,12	
262	FTIR	4,76	-0,640	-2,70	-1,94	
263	FTIR	5,30	-0,100	-0,42	-0,30	
264	FTIR	5,00	-0,400	-1,69	-1,21	
265	FTIR	4,90	-0,500	-2,11	-1,52	
266	FTIR	5,70	0,300	1,27	0,91	
267	FTIR	5,01	-0,390	-1,65	-1,18	
268	FTIR	5,08	-0,320	-1,35	-0,97	
269	FTIR	4,50	-0,900	-3,80	-2,73	
270	FTIR	5,46	0,060	0,25	0,18	
271	FTIR	5,95	0,550	2,32	1,67	
273	FTIR	4,70	-0,700	-2,95	-2,12	
274	FTIR	4,81	-0,590	-2,49	-1,79	
275	FTIR	6,30	0,900	3,80	2,73	
276	FTIR	5,56	0,160	0,68	0,48	
277	FTIR	5,90	0,500	2,11	1,52	
279	FTIR	5,60	0,200	0,84	0,61	
281	FTIR	6,03	0,630	2,66	1,91	
282	FTIR	4,90	-0,500	-2,11	-1,52	
283	FTIR	6,06	0,660	2,78	2,00	
284	FTIR	5,20	-0,200	-0,84	-0,61	
285	FTIR	4,90	-0,500	-2,11	-1,52	
286	FTIR	4,74	-0,660	-2,78	-2,00	
313	FTIR	5,20	-0,200	-0,84	-0,61	
320	FTIR	5,20	-0,200	-0,84	-0,61	
321	FTIR	5,50	0,100	0,42	0,30	
339	FTIR	6,00	0,600	2,53	1,82	
345	FTIR	5,51	0,110	0,46	0,33	
346	FTIR	5,20	-0,200	-0,84	-0,61	
351	FTIR	5,90	0,500	2,11	1,52	
366	FTIR	6,10	0,700	2,95	2,12	
371	FTIR	5,45	0,050	0,21	0,15	

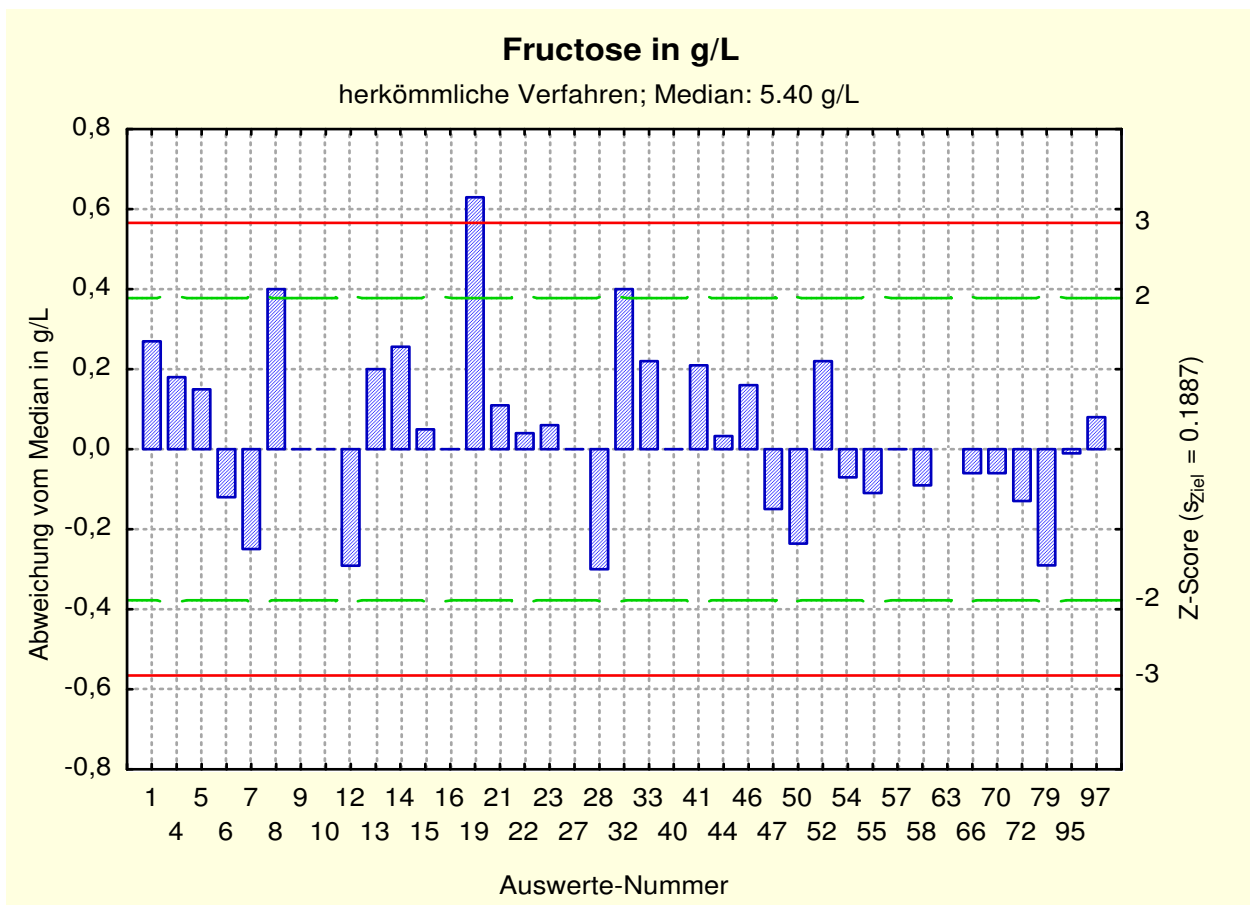
(*) Dieser Wert auf der Vorseite weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

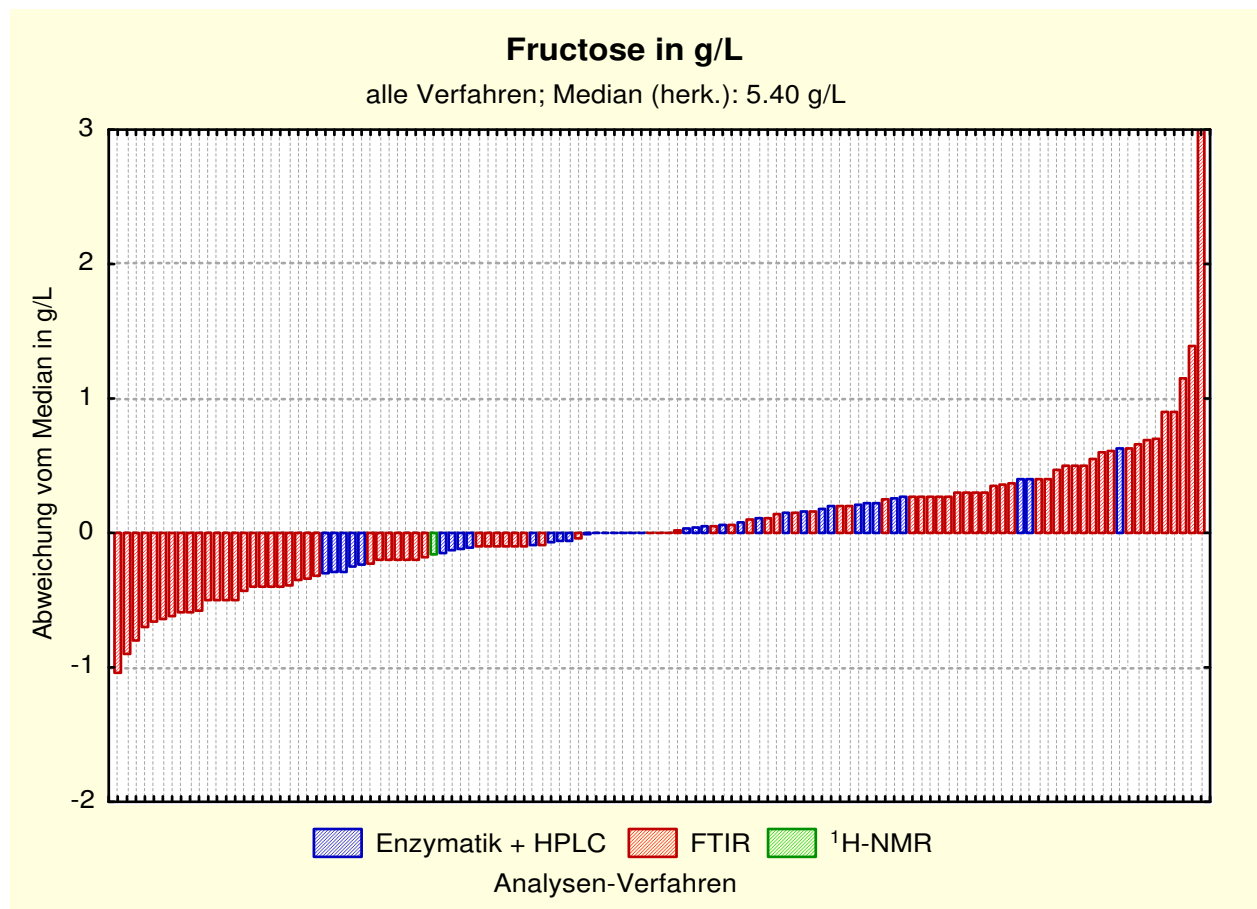
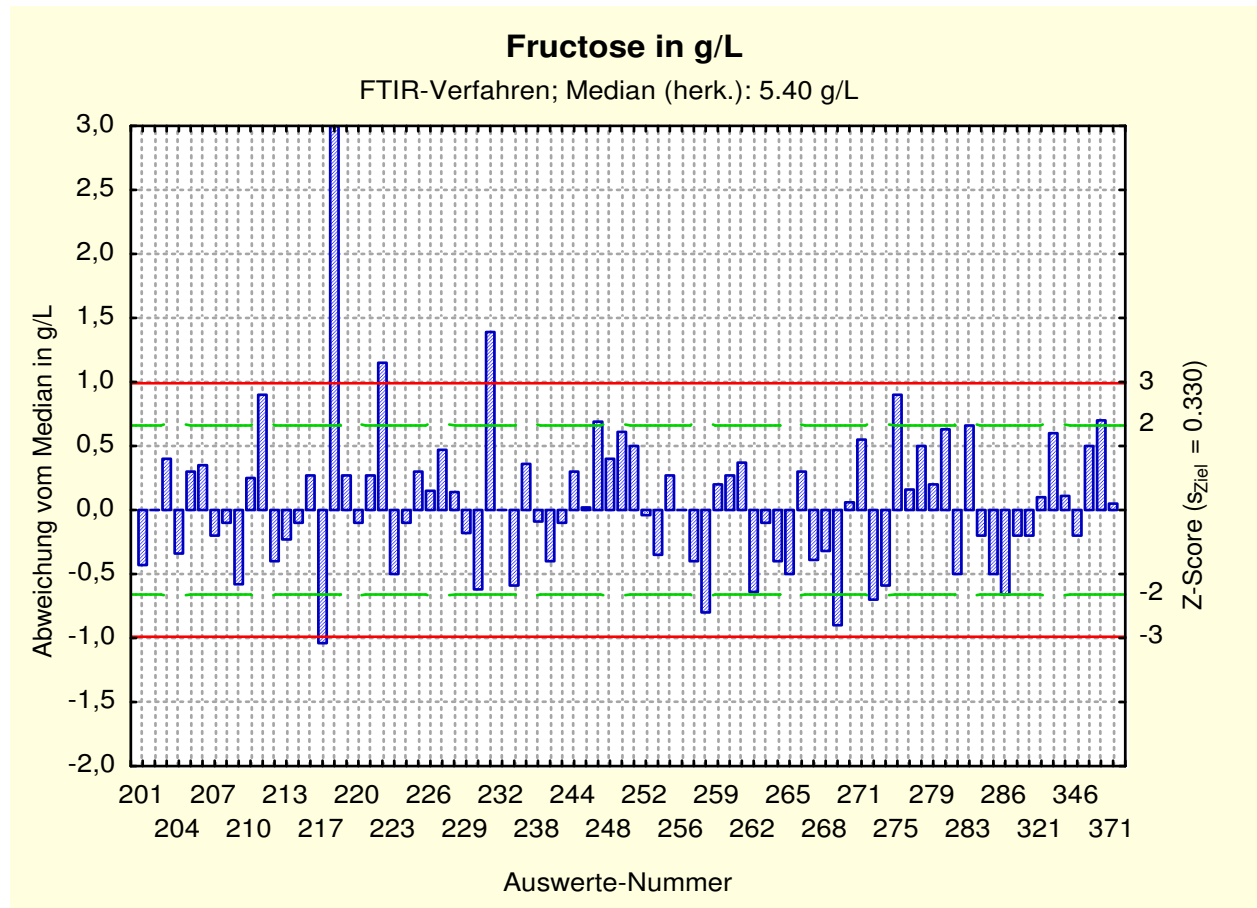
4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	38
Minimalwert	5,10
Mittelwert	5,440
Median	5,400
Maximalwert	6,03
Standardabweichung (s _L)	0,205
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,033
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,237
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,189
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,330
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,86
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,08
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,62
Quotient (u _M /s _H)	0,14
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,18
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,10

4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	13	5,544	0,125
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	19	5,366	0,134
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	6	5,412	0,314
	herkömmliche Verfahren	39	5,420	0,209
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	5,424	0,493
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	5,240	





4.7 Glycerin [g/L]

4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,31	0,31	1,20	
04	HPLC	5,97	-0,03	-0,12	
05	enzymat. autom.	5,87	-0,13	-0,50	
06	enzymat. autom.	5,89	-0,11	-0,42	
07	enzymat. Hand	5,85	-0,15	-0,58	
08	enzymat. Hand	5,80	-0,20	-0,77	
09	HPLC	6,10	0,10	0,39	
12	enzymat. autom.	7,16	1,16	4,47	
13	HPLC	6,00	0,00	0,00	
14	HPLC	6,13	0,13	0,48	
21	HPLC	6,01	0,01	0,04	
22	HPLC	6,09	0,09	0,35	
23	HPLC	5,93	-0,07	-0,27	
24	NMR	6,44	0,44	1,70	
27	HPLC	6,12	0,12	0,47	
28	HPLC	6,17	0,17	0,66	
33	HPLC	6,00	0,00	0,00	
41	HPLC	5,83	-0,17	-0,66	
44	HPLC	6,02	0,02	0,08	
47	enzymat. autom.	6,00	0,00	0,00	
52	HPLC	5,94	-0,06	-0,24	
63	HPLC	9,73	3,73	14,41	(*)
70	enzymat. Hand	5,79	-0,21	-0,81	
79	enzymat. Hand	5,85	-0,15	-0,58	
100	HPLC	6,00	0,00	0,00	

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

4.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	5,8
Mittelwert	6,04
Median	6,00
Maximalwert	7,2
Standardabweichung (s_L)	0,277
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,058
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,259
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$) ¹⁾	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,07
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,80
Quotient (u_M/s_H)	0,22
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,17

4.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

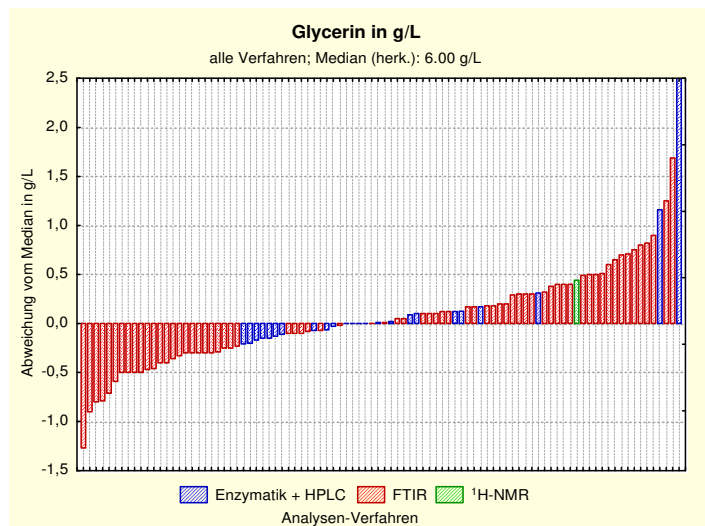
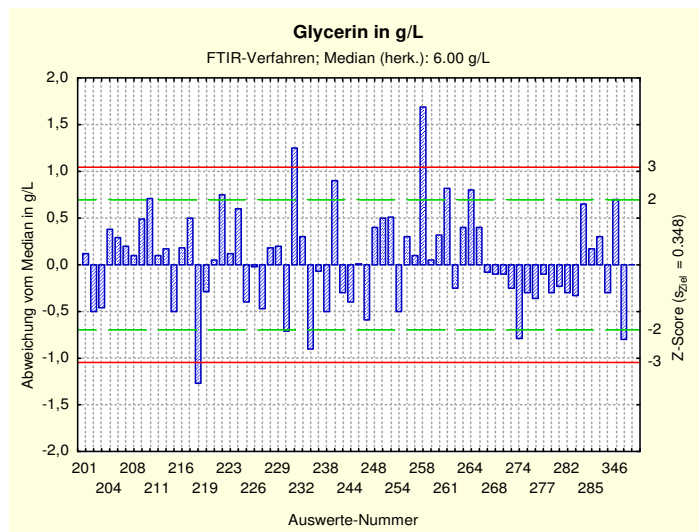
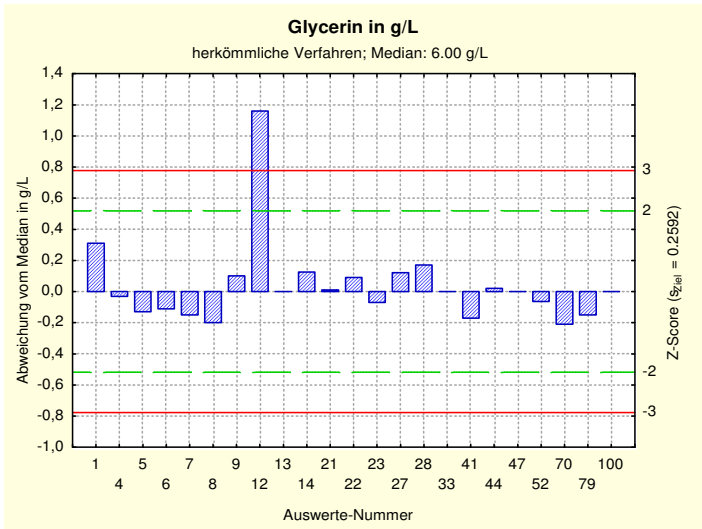
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	15	6,037	0,105
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	4	6,223	0,690
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	5,860	0,100
	herkömmliche Verfahren	24	6,003	0,159
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	6,038	0,503
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	6,440	

4.7.4 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,12	0,12	0,46	0,34	
202	FTIR	5,50	-0,50	-1,93	-1,44	
203	FTIR	5,54	-0,46	-1,77	-1,32	
204	FTIR	6,38	0,38	1,47	1,09	
206	FTIR	6,29	0,29	1,12	0,83	
207	FTIR	6,20	0,20	0,77	0,57	
208	FTIR	6,10	0,10	0,39	0,29	
209	FTIR	6,49	0,49	1,89	1,41	
210	FTIR	6,71	0,71	2,74	2,04	
211	FTIR	6,10	0,10	0,39	0,29	
213	FTIR	6,17	0,17	0,66	0,49	
215	FTIR	5,50	-0,50	-1,93	-1,44	
216	FTIR	6,18	0,18	0,69	0,52	
217	FTIR	6,50	0,50	1,93	1,44	
218	FTIR	4,73	-1,27	-4,90	-3,65	
219	FTIR	5,71	-0,29	-1,12	-0,83	
221	FTIR	6,05	0,05	0,19	0,14	
222	FTIR	6,75	0,75	2,89	2,16	
223	FTIR	6,12	0,12	0,46	0,34	
224	FTIR	6,60	0,60	2,31	1,72	
225	FTIR	5,60	-0,40	-1,54	-1,15	
226	FTIR	5,98	-0,02	-0,08	-0,06	
227	FTIR	5,53	-0,47	-1,81	-1,35	
228	FTIR	6,18	0,18	0,69	0,52	
229	FTIR	6,20	0,20	0,77	0,57	
230	FTIR	5,29	-0,71	-2,74	-2,04	
231	FTIR	7,25	1,25	4,82	3,59	
232	FTIR	6,30	0,30	1,16	0,86	
234	FTIR	5,10	-0,90	-3,47	-2,59	
236	FTIR	5,93	-0,07	-0,27	-0,20	
238	FTIR	5,50	-0,50	-1,93	-1,44	
239	FTIR	6,90	0,90	3,47	2,59	
243	FTIR	5,70	-0,30	-1,16	-0,86	
244	FTIR	5,60	-0,40	-1,54	-1,15	
245	FTIR	6,01	0,01	0,04	0,03	
247	FTIR	5,41	-0,59	-2,28	-1,70	
248	FTIR	6,40	0,40	1,54	1,15	
251	FTIR	6,50	0,50	1,93	1,44	
252	FTIR	6,51	0,51	1,97	1,47	
254	FTIR	5,50	-0,50	-1,93	-1,44	
256	FTIR	6,30	0,30	1,16	0,86	
257	FTIR	6,10	0,10	0,39	0,29	
258	FTIR	7,69	1,69	6,52	4,86	
259	FTIR	6,05	0,05	0,19	0,14	
260	FTIR	6,32	0,32	1,23	0,92	
261	FTIR	6,82	0,82	3,16	2,36	
262	FTIR	5,75	-0,25	-0,96	-0,72	
263	FTIR	6,40	0,40	1,54	1,15	
264	FTIR	6,80	0,80	3,09	2,30	
265	FTIR	6,40	0,40	1,54	1,15	
267	FTIR	5,92	-0,08	-0,31	-0,23	
268	FTIR	5,90	-0,10	-0,39	-0,29	
269	FTIR	5,90	-0,10	-0,39	-0,29	
270	FTIR	5,75	-0,25	-0,96	-0,72	
274	FTIR	5,21	-0,79	-3,05	-2,27	
275	FTIR	5,70	-0,30	-1,16	-0,86	
276	FTIR	5,64	-0,36	-1,39	-1,03	
277	FTIR	5,90	-0,10	-0,39	-0,29	
279	FTIR	5,70	-0,30	-1,16	-0,86	
281	FTIR	5,77	-0,23	-0,89	-0,66	
282	FTIR	5,70	-0,30	-1,16	-0,86	
283	FTIR	5,67	-0,33	-1,27	-0,95	
284	FTIR	6,65	0,65	2,51	1,87	
285	FTIR	6,17	0,17	0,66	0,49	
321	FTIR	6,30	0,30	1,16	0,86	
339	FTIR	5,70	-0,30	-1,16	-0,86	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
346	FTIR	6,70	0,70	2,70	2,01	
351	FTIR	5,20	-0,80	-3,09	-2,30	
371	FTIR	6,00	0,00	0,00	0,00	



4.8 pH-Wert

4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
04	elektrom.	3,61	0,050	1,05	
05	elektrom.	3,61	0,050	1,05	
06	elektrom.	3,58	0,020	0,42	
07	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
09	elektrom.	3,62	0,060	1,26	
10	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
12	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
13	elektrom.	3,55	-0,010	-0,21	
14	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
15	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
16	elektrom.	3,48	-0,080	-1,68	
19	elektrom.	3,61	0,050	1,05	
21	elektrom.	3,45	-0,110	-2,31	
22	elektrom.	3,54	-0,020	-0,42	
23	elektrom.	3,51	-0,050	-1,05	
24	elektrom.	3,49	-0,070	-1,47	
25	elektrom.	3,46	-0,100	-2,10	
26	elektrom.	3,58	0,020	0,42	
27	elektrom.	3,55	-0,010	-0,21	
28	elektrom.	3,63	0,070	1,47	
29	elektrom.	3,58	0,020	0,42	
30	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
32	elektrom.	3,52	-0,040	-0,84	
33	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
34	elektrom.	3,48	-0,080	-1,68	
39	elektrom.	3,52	-0,040	-0,84	
40	elektrom.	3,63	0,070	1,47	
41	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
42	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
44	elektrom.	3,42	-0,140	-2,94	
46	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
47	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
50	elektrom.	3,19	-0,370	-7,77	(**)
51	elektrom.	3,55	-0,010	-0,21	
52	elektrom.	3,56	0,001	0,02	
57	elektrom.	3,51	-0,050	-1,05	
58	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
59	elektrom.	3,50	-0,060	-1,26	
62	elektrom.	3,54	-0,020	-0,42	
63	elektrom.	3,40	-0,160	-3,36	
64	elektrom.	3,59	0,030	0,63	
66	elektrom.	3,49	-0,070	-1,47	
69	elektrom.	3,40	-0,160	-3,36	
70	elektrom.	3,61	0,050	1,05	
72	elektrom.	3,76	0,200	4,20	
78	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
79	elektrom.	3,56	0,000	0,00	
83	elektrom.	3,54	-0,020	-0,42	

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

4.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	49	3,552	0,0572
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,526	0,0779

4.8.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,51	-0,050	-1,01	
202	FTIR	3,59	0,030	0,61	
203	FTIR	3,56	0,000	0,00	
204	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
205	FTIR	3,47	-0,090	-1,83	
206	FTIR	3,58	0,020	0,41	
207	FTIR	3,54	-0,020	-0,41	
208	FTIR	3,49	-0,070	-1,42	
209	FTIR	3,61	0,050	1,01	
210	FTIR	3,54	-0,020	-0,41	
211	FTIR	3,59	0,030	0,61	
213	FTIR	3,49	-0,070	-1,42	
215	FTIR	3,52	-0,040	-0,81	
216	FTIR	3,51	-0,050	-1,01	
217	FTIR	3,66	0,100	2,03	
218	FTIR	3,51	-0,050	-1,01	
219	FTIR	3,50	-0,060	-1,22	
220	FTIR	3,17	-0,390	-7,91	(**)
221	FTIR	3,49	-0,070	-1,42	
222	FTIR	3,43	-0,130	-2,64	
223	FTIR	3,47	-0,090	-1,83	
224	FTIR	3,51	-0,050	-1,01	
225	FTIR	3,46	-0,100	-2,03	
226	FTIR	3,52	-0,040	-0,81	
227	FTIR	3,55	-0,010	-0,20	
228	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
229	FTIR	3,56	0,000	0,00	
230	FTIR	3,60	0,040	0,81	
231	FTIR	3,48	-0,080	-1,62	
232	FTIR	3,50	-0,060	-1,22	
234	FTIR	3,47	-0,090	-1,83	
236	FTIR	3,57	0,010	0,20	
238	FTIR	3,50	-0,060	-1,22	
239	FTIR	3,65	0,090	1,83	
243	FTIR	3,58	0,020	0,41	
244	FTIR	3,37	-0,190	-3,85	
245	FTIR	3,59	0,030	0,61	
247	FTIR	3,43	-0,130	-2,64	
248	FTIR	3,54	-0,020	-0,41	
249	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
251	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
252	FTIR	3,64	0,080	1,62	
253	FTIR	3,65	0,090	1,83	
254	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
256	FTIR	3,56	0,000	0,00	
257	FTIR	3,58	0,020	0,41	
258	FTIR	3,52	-0,040	-0,81	
259	FTIR	3,56	0,000	0,00	
260	FTIR	3,45	-0,110	-2,23	
261	FTIR	3,44	-0,120	-2,43	
262	FTIR	3,68	0,120	2,43	
263	FTIR	3,35	-0,210	-4,26	
264	FTIR	3,65	0,090	1,83	
265	FTIR	3,64	0,080	1,62	
266	FTIR	3,59	0,030	0,61	
267	FTIR	3,52	-0,040	-0,81	
268	FTIR	3,50	-0,060	-1,22	
269	FTIR	3,56	0,000	0,00	
270	FTIR	3,43	-0,130	-2,64	
271	FTIR	3,49	-0,070	-1,42	
272	FTIR	3,42	-0,140	-2,84	
273	FTIR	3,51	-0,050	-1,01	
274	FTIR	3,67	0,110	2,23	
275	FTIR	3,38	-0,180	-3,65	

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

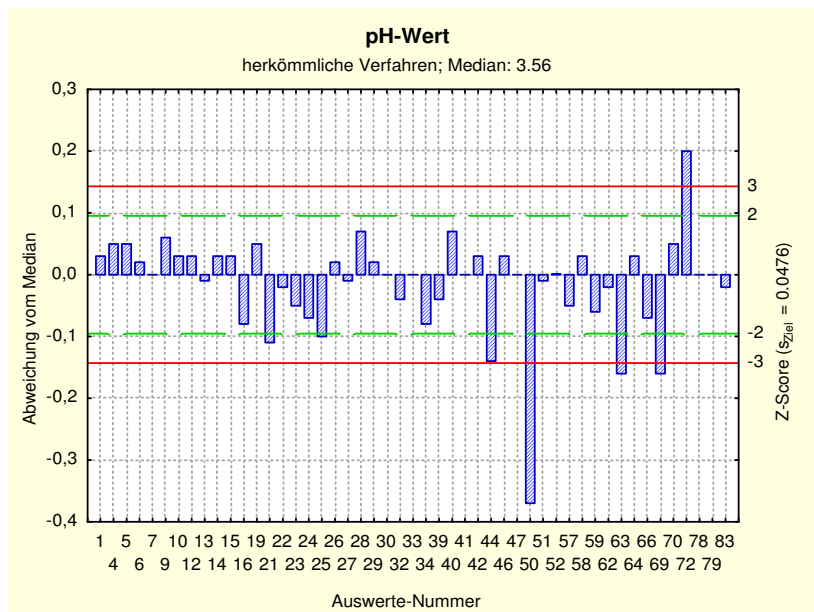
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

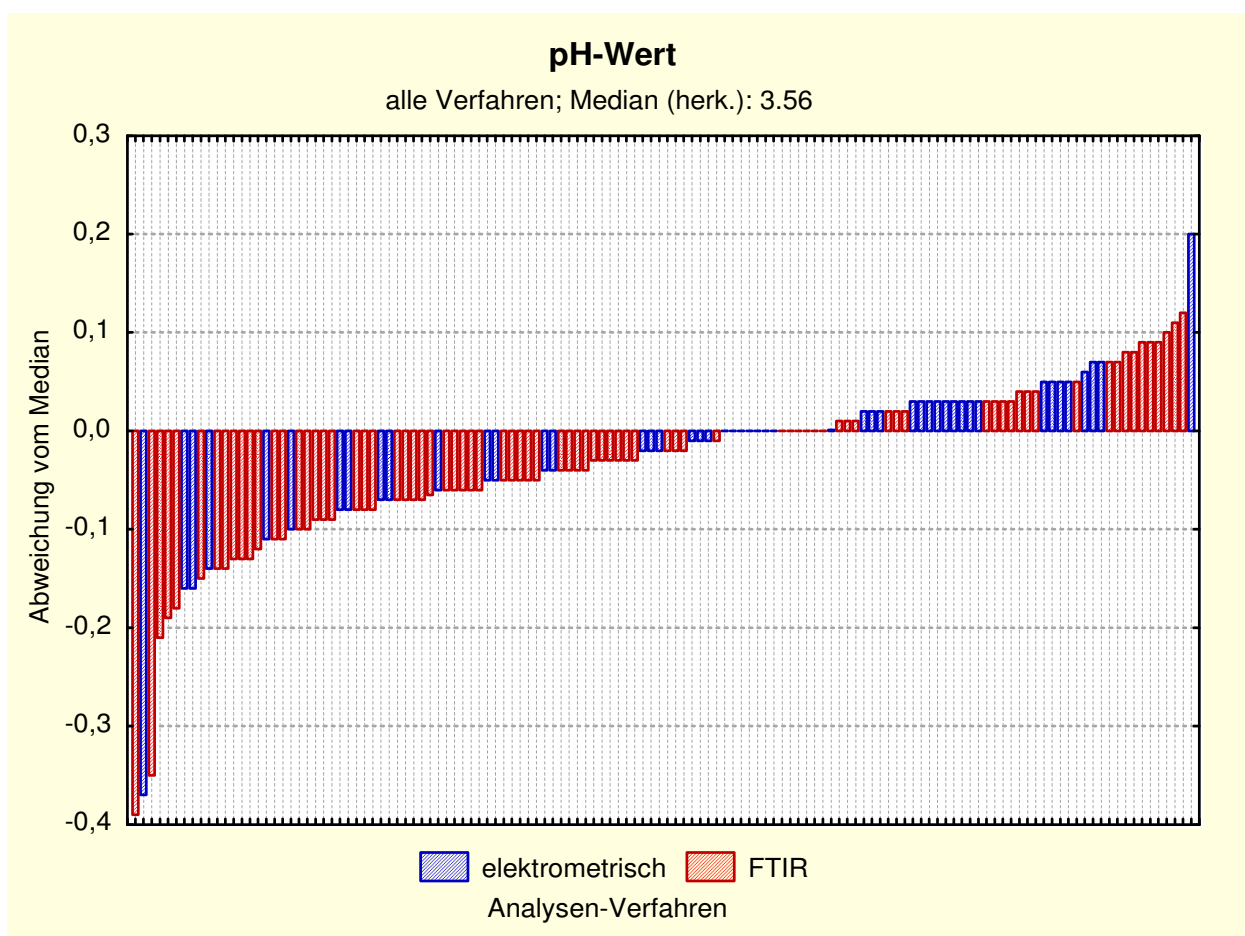
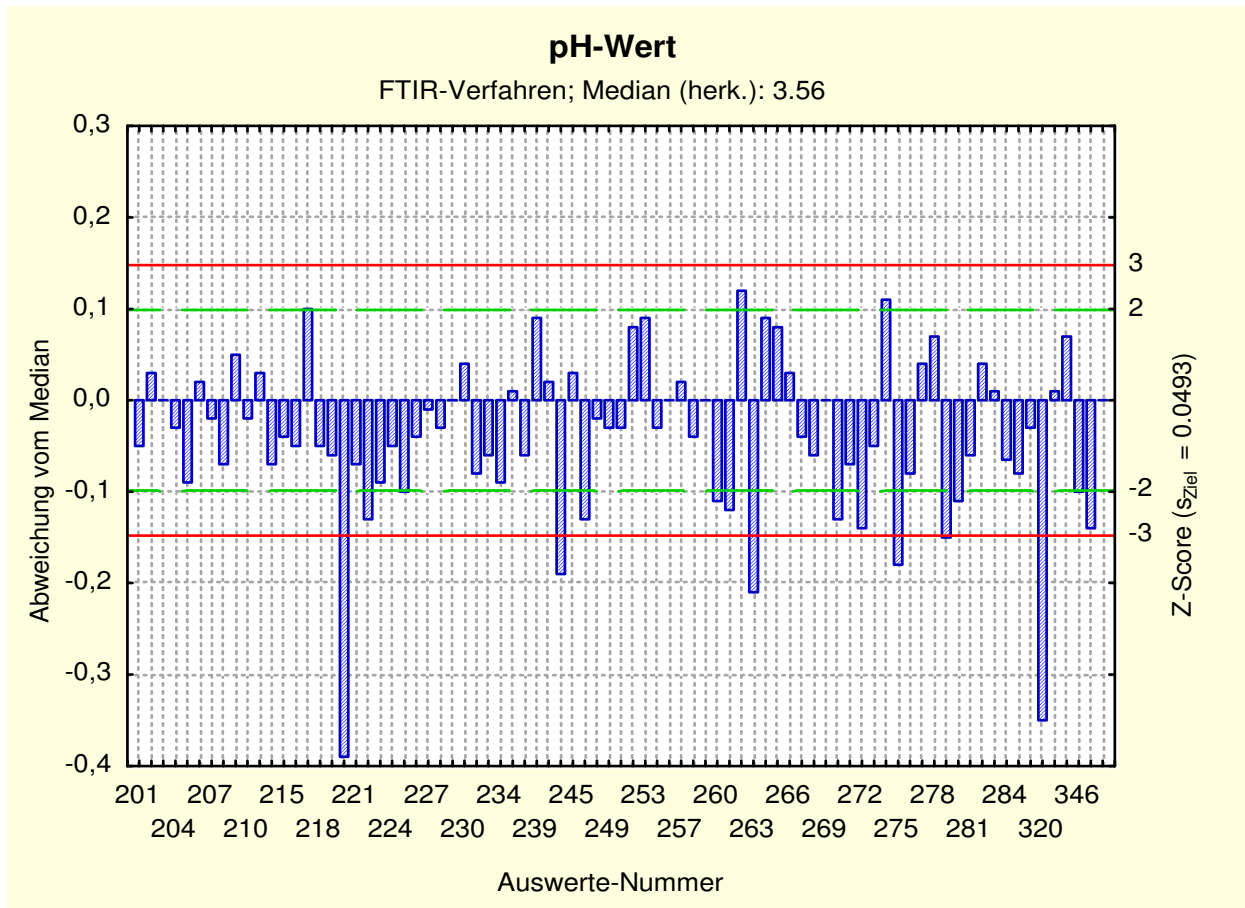
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,48	-0,080	-1,62	
277	FTIR	3,60	0,040	0,81	
278	FTIR	3,63	0,070	1,42	
279	FTIR	3,41	-0,150	-3,04	
280	FTIR	3,45	-0,110	-2,23	
281	FTIR	3,50	-0,060	-1,22	
282	FTIR	3,60	0,040	0,81	
283	FTIR	3,57	0,010	0,20	
284	FTIR	3,50	-0,065	-1,32	
285	FTIR	3,48	-0,080	-1,62	
286	FTIR	3,53	-0,030	-0,61	
320	FTIR	3,21	-0,350	-7,10	(**)
321	FTIR	3,57	0,010	0,20	
339	FTIR	3,63	0,070	1,42	
346	FTIR	3,46	-0,100	-2,03	
351	FTIR	3,42	-0,140	-2,84	
366	FTIR	3,56	0,000	0,00	

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

4.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	49	48
Minimalwert	3,19	3,40
Mittelwert	3,545	3,552
Median	3,560	3,560
Maximalwert	3,76	3,76
Standardabweichung (s _L)	0,0826	0,0650
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0118	0,0094
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0493	0,0493
Horvat-Wert (s _L /s _H)		
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,73	1,37
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,67	1,32
Quotient (u _M /s _H)		
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,25	0,20
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,24	0,19





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	4,86	-0,105	-0,48	-0,98	
05	LwK 5.2.1	5,20	0,235	1,06	2,19	
06	LwK 5.1	4,86	-0,105	-0,48	-0,98	
07	LwK 5.1	4,95	-0,015	-0,07	-0,14	
08	LwK 5.2.1	5,68	0,715	3,24	6,67	(**)
09	LwK 5.2.1	4,89	-0,075	-0,34	-0,70	
10	LwK 5.2.1	4,91	-0,055	-0,25	-0,51	
12	LwK 5.2.1	4,81	-0,155	-0,70	-1,45	
13	LwK 5.1	5,10	0,135	0,61	1,26	
14	LwK 5.1	4,96	-0,005	-0,02	-0,05	
15	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
16	LwK 5.2.1	4,80	-0,165	-0,75	-1,54	
18	LwK 5.2.2	5,10	0,135	0,61	1,26	
19	LwK 5.2.1	4,99	0,025	0,11	0,23	
21	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
22	LwK 5.1	4,83	-0,135	-0,61	-1,26	
23	LwK 5.1	5,10	0,135	0,61	1,26	
24	LwK 5.1	4,80	-0,165	-0,75	-1,54	
26	LwK 5.1	5,12	0,155	0,70	1,45	
27	LwK 5.1	5,01	0,045	0,20	0,42	
28	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
29	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
30	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
32	LwK 5.2.1	5,10	0,135	0,61	1,26	
33	LwK 5.1	4,91	-0,055	-0,25	-0,51	
34	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
39	LwK 5.1	4,97	0,005	0,02	0,05	
40	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
41	LwK 5.2.1	5,06	0,095	0,43	0,89	
42	LwK 5.1	5,01	0,045	0,20	0,42	
44	LwK 5.1	4,89	-0,075	-0,34	-0,70	
46	LwK 5.1	4,98	0,015	0,07	0,14	
47	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
48	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
50	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
51	LwK 5.1	4,95	-0,015	-0,07	-0,14	
52	LwK 5.1	5,10	0,135	0,61	1,26	
54	LwK 5.2.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
55	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	
57	LwK 5.2.2	5,70	0,735	3,33	6,86	(**)
58	LwK 5.2.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
59	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
62	LwK 5.2.1	4,92	-0,045	-0,20	-0,42	
63	LwK 5.2.2	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
64	LwK 5.1	4,90	-0,065	-0,29	-0,61	
65	LwK 5.2.1	5,50	0,535	2,42	4,99	
66	LwK 5.1	4,93	-0,035	-0,16	-0,33	
69	LwK 5.2.1	4,80	-0,165	-0,75	-1,54	
70	LwK 5.1	4,84	-0,125	-0,57	-1,17	
71	LwK 5.1	4,80	-0,165	-0,75	-1,54	
72	LwK 5.2.1	5,20	0,235	1,06	2,19	
78	LwK 5.1	5,23	0,265	1,20	2,47	
79	LwK 5.1	5,04	0,075	0,34	0,70	
83	LwK 5.2.1	5,10	0,135	0,61	1,26	
90	LwK 5.2.1	4,99	0,025	0,11	0,23	
100	LwK 5.1	5,00	0,035	0,16	0,33	

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

4.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	4,72	-0,250	-1,13	-1,72	
202	LwK 5.3	4,75	-0,220	-1,00	-1,52	
203	LwK 5.3	4,78	-0,190	-0,86	-1,31	
204	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
205	LwK 5.3	4,92	-0,050	-0,23	-0,34	
206	LwK 5.3	4,67	-0,300	-1,36	-2,07	
207	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
208	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
209	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
210	LwK 5.3	4,87	-0,100	-0,45	-0,69	
211	LwK 5.3	5,10	0,130	0,59	0,90	
212	LwK 5.3	4,79	-0,175	-0,79	-1,21	
213	LwK 5.3	4,82	-0,150	-0,68	-1,03	
215	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
216	LwK 5.3	5,04	0,070	0,32	0,48	
217	LwK 5.3	4,89	-0,080	-0,36	-0,55	
218	LwK 5.3	4,54	-0,430	-1,95	-2,97	
219	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
220	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
221	LwK 5.3	4,79	-0,180	-0,81	-1,24	
222	LwK 5.3	4,86	-0,110	-0,50	-0,76	
223	LwK 5.3	4,79	-0,180	-0,81	-1,24	
224	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
225	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
226	LwK 5.3	5,12	0,150	0,68	1,03	
227	LwK 5.3	4,78	-0,190	-0,86	-1,31	
228	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
229	LwK 5.3	4,97	0,000	0,00	0,00	
230	LwK 5.3	5,13	0,160	0,72	1,10	
231	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
232	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
234	LwK 5.3	5,06	0,090	0,41	0,62	
236	LwK 5.3	4,66	-0,310	-1,40	-2,14	
238	LwK 5.3	4,66	-0,310	-1,40	-2,14	
239	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
243	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
244	LwK 5.3	4,86	-0,110	-0,50	-0,76	
245	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
247	LwK 5.3	5,02	0,050	0,23	0,34	
248	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
249	LwK 5.3	4,83	-0,140	-0,63	-0,97	
250	LwK 5.3	5,01	0,040	0,18	0,28	
251	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
252	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
253	LwK 5.3	4,94	-0,030	-0,14	-0,21	
254	LwK 5.3	5,18	0,210	0,95	1,45	
256	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
257	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
258	LwK 5.3	4,87	-0,100	-0,45	-0,69	
259	LwK 5.3	5,01	0,040	0,18	0,28	
260	LwK 5.3	5,09	0,120	0,54	0,83	
261	LwK 5.3	4,67	-0,300	-1,36	-2,07	
262	LwK 5.3	4,58	-0,390	-1,77	-2,69	
263	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
264	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
265	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
266	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
267	LwK 5.3	4,76	-0,210	-0,95	-1,45	
268	LwK 5.3	4,61	-0,360	-1,63	-2,48	
269	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
270	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
271	LwK 5.3	4,79	-0,180	-0,81	-1,24	
272	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
273	LwK 5.3	5,00	0,030	0,14	0,21	
274	LwK 5.3	4,93	-0,040	-0,18	-0,28	
275	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

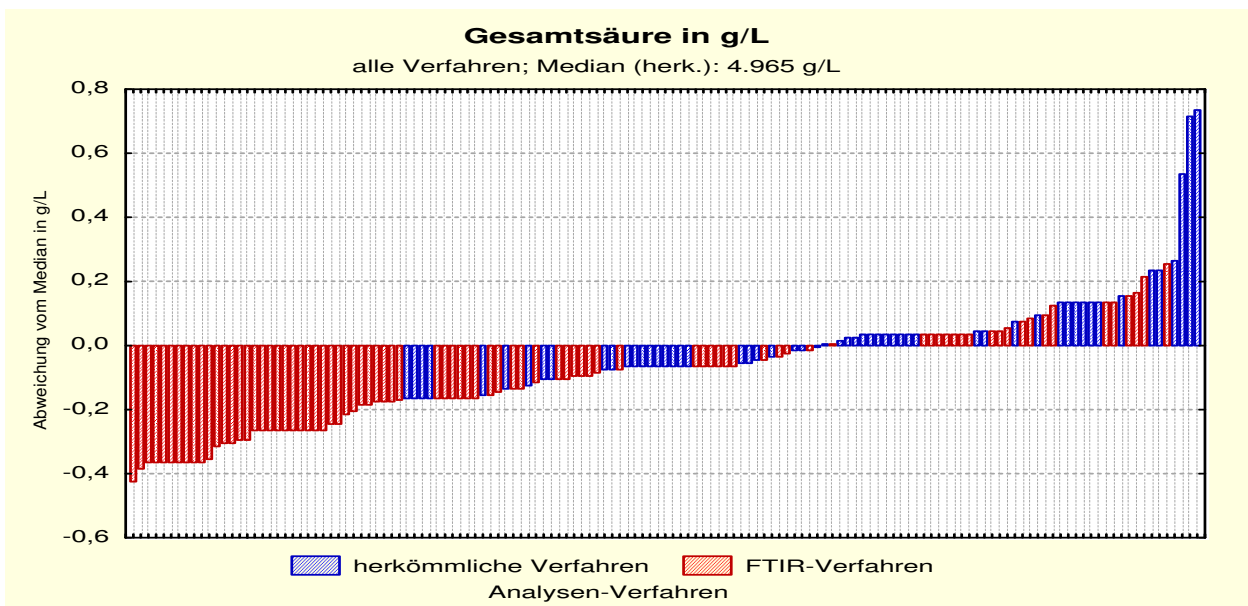
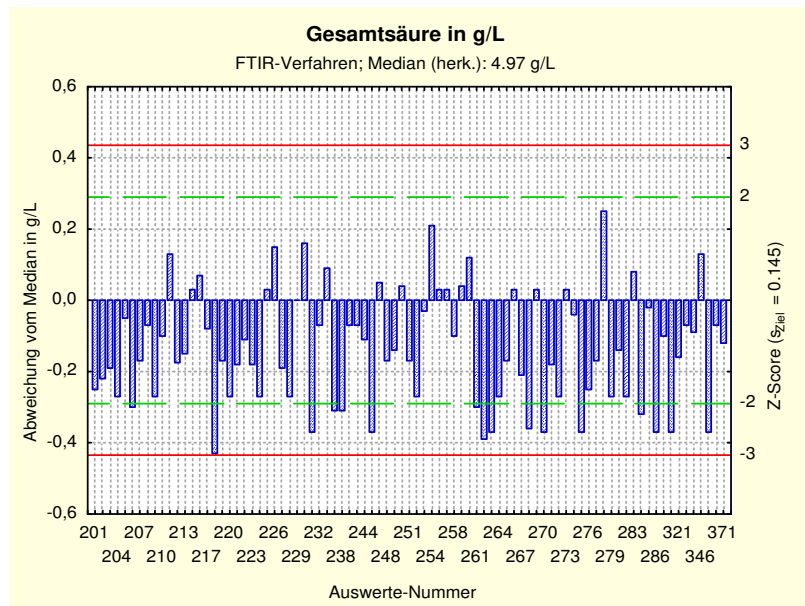
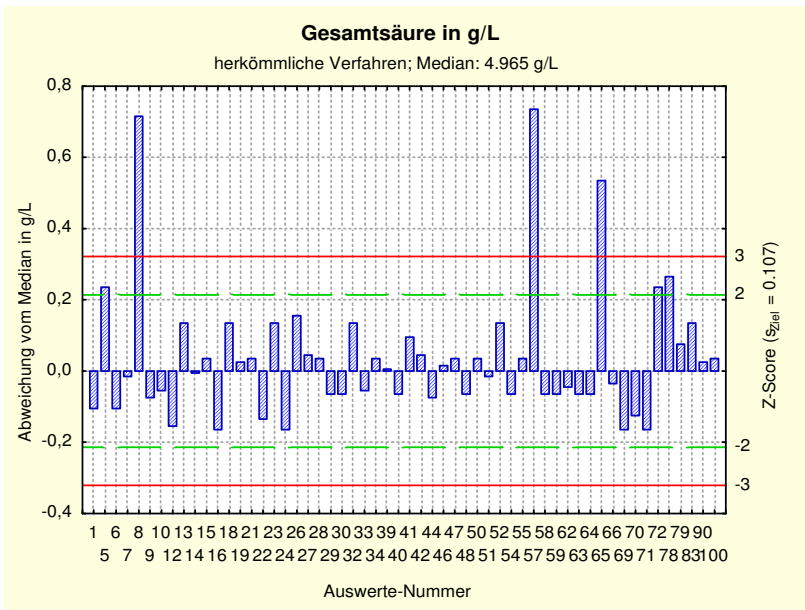
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 5.3	4,72	-0,250	-1,13	-1,72	
277	LwK 5.3	4,80	-0,170	-0,77	-1,17	
278	LwK 5.3	5,22	0,250	1,13	1,72	
279	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
281	LwK 5.3	4,83	-0,140	-0,63	-0,97	
282	LwK 5.3	4,70	-0,270	-1,22	-1,86	
283	LwK 5.3	5,05	0,080	0,36	0,55	
284	LwK 5.3	4,65	-0,320	-1,45	-2,21	
285	LwK 5.3	4,95	-0,020	-0,09	-0,14	
286	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
313	LwK 5.3	4,87	-0,100	-0,45	-0,69	
320	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
321	LwK 5.3	4,81	-0,160	-0,72	-1,10	
339	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
345	LwK 5.3	4,88	-0,090	-0,41	-0,62	
346	LwK 5.3	5,10	0,130	0,59	0,90	
351	LwK 5.3	4,60	-0,370	-1,68	-2,55	
366	LwK 5.3	4,90	-0,070	-0,32	-0,48	
371	LwK 5.3	4,85	-0,120	-0,54	-0,83	

4.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	56	54
Minimalwert	4,80	4,80
Mittelwert	5,002	4,976
Median	4,975	4,965
Maximalwert	5,70	5,50
Standardabweichung (s_L)	0,184	0,128
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,025	0,017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,221	0,221
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,83	0,58
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,71	1,20
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,27	0,88
Quotient (u_M/s_H)	0,11	0,08
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,23	0,16
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,17	0,12

4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	35	4,962	0,094
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01; - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	18	4,998	0,180
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	3	5,182	0,374
	herkömmliche Verfahren	56	4,974	0,119
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	4,828	0,174



4.10 Weinsäure [g/L]

4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,68	-0,059	-0,65	
02	IC	1,65	-0,090	-1,00	
05	photometr.	1,53	-0,205	-2,27	
06	HPLC	1,72	-0,015	-0,17	
07	HPLC	1,62	-0,115	-1,27	
08	HPLC	1,65	-0,085	-0,94	
09	IC	1,60	-0,135	-1,49	
12	photometr., autom.	1,64	-0,091	-1,00	
16	photometr., autom.	1,90	0,165	1,83	
19	IC	1,76	0,025	0,28	
22	HPLC	1,65	-0,085	-0,94	
23	HPLC	2,13	0,395	4,37	
24	NMR	1,86	0,125	1,38	
27	photometr., autom.	1,30	-0,435	-4,82	
28	HPLC	1,74	0,000	0,00	
32	photometr., autom.	1,80	0,065	0,72	
33	photometr.	1,95	0,215	2,38	
40	photometr., autom.	1,90	0,165	1,83	
41	HPLC	1,72	-0,015	-0,17	
47	photometr., autom.	2,00	0,265	2,93	
50	photometr., autom.	1,85	0,115	1,27	
52	HPLC	1,69	-0,045	-0,50	
57	photometr., autom.	1,90	0,165	1,83	
58	photometr., autom.	1,93	0,191	2,11	
59	photometr.	1,75	0,015	0,17	
63	photometr.	1,60	-0,135	-1,49	
70	photometr.	1,83	0,095	1,05	
72	photometr., autom.	1,71	-0,025	-0,28	
79	photometr.	1,55	-0,185	-2,05	
90	HPLC	1,78	0,045	0,50	
95	photometr., autom.	1,89	0,155	1,72	
100	HPLC	1,80	0,065	0,72	

4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,62	-0,115	-1,27	-0,51	
202	FTIR	1,39	-0,345	-3,82	-1,52	
203	FTIR	1,44	-0,295	-3,27	-1,30	
204	FTIR	2,05	0,315	3,49	1,39	
205	FTIR	2,11	0,375	4,15	1,65	
206	FTIR	1,92	0,185	2,05	0,81	
208	FTIR	1,70	-0,035	-0,39	-0,15	
209	FTIR	1,72	-0,015	-0,17	-0,07	
210	FTIR	1,83	0,095	1,05	0,42	
211	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
213	FTIR	2,02	0,285	3,15	1,26	
215	FTIR	1,50	-0,235	-2,60	-1,04	
216	FTIR	1,74	0,005	0,06	0,02	
217	FTIR	1,85	0,115	1,27	0,51	
218	FTIR	3,09	1,355	15,00	5,97	(*)
219	FTIR	1,72	-0,015	-0,17	-0,07	
220	FTIR	2,80	1,065	11,79	4,69	
221	FTIR	2,26	0,525	5,81	2,31	
222	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
223	FTIR	1,40	-0,335	-3,71	-1,48	
224	FTIR	2,01	0,275	3,04	1,21	
225	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
226	FTIR	3,52	1,785	19,76	7,86	(*)

(*) 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
227	FTIR	1,70	-0,035	-0,39	-0,15	
228	FTIR	1,80	0,065	0,72	0,29	
229	FTIR	1,76	0,025	0,28	0,11	
230	FTIR	2,00	0,265	2,93	1,17	
231	FTIR	1,34	-0,395	-4,37	-1,74	
232	FTIR	1,70	-0,035	-0,39	-0,15	
234	FTIR	1,71	-0,025	-0,28	-0,11	
236	FTIR	2,15	0,415	4,59	1,83	
238	FTIR	1,65	-0,085	-0,94	-0,37	
239	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
243	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
244	FTIR	1,65	-0,085	-0,94	-0,37	
245	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
247	FTIR	1,93	0,195	2,16	0,86	
248	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
249	FTIR	1,76	0,025	0,28	0,11	
251	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
252	FTIR	1,57	-0,165	-1,83	-0,73	
254	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
256	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
257	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
258	FTIR	3,50	1,765	19,54	7,78	(*)
259	FTIR	1,24	-0,495	-5,48	-2,18	
260	FTIR	2,09	0,355	3,93	1,56	
261	FTIR	2,02	0,285	3,15	1,26	
262	FTIR	1,49	-0,245	-2,71	-1,08	
263	FTIR	2,10	0,365	4,04	1,61	
264	FTIR	1,80	0,065	0,72	0,29	
267	FTIR	1,85	0,115	1,27	0,51	
268	FTIR	1,64	-0,095	-1,05	-0,42	
269	FTIR	1,90	0,165	1,83	0,73	
270	FTIR	1,76	0,025	0,28	0,11	
271	FTIR	1,50	-0,235	-2,60	-1,04	
272	FTIR	1,53	-0,205	-2,27	-0,90	
273	FTIR	1,70	-0,035	-0,39	-0,15	
274	FTIR	1,51	-0,225	-2,49	-0,99	
275	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
276	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
277	FTIR	2,10	0,365	4,04	1,61	
278	FTIR	1,25	-0,485	-5,37	-2,14	
279	FTIR	2,20	0,465	5,15	2,05	
280	FTIR	4,83	3,095	34,26	13,63	(*)
281	FTIR	1,54	-0,195	-2,16	-0,86	
282	FTIR	1,60	-0,135	-1,49	-0,59	
283	FTIR	1,77	0,035	0,39	0,15	
284	FTIR	2,19	0,450	4,98	1,98	
285	FTIR	1,98	0,245	2,71	1,08	
286	FTIR	1,80	0,065	0,72	0,29	
320	FTIR	2,90	1,165	12,90	5,13	(*)
321	FTIR	1,67	-0,065	-0,72	-0,29	
339	FTIR	1,30	-0,435	-4,82	-1,92	
346	FTIR	1,80	0,065	0,72	0,29	
351	FTIR	2,70	0,965	10,68	4,25	

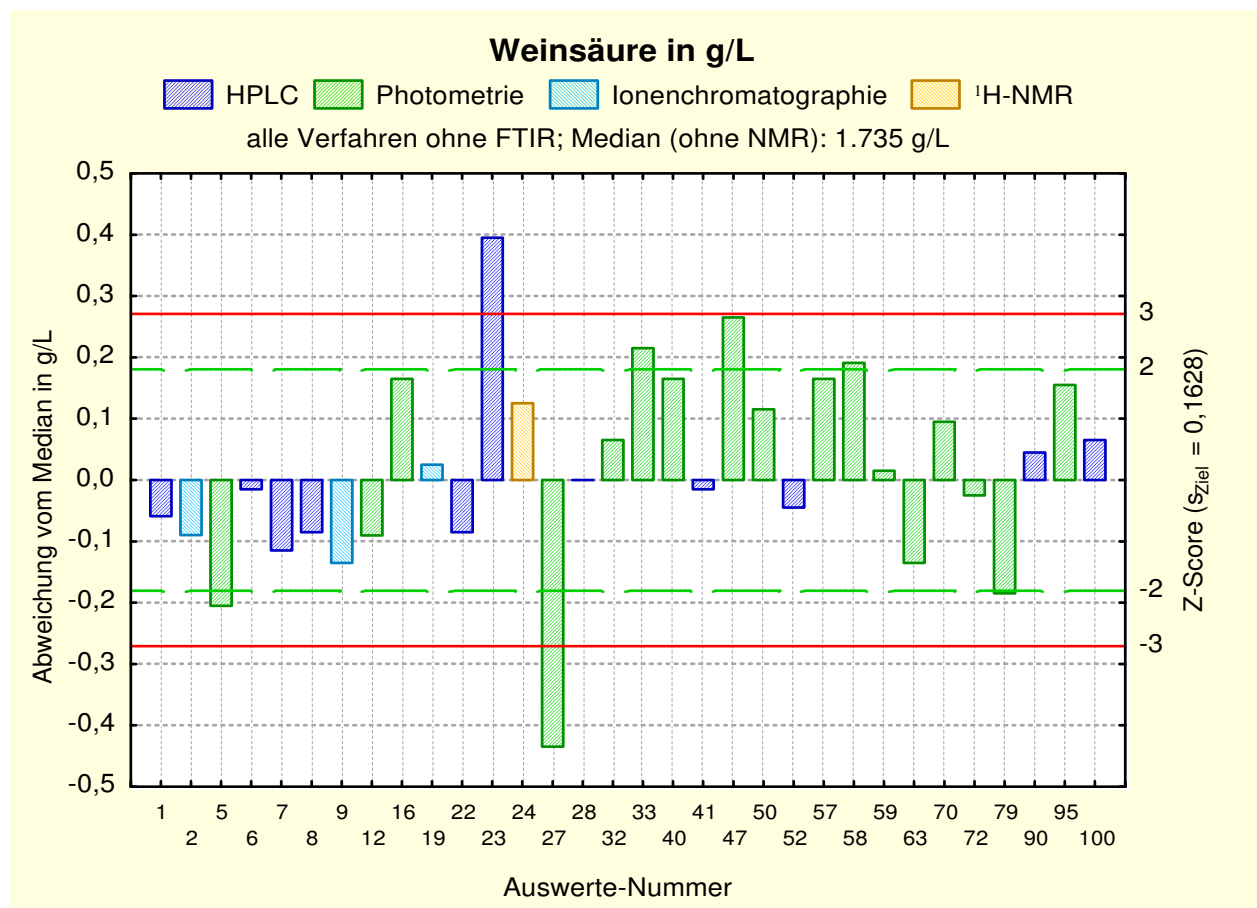
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

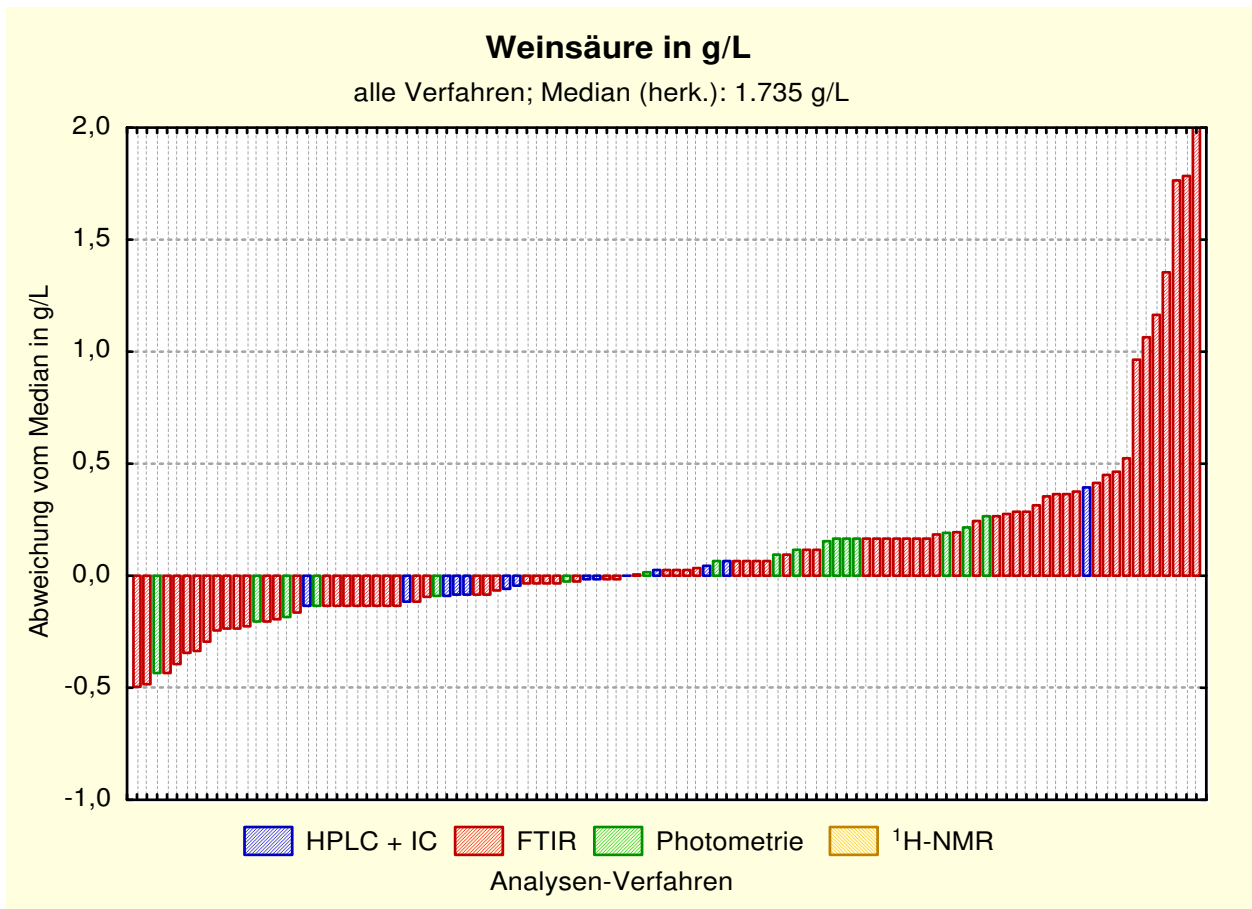
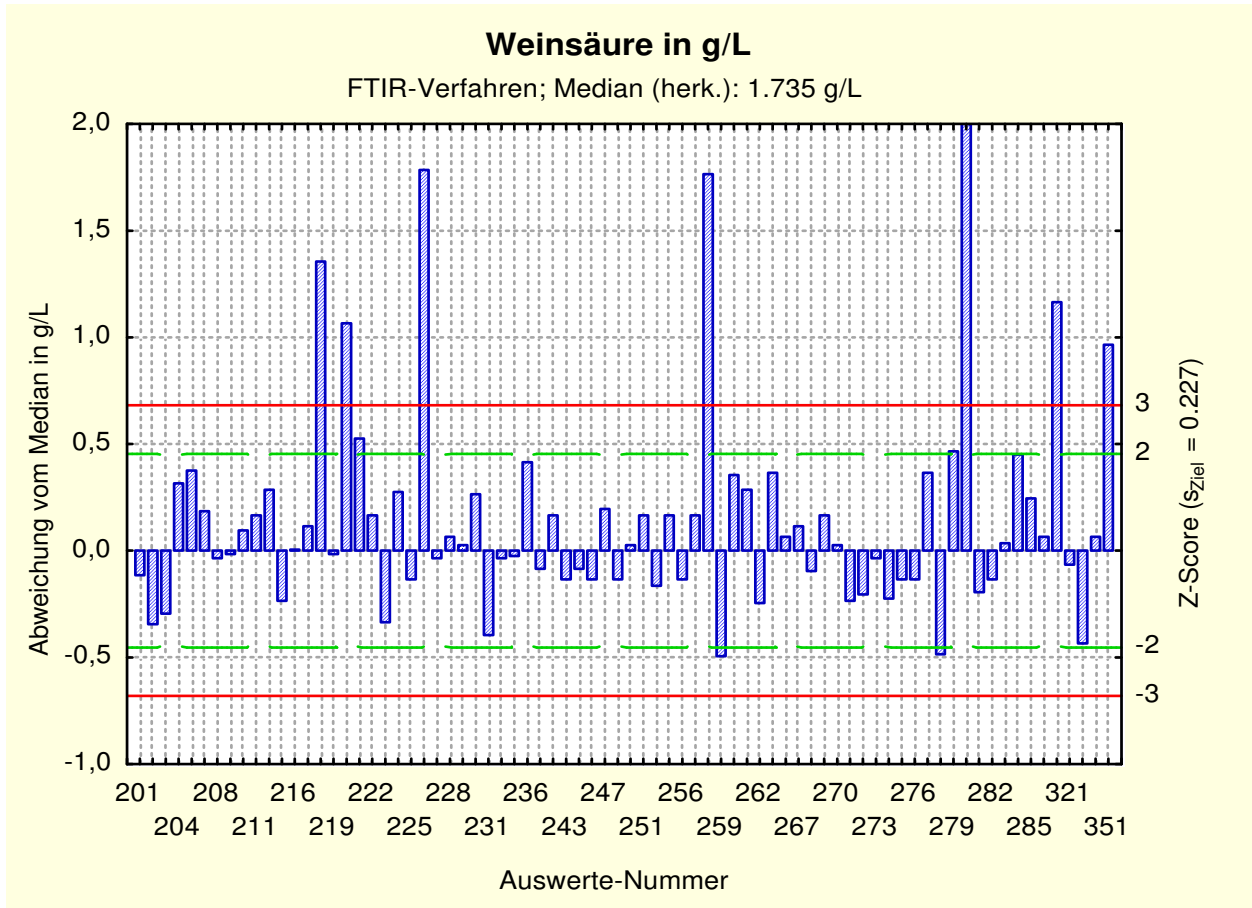
4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	31
Minimalwert	1,30
Mittelwert	1,749
Median	1,735
Maximalwert	2,13
Standardabweichung (s_L)	0,163
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,029
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,090
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,80
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,72
Quotient (u_M/s_H)	0,32
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,13

4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	1,715	0,076
photometr.	photometr. n. Rebelein	6	1,702	0,192
phot.autom.	photometr., automatisiert	11	1,835	0,132
IC	Ionenchromatographie	3	1,663	0,084
	herkömmliche Verfahren	31	1,750	0,152
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	1,800	0,290
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	1,860	





4.11 Flüchtige Säure [g/L]

4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO ₂ unber.	0,660	0,1800	5,94	6,30	(***)
05	Österreich, SO ₂ korr.	0,530	0,0500	1,65	1,75	
06	Gerhardt SO ₂ korr.	0,490	0,0100	0,33	0,35	
07	Halbmikro SO ₂ korr.	0,456	-0,0240	-0,79	-0,84	
09	OIV SO ₂ -korr.	0,950	0,4700	15,50	16,45	(*)
10	OIV SO ₂ -korr.	0,448	-0,0320	-1,06	-1,12	
12	Halbmikro SO ₂ korr.	0,520	0,0400	1,32	1,40	
13	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,400	-0,0800	-2,64	-2,80	
14	Gerhardt SO ₂ korr.	0,615	0,1350	4,45	4,72	
21	Gerhardt SO ₂ unber.	0,590	0,1100	3,63	3,85	
23	Halbmikro SO ₂ unber.	0,520	0,0400	1,32	1,40	
26	OIV SO ₂ -korr.	0,520	0,0400	1,32	1,40	
29	Halbmikro SO ₂ korr.	0,432	-0,0480	-1,58	-1,68	
30	Wädenswil SO ₂ korr.	0,480	0,0000	0,00	0,00	
32	Gerhardt SO ₂ korr.	0,480	0,0000	0,00	0,00	
33	Gerhardt SO ₂ korr.	0,400	-0,0800	-2,64	-2,80	
34	Halbmikro SO ₂ unber.	0,480	0,0000	0,00	0,00	
39	Halbmikro SO ₂ unber.	0,552	0,0720	2,37	2,52	
40	Gerhardt SO ₂ korr.	0,550	0,0700	2,31	2,45	
41	Gerhardt SO ₂ korr.	0,540	0,0600	1,98	2,10	
44	Halbmikro SO ₂ unber.	0,490	0,0100	0,33	0,35	
47	Gerhardt SO ₂ korr.	0,550	0,0700	2,31	2,45	
51	Gerhardt SO ₂ korr.	0,520	0,0400	1,32	1,40	
52	Halbmikro SO ₂ korr.	0,421	-0,0590	-1,95	-2,06	
55	Gerhardt SO ₂ korr.	0,650	0,1700	5,61	5,95	(**)
58	Rentschler mod. korr.	0,441	-0,0390	-1,29	-1,36	
59	Halbmikro SO ₂ korr.	0,451	-0,0290	-0,96	-1,01	
62	Wädenswil SO ₂ korr.	0,416	-0,0640	-2,11	-2,24	
63	Halbmikro SO ₂ unber.	0,570	0,0900	2,97	3,15	
66	Halbmikro SO ₂ unber.	0,690	0,2100	6,93	7,35	(***)
68	Wädenswil SO ₂ unber.	0,550	0,0700	2,31	2,45	
69	Halbmikro SO ₂ unber.	0,510	0,0300	0,99	1,05	
70	Halbmikro SO ₂ unber.	0,540	0,0600	1,98	2,10	
71	Wädenswil SO ₂ korr.	0,521	0,0412	1,36	1,44	
72	Gerhardt SO ₂ korr.	0,550	0,0700	2,31	2,45	
79	Halbmikro SO ₂ korr.	0,430	-0,0500	-1,65	-1,75	
98	Halbmikro SO ₂ unber.	0,574	0,0940	3,10	3,29	

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

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

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

4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,770	0,2850	9,32	3,20	
202	FTIR	0,520	0,0350	1,14	0,39	
203	FTIR	0,590	0,1050	3,43	1,18	
204	FTIR	0,480	-0,0050	-0,16	-0,06	
205	FTIR	0,510	0,0250	0,82	0,28	
206	FTIR	0,640	0,1550	5,07	1,74	
208	FTIR	0,230	-0,2550	-8,34	-2,86	
209	FTIR	0,530	0,0450	1,47	0,51	
210	FTIR	0,448	-0,0370	-1,21	-0,42	
211	FTIR	0,510	0,0250	0,82	0,28	
212	FTIR	0,525	0,0400	1,31	0,45	
215	FTIR	0,540	0,0550	1,80	0,62	
216	FTIR	0,640	0,1550	5,07	1,74	
217	FTIR	0,590	0,1050	3,43	1,18	
218	FTIR	0,420	-0,0650	-2,12	-0,73	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

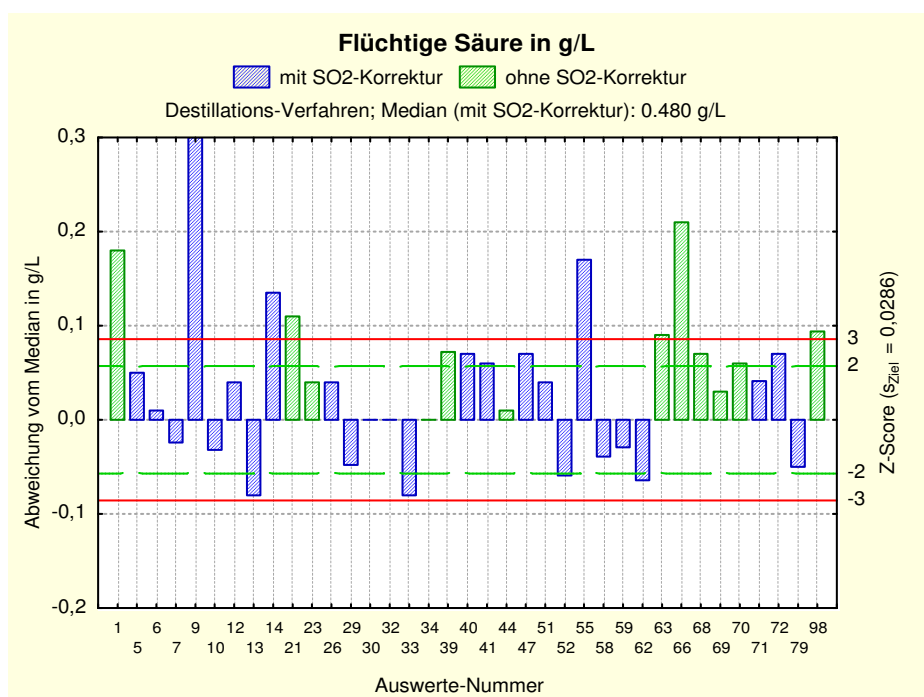
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	0,680	0,1950	6,37	2,19	
220	FTIR	0,500	0,0150	0,49	0,17	
221	FTIR	0,390	-0,0950	-3,11	-1,07	
222	FTIR	0,700	0,2150	7,03	2,41	
223	FTIR	0,580	0,0950	3,11	1,07	
225	FTIR	0,710	0,2250	7,35	2,53	
226	FTIR	0,440	-0,0450	-1,47	-0,51	
227	FTIR	0,675	0,1900	6,21	2,13	
228	FTIR	0,510	0,0250	0,82	0,28	
229	FTIR	0,790	0,3050	9,97	3,42	
230	FTIR	0,460	-0,0250	-0,82	-0,28	
231	FTIR	0,490	0,0050	0,16	0,06	
232	FTIR	0,420	-0,0650	-2,12	-0,73	
234	FTIR	0,590	0,1050	3,43	1,18	
236	FTIR	0,560	0,0750	2,45	0,84	
238	FTIR	0,740	0,2550	8,34	2,86	
239	FTIR	0,780	0,2950	9,64	3,31	
243	FTIR	0,700	0,2150	7,03	2,41	
244	FTIR	0,470	-0,0150	-0,49	-0,17	
245	FTIR	0,640	0,1550	5,07	1,74	
247	FTIR	0,660	0,1750	5,72	1,96	
248	FTIR	0,700	0,2150	7,03	2,41	
249	FTIR	0,510	0,0250	0,82	0,28	
251	FTIR	0,740	0,2550	8,34	2,86	
252	FTIR	0,300	-0,1850	-6,05	-2,08	
253	FTIR	0,620	0,1350	4,41	1,52	
254	FTIR	0,480	-0,0050	-0,16	-0,06	
256	FTIR	0,690	0,2050	6,70	2,30	
257	FTIR	0,790	0,3050	9,97	3,42	
259	FTIR	0,730	0,2450	8,01	2,75	
260	FTIR	0,610	0,1250	4,09	1,40	
261	FTIR	0,580	0,0950	3,11	1,07	
262	FTIR	0,540	0,0550	1,80	0,62	
263	FTIR	0,560	0,0750	2,45	0,84	
264	FTIR	0,540	0,0550	1,80	0,62	
265	FTIR	0,630	0,1450	4,74	1,63	
266	FTIR	0,560	0,0750	2,45	0,84	
267	FTIR	0,430	-0,0550	-1,80	-0,62	
268	FTIR	0,530	0,0450	1,47	0,51	
269	FTIR	0,600	0,1150	3,76	1,29	
270	FTIR	0,560	0,0750	2,45	0,84	
271	FTIR	0,500	0,0150	0,49	0,17	
272	FTIR	0,590	0,1050	3,43	1,18	
273	FTIR	0,680	0,1950	6,37	2,19	
274	FTIR	0,660	0,1750	5,72	1,96	
275	FTIR	0,540	0,0550	1,80	0,62	
276	FTIR	0,650	0,1650	5,39	1,85	
277	FTIR	0,620	0,1350	4,41	1,52	
278	FTIR	0,580	0,0950	3,11	1,07	
279	FTIR	0,660	0,1750	5,72	1,96	
280	FTIR	0,432	-0,0530	-1,73	-0,59	
281	FTIR	0,480	-0,0050	-0,16	-0,06	
282	FTIR	0,490	0,0050	0,16	0,06	
286	FTIR	0,610	0,1250	4,09	1,40	
320	FTIR	0,550	0,0650	2,12	0,73	
321	FTIR	0,620	0,1350	4,41	1,52	
339	FTIR	0,510	0,0250	0,82	0,28	
346	FTIR	0,920	0,4350	14,22	4,88	
351	FTIR	0,550	0,0650	2,12	0,73	
366	FTIR	0,540	0,0550	1,80	0,62	
371	FTIR	0,355	-0,1300	-4,25	-1,46	

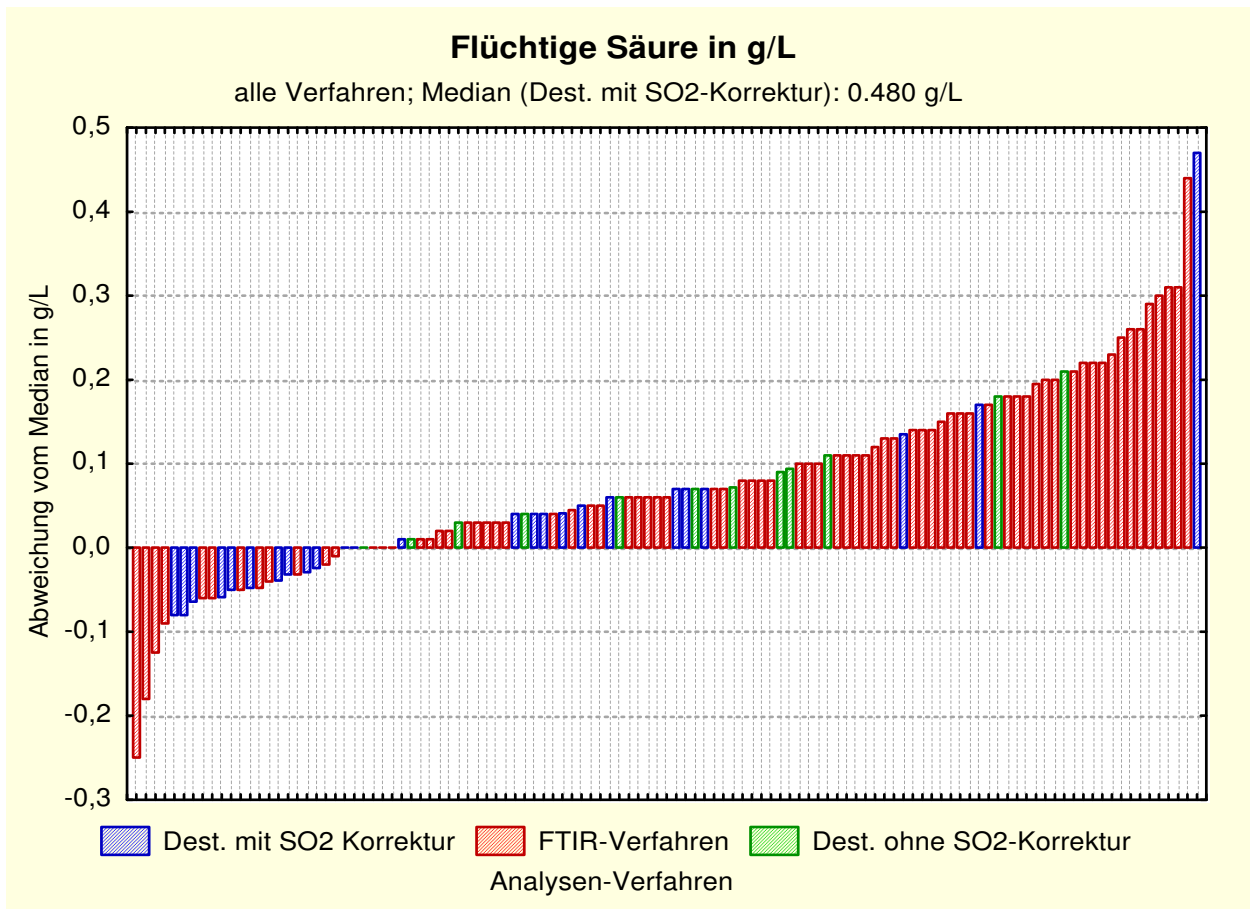
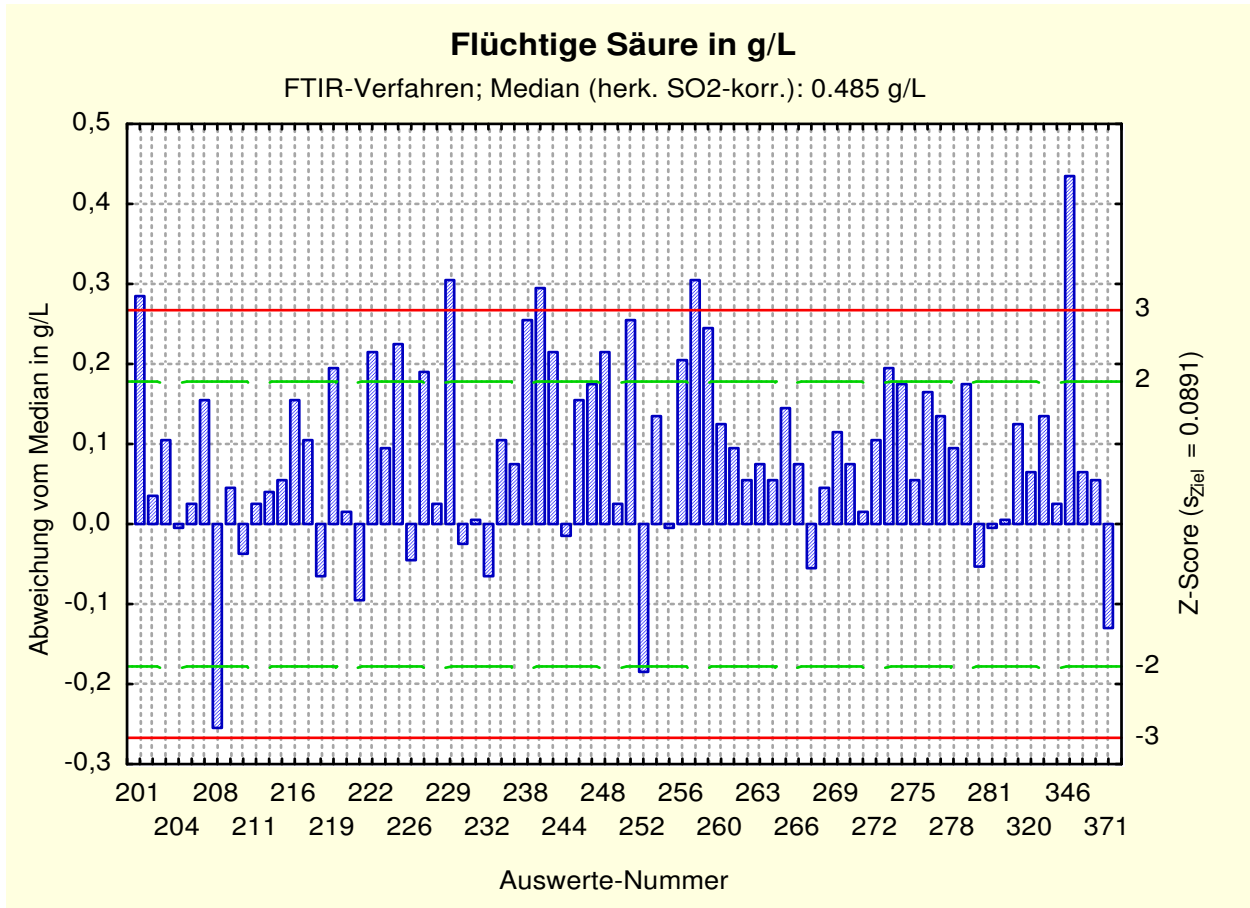
4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	23
Minimalwert	0,400	0,400
Mittelwert	0,4921	0,4853
Median	0,4850	0,4800
Maximalwert	0,650	0,615
Standardabweichung (s _L)	0,066	0,058
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,031	0,030
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)	0,089	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,16	1,91
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)	2,31	2,03
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)	0,74	0,65
Quotient (u _M /s _H)	0,44	0,40
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,47	0,42
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)	0,15	0,14

4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	10	0,5561	0,0728
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	6	0,4461	0,0272
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5500	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,4724	0,0601
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5900	
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	1	0,4000	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	10	0,5369	0,0702
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	3	0,6037	0,2385
Rentschler mod korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,4410	
Österreich SO2-korr.	Erläuterung siehe Teil 1 Abschnitt 6.18.4	1	0,5300	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	25	0,4940	0,0717
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	0,5747	0,1123





4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

4.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: HPLC + Enzymatik)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,381	-0,069	-2,40	
06	enzymat. autom.	0,439	-0,011	-0,38	
07	HPLC	0,471	0,021	0,73	
15	enzymat. autom.	0,520	0,070	2,44	
16	enzymat. autom.	0,450	0,000	0,00	
19	IC	1,120	0,670	23,34	(*)
22	HPLC	0,447	-0,003	-0,10	
24	NMR	0,390	-0,060	-2,09	
27	enzymat. autom.	0,460	0,010	0,35	
28	HPLC	0,425	-0,025	-0,87	
32	enzymat. autom.	0,550	0,100	3,48	
40	enzymat. autom.	0,460	0,010	0,35	
42	enzymat. autom.	0,450	0,000	0,00	
47	enzymat. autom.	0,450	0,000	0,00	
50	enzymat. autom.	0,480	0,030	1,05	
52	enzymat. Hand	0,385	-0,065	-2,26	
57	enzymat. autom.	0,450	0,000	0,00	
58	enzymat. autom.	0,439	-0,011	-0,38	
70	enzymat. autom.	0,510	0,060	2,09	
72	enzymat. autom.	0,420	-0,030	-1,05	
79	enzymat. Hand	0,345	-0,105	-3,66	
90	HPLC	0,305	-0,145	-5,05	(**)
95	enzymat. autom.	0,420	-0,030	-1,05	
105	enzymat. autom.	0,590	0,140	4,88	
213	FTIR	0,510	0,060	2,09	
262	FTIR	0,480	0,030	1,05	
283	FTIR	0,511	0,061	2,12	
284	FTIR	0,576	0,126	4,39	
285	FTIR	0,610	0,160	5,57	(***)

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

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

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

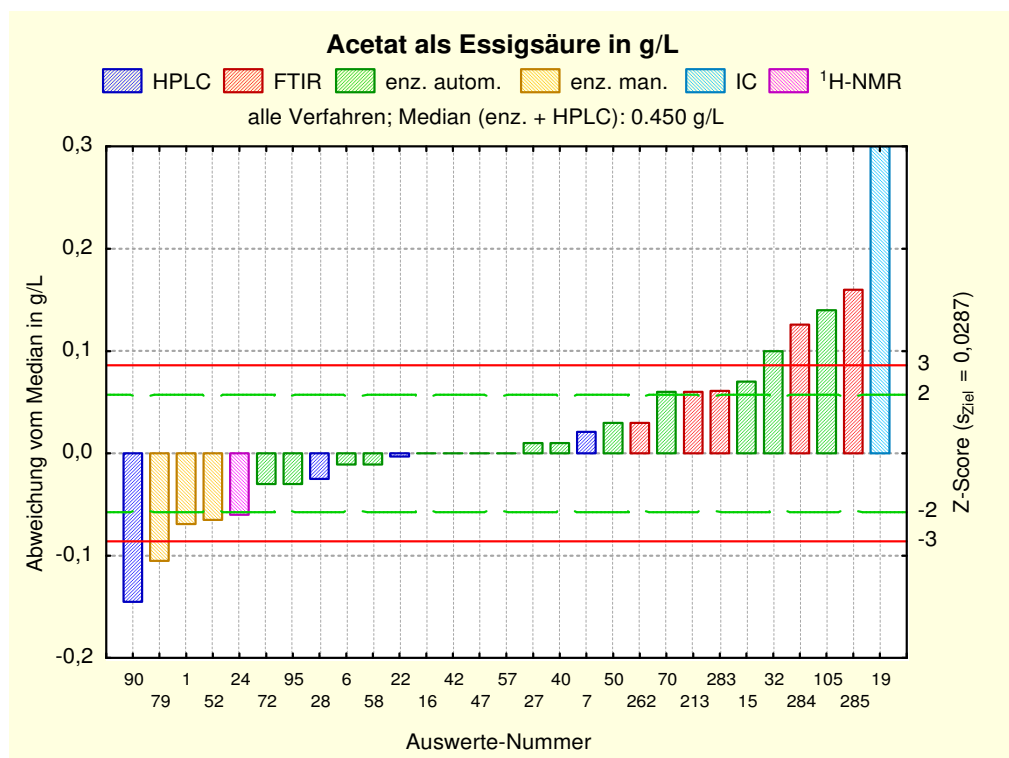
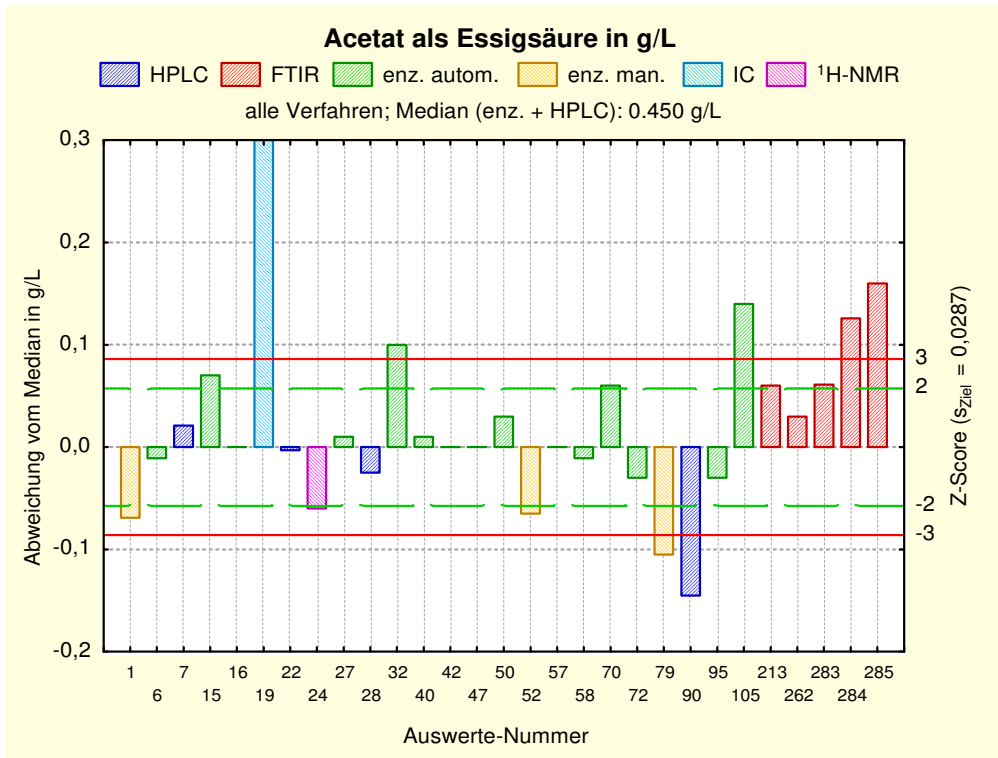
Hinweis: Alle Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz bewertet.

4.12.2 Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Verfahren	
	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	22	21
Minimalwert	0,305	0,345
Mittelwert	0,448	0,454
Median	0,450	0,450
Maximalwert	0,590	0,590
Standardabweichung (s_L)	0,063	0,056
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,013	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)		
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,19	1,94
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,47	0,42
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)		

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,4121	0,0834
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	15	0,4657	0,0403
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	3	0,3713	0,0231
	Enzymatische + HPLC-Verfahren	22	0,4481	0,0517
IC	Ionenchromatographie	1	1,1200	
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	7	0,6738	0,4528



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	n.b. (< 0,30)				
06	HPLC	0,100	-0,007	-0,88	-0,36	
07	HPLC	0,157	0,050	5,82	2,40	
08	HPLC	0,180	0,072	8,52	3,51	
19	IC	0,370	0,263	30,86	12,72	(*)
22	HPLC	0,176	0,068	8,05	3,32	
23	HPLC	0,110	0,003	0,29	0,12	
24	NMR	0,100	-0,007	-0,88	-0,36	
28	HPLC	0,080	-0,027	-3,23	-1,33	
41	HPLC	<0,2				
52	HPLC	0,030	-0,077	-9,11	-3,76	
72	enzymat. autom.	0,160	0,053	6,17	2,54	
90	HPLC	0,105	-0,003	-0,29	-0,12	
100	HPLC	0,100	-0,007	-0,88	-0,36	

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

4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	n.b. (< 0,24)				
05	enz.(L-), autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,48	
06	enz.(L-), autom.	0,118	0,008	0,92	0,39	
09	enz.(L-), autom.	0,120	0,010	1,15	0,48	
10	enz.(L-) Hand	0,105	-0,005	-0,58	-0,24	
12	enz.(L-), autom.	0,108	-0,003	-0,29	-0,12	
16	enz.(L-), autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,48	
22	enz.(L-), autom.	0,120	0,010	1,15	0,48	
27	enz.(L-), autom.	0,120	0,010	1,15	0,48	
32	enz.(L-), autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,48	
40	enz.(L-), autom.	0,180	0,070	8,07	3,38	
42	enz.(L-), autom.	0,120	0,010	1,15	0,48	
47	enz.(L-), autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
50	enz.(L-), autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
57	enz.(L-), autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,48	
58	enz.(L-), autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
59	enz.(L-) Hand	0,107	-0,003	-0,35	-0,14	
66	enz.(L-) Hand	0,170	0,060	6,92	2,90	
70	enz.(L-), autom.	0,080	-0,030	-3,46	-1,45	
72	enz.(L-), autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
79	enz.(L-) Hand	0,106	-0,004	-0,46	-0,19	
90	enz.(L-), autom.	0,105	-0,005	-0,58	-0,24	
95	enz.(L-), autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	

4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,090	-0,018			
202	FTIR	0,360	0,253			(*)
203	FTIR	-0,250	-0,357			(*)
204	FTIR	0,490	0,383			(*)
205	FTIR	<= 0				
206	FTIR	0,020	-0,087			
208	FTIR	<0,3				
209	FTIR	<0,2				
210	FTIR	0,430	0,323			(*)
211	FTIR	0,300	0,193			(*)
213	FTIR	0,280	0,173			(*)

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
215	FTIR	0,900	0,792			(*)
216	FTIR	0,170	0,063			
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	1,620	1,513			(*)
219	FTIR	0,240	0,133			(*)
220	FTIR	<= 0				
221	FTIR	-0,420	-0,527			(*)
222	FTIR	0,290	0,183			(*)
223	FTIR	0,290	0,183			(*)
224	FTIR	0,160	0,053			
225	FTIR	<= 0				
226	FTIR	<= 0				
227	FTIR	0,700	0,592			(*)
228	FTIR	0,010	-0,098			
229	FTIR	0,060	-0,048			
230	FTIR	0,230	0,123			(*)
231	FTIR	0,550	0,443			(*)
232	FTIR	0,100	-0,007			
234	FTIR	0,010	-0,098			
236	FTIR	0,330	0,223			(*)
238	FTIR	0,040	-0,068			
239	FTIR	0,100	-0,007			
243	FTIR	-0,400	-0,508			(*)
244	FTIR	0,070	-0,037			
245	FTIR	0,110	0,003			
247	FTIR	0,020	-0,087			
248	FTIR	0,200	0,093			
249	FTIR	0,450	0,343			(*)
251	FTIR	0,400	0,293			(*)
252	FTIR	-0,380	-0,487			(*)
254	FTIR	<= 0				
256	FTIR	<= 0				
257	FTIR	0,100	-0,007			
258	FTIR	-0,010	-0,117			(*)
259	FTIR	0,130	0,023			
260	FTIR	0,050	-0,057			
261	FTIR	<= 0				
262	FTIR	-0,850	-0,958			(*)
263	FTIR	<= 0				
264	FTIR	0,100	-0,007			
266	FTIR	-0,500	-0,608			(*)
267	FTIR	-0,270	-0,378			(*)
268	FTIR	0,010	-0,098			
269	FTIR	0,200	0,093			
270	FTIR	0,270	0,163			(*)
271	FTIR	0,300	0,193			(*)
272	FTIR	0,170	0,063			
273	FTIR	<= 0				
274	FTIR	-0,310	-0,417			(*)
275	FTIR	0,400	0,293			(*)
276	FTIR	<= 0				
277	FTIR	0,600	0,492			(*)
278	FTIR	0,730	0,622			(*)
279	FTIR	0,200	0,093			
280	FTIR	0,090	-0,018			
281	FTIR	0,140	0,033			
282	FTIR	<= 0				
283	FTIR	0,080	-0,027			
284	FTIR	<= 0				
285	FTIR	0,050	-0,057			
286	FTIR	<= 0				
320	FTIR	<= 0				
321	FTIR	0,090	-0,018			

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
339	FTIR	<= 0				
346	FTIR	0,100	-0,007			
351	FTIR	<= 0				
366	FTIR	<= 0				

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

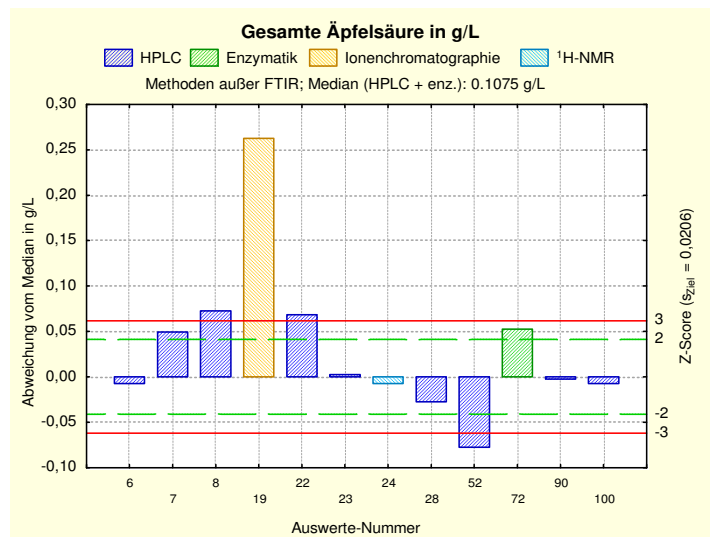
Keine Berechnung von Z-Score da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereichs

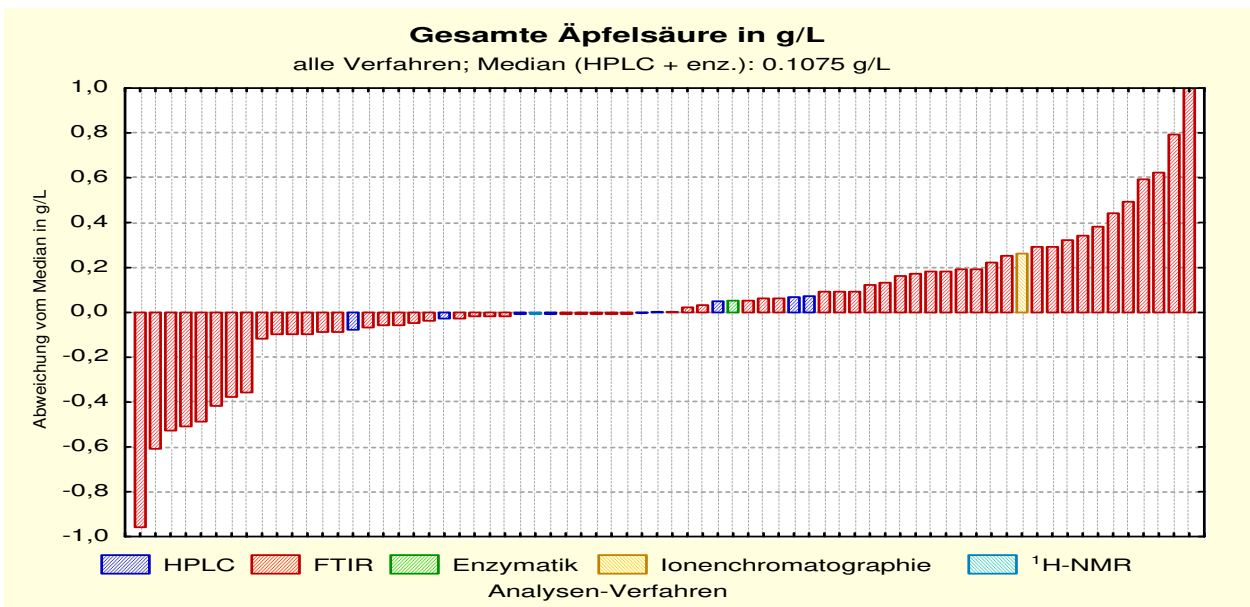
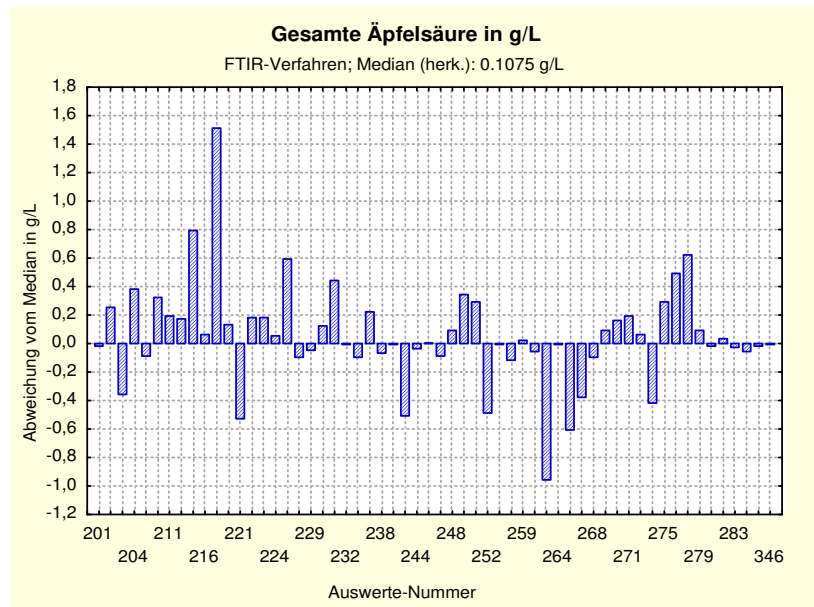
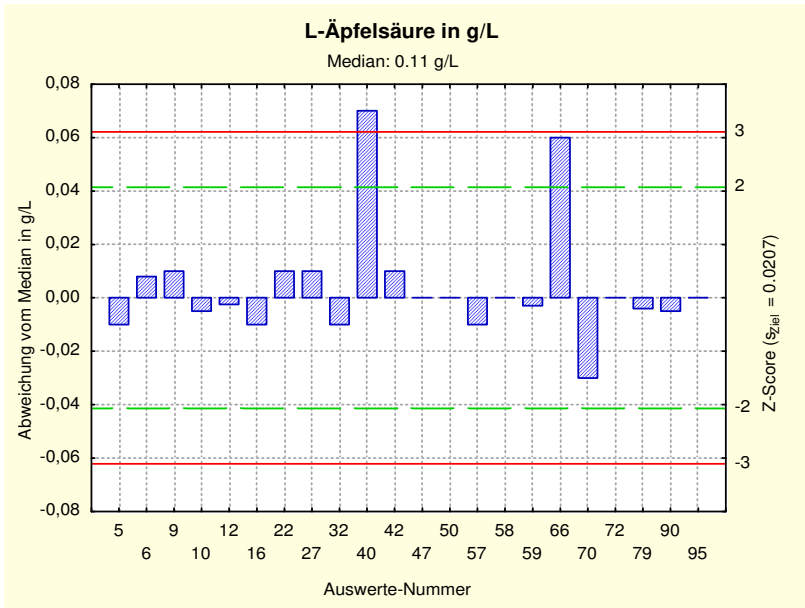
4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	10	22
Minimalwert	0,03	0,08
Mittelwert	0,120	0,114
Median	0,108	0,110
Maximalwert	0,18	0,18
Standardabweichung (s _L)	0,048	0,022
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,015	0,005
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,009	0,009
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,021	0,021
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	5,61	2,51
Quotient (s _L /s _{exp})	2,32	1,05
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,22	
Quotient (u _M /s _H)	1,78	0,54
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,73	0,22
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,07	

4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	0,1147	0,0498
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	0,1600	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	n.b. (< 0,30)		
IC	Ionenchromatographie	1	0,3700	
	herkömml. Verfahren Gesamte Äpfelsäure o. IC	10	0,1213	0,0507
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	58	0,1562	0,2404
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,1000	
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	18	0,1100	0,0101
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	0,1220	0,0362
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	22	0,1102	0,0100





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

4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,60	0,271	1,72	
05	enzymat. autom.	3,17	-0,160	-1,02	
06	enzymat. autom.	3,33	0,000	0,00	
07	HPLC	3,33	0,000	0,00	
09	enzymat. autom.	3,20	-0,130	-0,83	
10	enzymat. Hand	3,41	0,079	0,50	
12	enzymat. autom.	2,71	-0,620	-3,95	
19	IC	3,56	0,230	1,46	
22	enzymat. autom.	3,15	-0,178	-1,13	
23	HPLC	3,09	-0,240	-1,53	
24	NMR	3,13	-0,200	-1,27	
28	HPLC	3,52	0,195	1,24	
41	HPLC	3,06	-0,270	-1,72	
52	HPLC	3,65	0,320	2,04	
66	enzymat. Hand	3,40	0,070	0,45	
72	enzymat. autom.	1,24	-2,090	-13,30	(*)
90	HPLC	3,33	0,000	0,00	
95	enzymat. autom.	3,33	0,000	0,00	
100	HPLC	3,30	-0,030	-0,19	

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

4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	3,49	0,270	1,76	1,67	
05	enz.(L-) autom.	3,10	-0,124	-0,81	-0,77	
06	enz.(L-) autom.	3,23	0,005	0,03	0,03	
09	enz.(L-) autom.	3,11	-0,115	-0,75	-0,71	
10	enz.(L-) Hand	3,33	0,101	0,66	0,62	
12	enz.(L-) autom.	2,63	-0,598	-3,91	-3,71	
16	enz.(L-) autom.	3,10	-0,124	-0,81	-0,77	
22	enz.(L-) autom.	3,09	-0,135	-0,88	-0,83	
27	enz.(L-) autom.	3,31	0,086	0,56	0,53	
32	enz.(L-) autom.	3,20	-0,024	-0,16	-0,15	
40	enz.(L-) autom.	2,76	-0,465	-3,04	-2,88	
47	enz.(L-) autom.	2,85	-0,374	-2,45	-2,32	
50	enz.(L-) autom.	3,28	0,055	0,36	0,34	
58	enz.(L-) autom.	3,38	0,152	1,00	0,94	
59	enz.(L-) Hand	3,28	0,059	0,39	0,37	
66	enz.(L-) Hand	3,31	0,083	0,54	0,51	
70	enz.(L-) autom.	3,22	-0,004	-0,03	-0,03	
72	enz.(L-) autom.	1,14	-2,085	-13,63	-12,91	(*)
79	enz.(L-) Hand	3,06	-0,164	-1,08	-1,02	
90	enz.(L-) autom.	3,39	0,166	1,08	1,03	
95	enz.(L-) autom.	3,24	0,016	0,10	0,10	

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

4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,43	
202	FTIR	3,09	-0,240	-1,53	-1,15	
203	FTIR	2,73	-0,600	-3,82	-2,87	
204	FTIR	3,05	-0,280	-1,78	-1,34	
205	FTIR	2,84	-0,490	-3,12	-2,34	
206	FTIR	3,41	0,080	0,51	0,38	
208	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
209	FTIR	2,72	-0,610	-3,88	-2,92	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
210	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,43	
211	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
213	FTIR	2,55	-0,780	-4,96	-3,73	
215	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,14	
216	FTIR	2,32	-1,010	-6,43	-4,83	
217	FTIR	2,61	-0,720	-4,58	-3,44	
218	FTIR	3,47	0,140	0,89	0,67	
219	FTIR	3,34	0,010	0,06	0,05	
220	FTIR	4,60	1,270	8,08	6,08	(**)
221	FTIR	2,85	-0,480	-3,05	-2,30	
222	FTIR	2,94	-0,390	-2,48	-1,87	
223	FTIR	2,83	-0,500	-3,18	-2,39	
224	FTIR	2,78	-0,550	-3,50	-2,63	
225	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
226	FTIR	2,74	-0,590	-3,75	-2,82	
227	FTIR	3,16	-0,170	-1,08	-0,81	
228	FTIR	2,89	-0,440	-2,80	-2,11	
229	FTIR	2,78	-0,550	-3,50	-2,63	
230	FTIR	3,48	0,150	0,95	0,72	
231	FTIR	2,76	-0,570	-3,63	-2,73	
232	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,14	
234	FTIR	2,86	-0,470	-2,99	-2,25	
236	FTIR	3,48	0,150	0,95	0,72	
238	FTIR	2,85	-0,480	-3,05	-2,30	
239	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-3,01	
243	FTIR	2,40	-0,930	-5,92	-4,45	
244	FTIR	3,64	0,310	1,97	1,48	
245	FTIR	2,69	-0,640	-4,07	-3,06	
247	FTIR	3,19	-0,140	-0,89	-0,67	
248	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
249	FTIR	3,23	-0,100	-0,64	-0,48	
251	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
252	FTIR	2,64	-0,690	-4,39	-3,30	
254	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
256	FTIR	3,10	-0,230	-1,46	-1,10	
257	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
258	FTIR	2,73	-0,600	-3,82	-2,87	
259	FTIR	3,01	-0,320	-2,04	-1,53	
260	FTIR	2,60	-0,730	-4,64	-3,49	
261	FTIR	2,28	-1,050	-6,68	-5,02	(**)
262	FTIR	2,29	-1,040	-6,62	-4,98	
263	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
264	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-3,01	
266	FTIR	3,10	-0,230	-1,46	-1,10	
267	FTIR	2,81	-0,520	-3,31	-2,49	
268	FTIR	2,54	-0,790	-5,03	-3,78	
269	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
270	FTIR	2,43	-0,900	-5,73	-4,31	
271	FTIR	3,25	-0,080	-0,51	-0,38	
272	FTIR	3,39	0,060	0,38	0,29	
273	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,58	
274	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,43	
275	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-3,01	
276	FTIR	3,06	-0,270	-1,72	-1,29	
277	FTIR	3,40	0,070	0,45	0,33	
278	FTIR	1,80	-1,530	-9,73	-7,32	(**)
279	FTIR	2,50	-0,830	-5,28	-3,97	
281	FTIR	3,09	-0,240	-1,53	-1,15	
282	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
283	FTIR	2,79	-0,540	-3,44	-2,58	
285	FTIR	2,61	-0,720	-4,58	-3,44	
286	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	
320	FTIR	4,50	1,170	7,44	5,60	(**)
321	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,43	
339	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-2,06	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

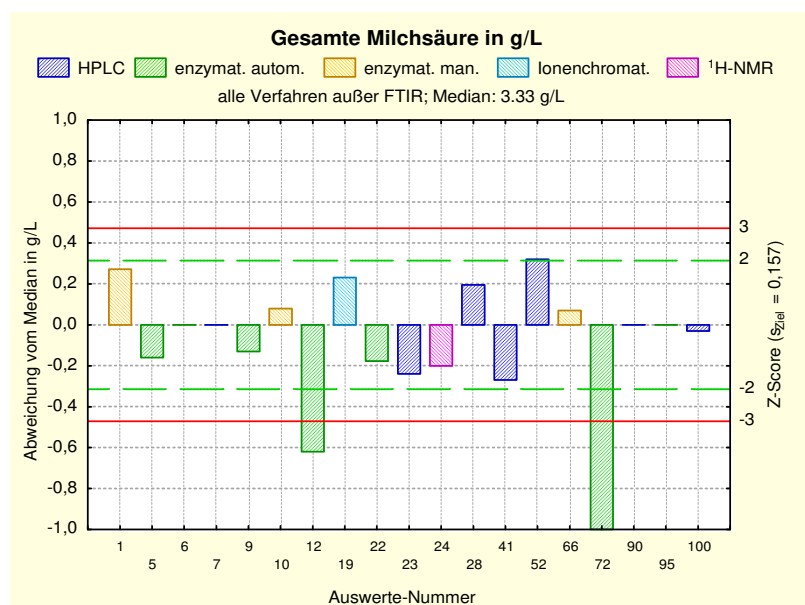
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
346	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-3,01	
351	FTIR	3,20	-0,130	-0,83	-0,62	
366	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-3,01	

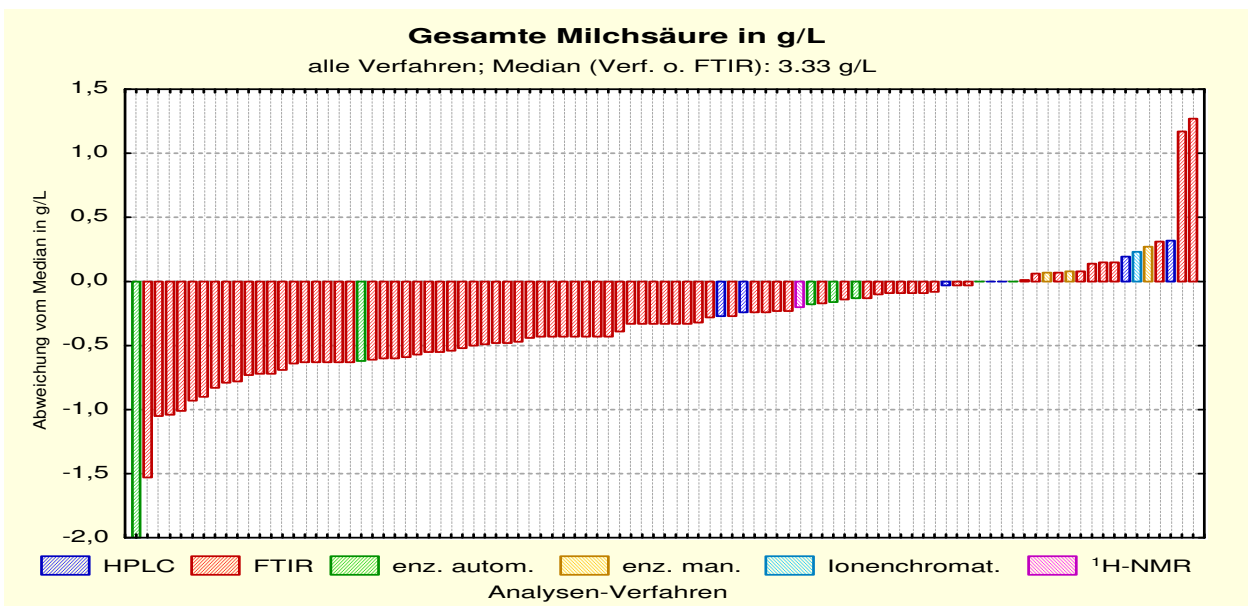
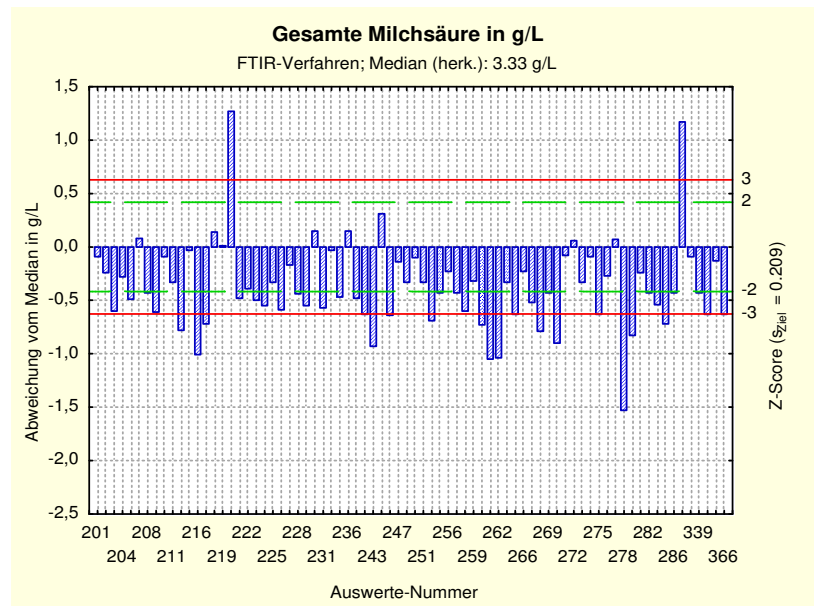
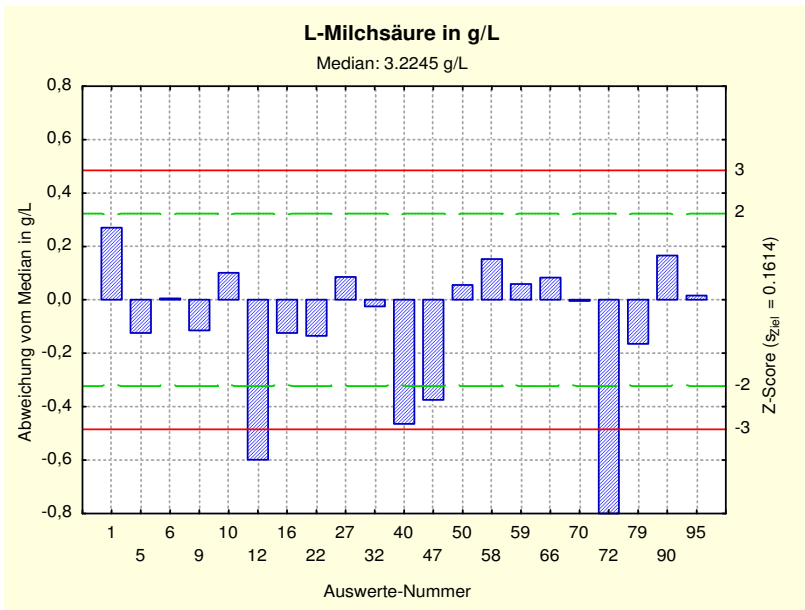
4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Milchsäure alle Daten	L- Milchsäure alle Daten
Gültige Werte	18	20
Minimalwert	2,71	2,63
Mittelwert	3,293	3,168
Median	3,330	3,224
Maximalwert	3,65	3,49
Standardabweichung (s _L)	0,228	0,217
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,054	0,048
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,157	0,153
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})		0,161
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,209	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,45	1,42
Quotient (s _L /s _{exp})		1,34
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,09	
Quotient (u _M /s _H)	0,34	0,32
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)		0,30
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,26	

4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	3,326	0,241
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	7	3,070	0,336
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	3,465	0,119
IC	Ionenchromatographie	1	3,560	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	3,130	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	19	3,285	0,241
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,937	0,333
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	16	3,110	0,248
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	3,289	0,162
	alle Verfahren L-Milchsäure	21	3,165	0,223





4.15 Reduktone [mg/L]

4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
06	Acetaldehyd/potent.	3,0	-2,00	-3,19	
13	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
14	Glyoxal/potentiometr.	6,8	1,80	2,87	
15	Glyoxal/potentiometr.	5,0	0,00	0,00	
16	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
18	Glyoxal/Stärke	<=0			
19	Glyoxal/potentiometr.	3,6	-1,40	-2,23	
22	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
24	Glyoxal/Stärke	12,0	7,00	11,15	(*)
25	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
27	Glyoxal/potentiometr.	6,9	1,88	2,99	
28	Propionaldehyd/Stärke	6,0	1,00	1,59	
30	Glyoxal/Stärke	13,0	8,00	12,74	(*)
32	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
33	Glyoxal/potentiometr.	<=0			
39	Glyoxal/potentiometr.	4,0	-1,00	-1,59	
41	Glyoxal/potentiometr.	<3			
44	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
46	Glyoxal/potentiometr.	6,9	1,93	3,07	
47	Propionaldehyd/Stärke	<3			
48	Glyoxal/Stärke	2,0	-3,00	-4,78	(*)
51	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
52	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
58	Glyoxal/MTT	<=0			
59	Glyoxal/Stärke	8,0	3,00	4,78	
62	Glyoxal/potentiometr.	5,0	0,00	0,00	
63	Glyoxal/Stärke	8,0	3,00	4,78	
64	Glyoxal/potentiometr.	10,0	5,00	7,96	(*)
66	Glyoxal/Stärke	<=0			
67	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
68	Glyoxal/potentiometr.	4,0	-1,00	-1,59	
69	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
71	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
72	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
75	k. A.	9,0	4,00	6,37	(*)
77	Glyoxal/potentiometr.	8,0	3,00	4,78	
78	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
83	Glyoxal/Stärke	<=0			
109	Glyoxal/potentiometr.	<=0			

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

Anmerkung:

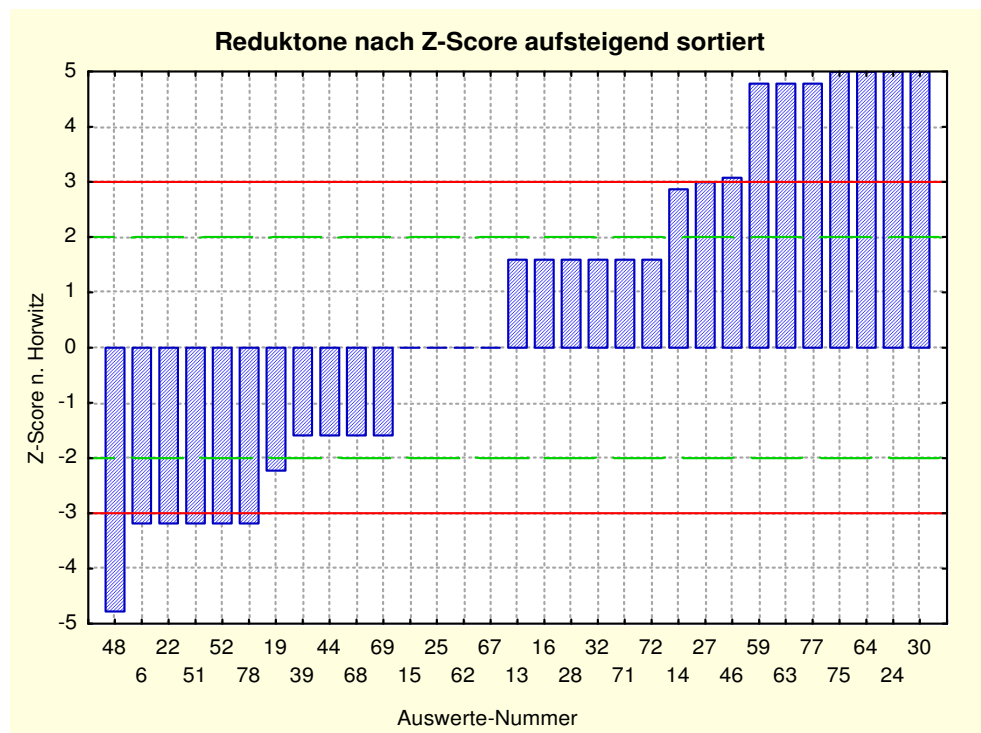
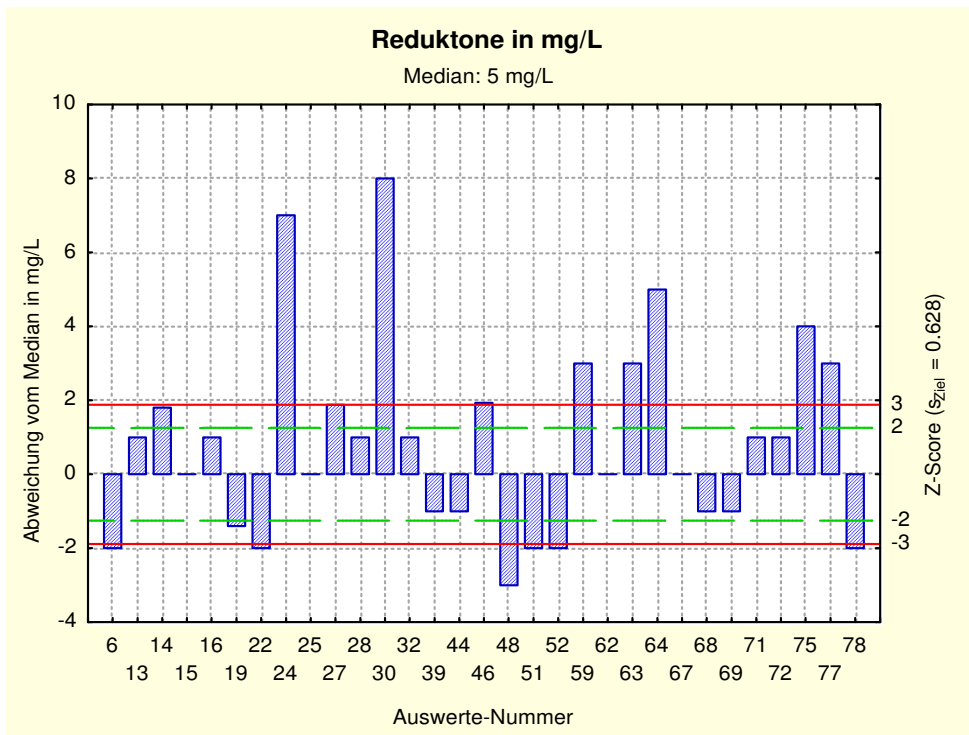
Die Bestimmung der Reduktone war freiwillig. Da der Quotient s_L/s_H erheblich über 2,0 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Beschreibung der Laborleistung dar. Sie sind daher in grauer Schriftfarbe dargestellt.

4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	27
Minimalwert	3,0
Mittelwert	5,34
Median	5,00
Maximalwert	9,0
Standardabweichung (s_L)	1,779
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,342
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,628
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,83
Quotient (s_L/s_{exp})	
Quotient (u_M/s_H)	0,55
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	

4.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	3,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	1	6,00	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	12	6,09	3,32
Glyoxal/potent.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	16	5,35	2,03
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	<= 0	
k. A.	keine Angabe	1	9,00	
	alle Verfahren	32	5,61	2,42



4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

4.16.1 Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations-, photometrischen und FTIR-Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	27,0	3,35	1,43	
06	LwK 6.2	18,1	-5,55	-2,36	
07	LwK 6.2	24,0	0,35	0,15	
10	LwK 6.2	21,5	-2,15	-0,91	
12	LwK 6.2	24,3	0,67	0,29	
29	LwK 6.2	23,6	-0,05	-0,02	
50	LwK 6.3	23,0	-0,65	-0,28	
55	LwK 6.3	21,0	-2,65	-1,13	
57	LwK 6.4	21,0	-2,65	-1,13	
58	LwK 6.4	20,1	-3,55	-1,51	
59	LwK 6.4	27,0	3,35	1,43	
70	LwK 6.4	25,0	1,35	0,57	
91	LwK 6.2 m	29,8	6,11	2,60	
95	LwK 6.2	23,7	0,05	0,02	
106	LwK 6.2	21,5	-2,15	-0,91	
107	LwK 6.3	23,9	0,25	0,11	
206	LwK 6.5	17,0	-6,65	-2,83	
207	LwK 6.5	25,0	1,35	0,57	
210	LwK 6.5	24,1	0,45	0,19	
219	LwK 6.5	20,0	-3,65	-1,55	
226	LwK 6.5	16,0	-7,65	-3,25	
239	LwK 6.5	21,0	-2,65	-1,13	
253	LwK 6.5	29,0	5,35	2,28	
254	LwK 6.5	26,0	2,35	1,00	
260	LwK 6.5	30,3	6,65	2,83	
264	LwK 6.5	23,0	-0,65	-0,28	
265	LwK 6.5	22,0	-1,65	-0,70	
270	LwK 6.5	26,0	2,35	1,00	
273	LwK 6.5	32,0	8,35	3,55	
320	LwK 6.5	22,0	-1,65	-0,70	
339	LwK 6.5	21,0	-2,65	-1,13	
351	LwK 6.5	29,0	5,35	2,28	
366	LwK 6.5	39,0	15,35	6,53	(*)

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

4.16.2 Laborergebnisse jodometrisch einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	1,00	0,39	
13	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,0	-3,00	-1,18	
14	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-1,00	-0,39	
15	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	3,00	1,18	
16	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-5,00	-1,96	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,0	-3,00	-1,18	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	22,0	-4,00	-1,57	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	2,00	0,79	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	4,00	1,57	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	10,00	3,93	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	22,0	-4,00	-1,57	
26	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,1	1,09	0,43	
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	2,00	0,79	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	5,00	1,96	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-5,00	-1,96	
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
33	LwK 6.1 (incl.Red.)	23,0	-3,00	-1,18	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	2,00	0,79	

Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
38	LwK 6.1(incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
39	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	24,7	-1,30	-0,51	
44	LwK 6.1(incl.Red.)	23,0	-3,00	-1,18	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	24,8	-1,21	-0,47	
47	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	1,00	0,39	
48	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	2,00	0,79	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	1,00	0,39	
52	LwK 6.1(incl.Red.)	20,0	-6,00	-2,36	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
62	LwK 6.1(incl.Red.)	17,0	-9,00	-3,53	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	4,00	1,57	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-1,00	-0,39	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	5,00	1,96	
67	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	2,00	0,79	
68	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	1,00	0,39	
69	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	5,00	1,96	
71	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	8,00	3,14	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	3,00	1,18	
73	LwK 6.1(incl.Red.)	24,0	-2,00	-0,79	
75	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	4,00	1,57	
77	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
79	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
80	LwK 6.1(incl.Red.)	26	0,00	0,00	
83	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	0,00	0,00	
98	LwK 6.1(incl.Red.)	22,0	-4,00	-1,57	
100	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	5,00	1,96	
109	Redox incl.	26,0	0,00	0,00	

4.16.3 Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
13	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-4,00	-1,88	-1,57	
14	LwK 6.1(excl.Red.)	18,2	-2,80	-1,32	-1,10	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,00	1,41	1,18	
16	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-6,00	-2,82	-2,36	
19	LwK 6.1(excl.Red.)	19,4	-1,60	-0,75	-0,63	
22	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	4,00	1,88	1,57	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,00	1,41	1,18	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-4,00	-1,88	-1,57	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	20,2	-0,79	-0,37	-0,31	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,00	0,47	0,39	
30	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-3,00	-1,41	-1,18	
32	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-1,00	-0,47	-0,39	
33	LwK 6.1(incl.Red.)	23,0	2,00	0,94	0,79	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,00	0,47	0,39	
44	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-2,00	-0,94	-0,79	
46	LwK 6.1(excl.Red.)	17,9	-3,14	-1,48	-1,23	
48	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	5,00	2,35	1,96	
51	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,00	1,41	1,18	
52	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-4,00	-1,88	-1,57	
62	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	-9,00	-4,24	-3,53	
63	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,00	0,47	0,39	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-6,00	-2,82	-2,36	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,00	0,94	0,79	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,00	0,94	0,79	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	6,00	2,82	2,36	
71	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	7,00	3,29	2,75	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,00	0,94	0,79	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,00	0,00	0,00	

Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
77	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-3,00	-1,41	-1,18	
78	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,00	0,94	0,79	

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

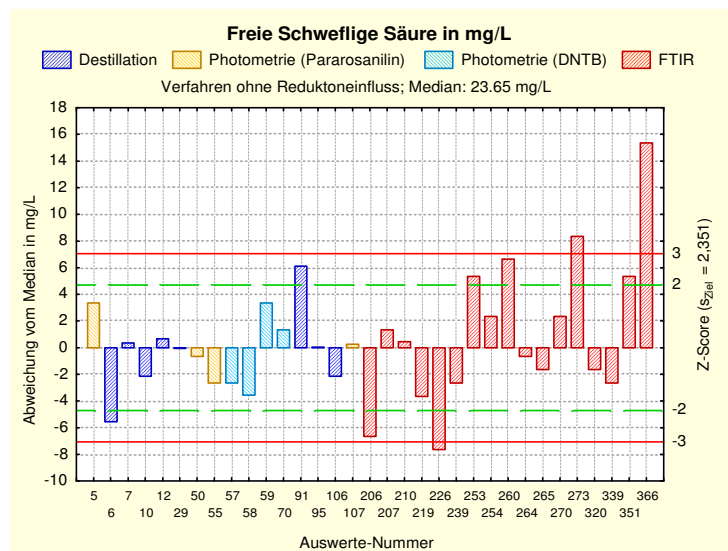
4.16.4 Deskriptive Ergebnisse

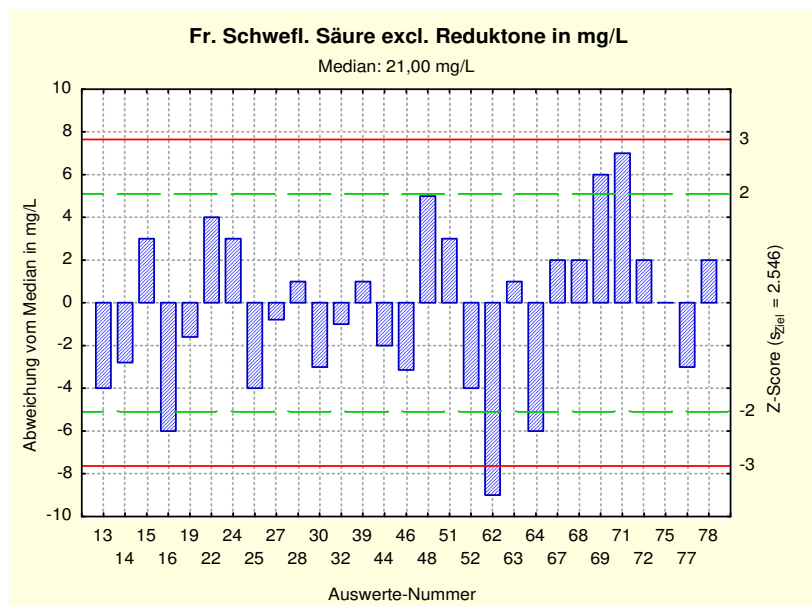
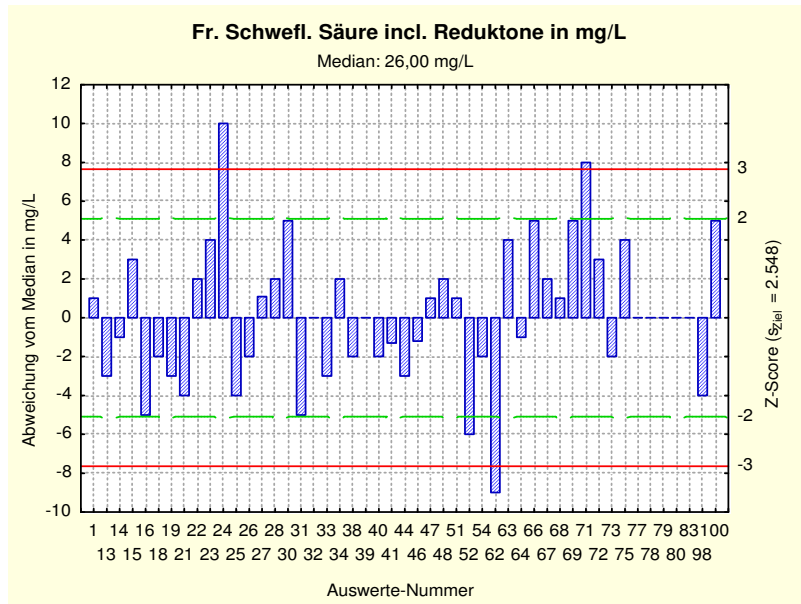
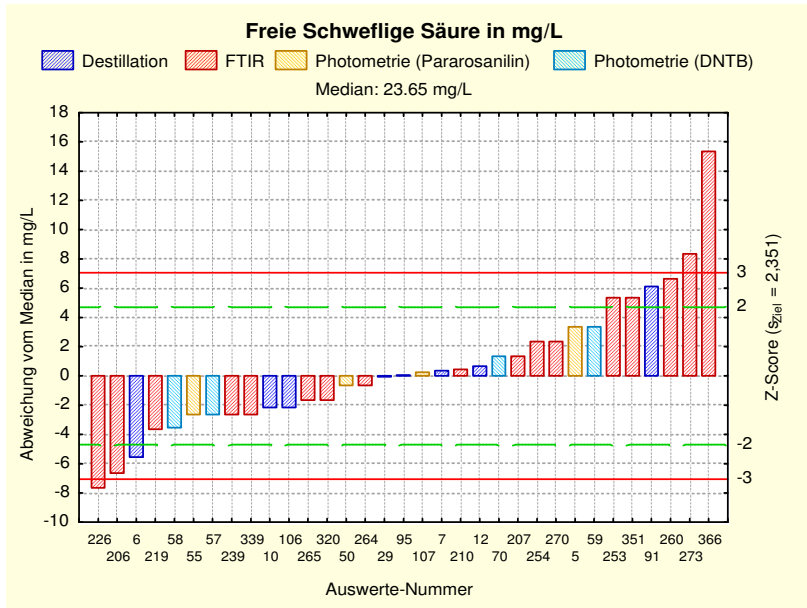
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	16	32	49	29
Minimalwert	18,1	16,0	17,0	12,0
Mittelwert	23,41	23,68	26,11	20,71
Median	23,65	23,65	26,00	21,00
Maximalwert	29,8	32,0	36,0	28,0
Standardabweichung (s _L)	2,926	3,808	3,636	3,847
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,731	0,673	0,519	0,714
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,351	2,351	2,548	2,125
- n. Horwitz incl. Reduktone ^{*)} (s _H incl. Red.)				2,548
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,24	1,62	1,43	1,81
Quotient (s _L /s _{exp})				1,51
Quotient (u _M /s _H)	0,31	0,29	0,20	0,34
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)				0,28

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

4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl.Red.)	- ohne Abzug der Reduktone	49	26,06	3,52
(excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	29	20,76	4,05
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	26,00	
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	22,87	1,59
LwK 6.2 m	- modifiziert: 10 ml Probe, 5 ml 15 %ige Phosphorsäure	1	29,76	
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	4	23,64	2,67
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	4	23,27	3,71
	Destillations- und photometrische Verfahren	16	23,33	2,89
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	17	24,44	5,43
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	33	23,88	4,14





4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

4.17.1 Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	64,0	-13,00	-2,03	-2,43	
04	LwK 7.3	107,2	30,20	4,71	5,64	(**)
05	LwK 7.7	96,0	19,00	2,97	3,55	
06	LwK 7.3	70,3	-6,70	-1,05	-1,25	
07	LwK 7.3	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
09	LwK 7.3	72,9	-4,10	-0,64	-0,77	
10	LwK 7.3	80,9	3,90	0,61	0,73	
12	LwK 7.3	77,9	0,92	0,14	0,17	
13	LwK 7.3	70,0	-7,00	-1,09	-1,31	
14	LwK 7.4.2	77,0	0,00	0,00	0,00	
15	LwK 7.4.2	83,0	6,00	0,94	1,12	
16	LwK 7.4.1	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,9	-0,10	-0,02	-0,02	
21	LwK 7.4.2	72,0	-5,00	-0,78	-0,93	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	6,00	0,94	1,12	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	13,00	2,03	2,43	
24	LwK 7.4.2m	86,0	9,00	1,40	1,68	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	69,0	-8,00	-1,25	-1,49	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	1,00	0,16	0,19	
27	LwK 7.4.2	80,0	3,00	0,47	0,56	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
29	LwK 7.3	91,1	14,10	2,20	2,63	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	3,00	0,47	0,56	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-3,00	-0,47	-0,56	
32	LwK 7.4.1	82,0	5,00	0,78	0,93	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	4,00	0,62	0,75	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	3,00	0,47	0,56	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	9,00	1,40	1,68	
39	LwK 7.4.1	77,0	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 7.7	83,0	6,00	0,94	1,12	
44	LwK 7.4.2	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,8	7,84	1,22	1,46	
47	LwK 7.4.2	77,0	0,00	0,00	0,00	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	6,00	0,94	1,12	
50	LwK 7.7	81,0	4,00	0,62	0,75	
51	LwK 7.4.2	75,0	-2,00	-0,31	-0,37	
52	LwK 7.4.2	78,0	1,00	0,16	0,19	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
55	LwK 7.4.1	79,0	2,00	0,31	0,37	
57	LwK 7.7	67,0	-10,00	-1,56	-1,87	
58	LwK 7.7	75,4	-1,60	-0,25	-0,30	
59	LwK 7.4.2	79,0	2,00	0,31	0,37	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	71,0	-6,00	-0,94	-1,12	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
66	LwK 7.4.2	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	80,0	3,00	0,47	0,56	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	79,0	2,00	0,31	0,37	
69	LwK 7.4.2	80,0	3,00	0,47	0,56	
70	LwK 7.4.2	84,0	7,00	1,09	1,31	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	89,0	12,00	1,87	2,24	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	3,00	0,47	0,56	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	5,00	0,78	0,93	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-3,00	-0,47	-0,56	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,2	3,20	0,50	0,60	
79	LwK 7.4.1	71,5	-5,50	-0,86	-1,03	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78	1,00	0,16	0,19	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	70,0	-7,00	-1,09	-1,31	
91	LwK 7.3 m	95,0	18,04	2,82	3,37	

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

Fortsetzung Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
92	LwK 7.4.2	77,0	0,00	0,00	0,00	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,3	6,30	0,98	1,18	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	67,0	-10,00	-1,56	-1,87	
95	LwK 7.3	69,0	-8,00	-1,25	-1,49	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-3,00	-0,47	-0,56	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,9	6,86	1,07	1,28	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	75,0	-2,00	-0,31	-0,37	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	3,00	0,47	0,56	
100	LwK 7.4.2	89,0	12,00	1,87	2,24	
101	LwK 7.4.2	74,0	-3,00	-0,47	-0,56	
102	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,3	1,30	0,20	0,24	
105	LwK 7.7	80,0	3,00	0,47	0,56	
106	LwK 7.3	77,1	0,10	0,02	0,02	
107	LwK 7.6	89,3	12,30	1,92	2,30	
109	Redox incl.	78,0	1,00	0,16	0,19	
206	LwK 7.8	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
207	LwK 7.8	79,0	2,00	0,31	0,37	
208	LwK 7.8	55,0	-22,00	-3,43	-4,11	
209	LwK 7.8	78,5	1,52	0,24	0,28	
210	LwK 7.8	87,8	10,80	1,69	2,02	
219	LwK 7.8	59,0	-18,00	-2,81	-3,36	
226	LwK 7.8	89,0	12,00	1,87	2,24	
239	LwK 7.8	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
253	LwK 7.8	65,0	-12,00	-1,87	-2,24	
254	LwK 7.8	75,0	-2,00	-0,31	-0,37	
260	LwK 7.8	72,0	-5,00	-0,78	-0,93	
264	LwK 7.8	73,0	-4,00	-0,62	-0,75	
265	LwK 7.8	71,0	-6,00	-0,94	-1,12	
270	LwK 7.8	96,0	19,00	2,97	3,55	
273	LwK 7.8	55,0	-22,00	-3,43	-4,11	
320	LwK 7.8	76,0	-1,00	-0,16	-0,19	
339	LwK 7.8	75,0	-2,00	-0,31	-0,37	
351	LwK 7.8	90,0	13,00	2,03	2,43	
366	LwK 7.8	91,0	14,00	2,19	2,61	

Mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie erhaltene Werte wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Ergebnisse herkömmlicher Analysen-Methoden (Vergleichsstandardabweichung OIV-MA-323-04A). (Beachte auch Anmerkung in Teil 1, Abschnitt 5.1, Seite 43)

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
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-2,30	-0,35	-0,43	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,9	-1,40	-0,22	-0,26	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	7,70	1,18	1,44	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	11,70	1,80	2,18	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	69,0	-9,30	-1,43	-1,74	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	-0,30	-0,05	-0,06	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-2,30	-0,35	-0,43	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	1,70	0,26	0,32	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-4,30	-0,66	-0,80	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	2,70	0,42	0,50	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	1,70	0,26	0,32	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	7,70	1,18	1,44	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,8	6,54	1,01	1,22	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	4,70	0,72	0,88	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	73,0	-5,30	-0,82	-0,99	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	71,0	-7,30	-1,12	-1,36	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,0	-2,30	-0,35	-0,43	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	73,0	-5,30	-0,82	-0,99	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	80,0	1,70	0,26	0,32	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	79,0	0,70	0,11	0,13	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	89,0	10,70	1,65	2,00	

Fortsetzung Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	86,0	7,70	1,18	1,44	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	3,70	0,57	0,69	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-4,30	-0,66	-0,80	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,2	1,90	0,29	0,35	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78	-0,30	-0,05	-0,06	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	70,0	-8,30	-1,28	-1,55	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,3	5,00	0,77	0,93	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	67,0	-11,30	-1,74	-2,11	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	74,0	-4,30	-0,66	-0,80	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,9	5,56	0,86	1,04	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	75,0	-3,30	-0,51	-0,62	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	1,70	0,26	0,32	
102	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,3	0,00	0,00	0,00	
109	Redox incl.	78,0	-0,30	-0,05	-0,06	

rot: Messwert vom Auswerter nachberechnet.

4.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

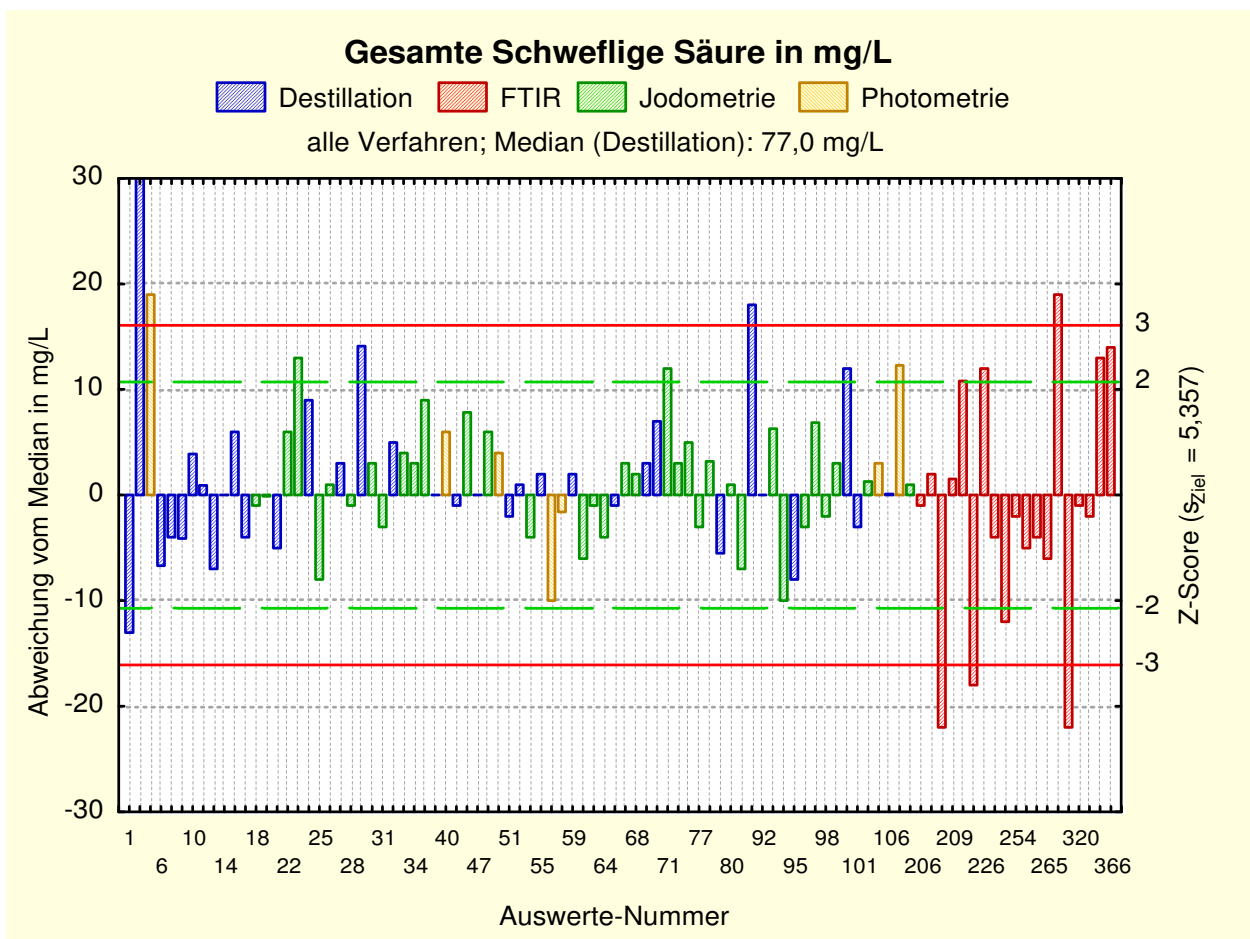
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	73,3	-0,70	-0,11	-0,13	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	9,00	1,45	1,68	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	64,0	-10,00	-1,61	-1,87	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-4,00	-0,65	-0,75	
30	LwK 7.5.1(excl. Red.)	67,0	-7,00	-1,13	-1,31	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	77,9	3,91	0,63	0,73	
48	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	7,00	1,13	1,31	
62	LwK 7.5.2(excl. Red.)	66,0	-8,00	-1,29	-1,49	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	68,0	-6,00	-0,97	-1,12	
64	LwK 7.5.1(excl. Red.)	63,0	-11,00	-1,78	-2,05	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	75,0	1,00	0,16	0,19	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	75,0	1,00	0,16	0,19	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	9,00	1,45	1,68	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	6,00	0,97	1,12	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	73,0	-1,00	-0,16	-0,19	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	66,0	-8,00	-1,29	-1,49	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	77,2	3,20	0,52	0,60	
93	LwK 7.5.1(excl. Red.)	76,5	2,50	0,40	0,47	
94	LwK 7.5.2(excl. Red.)	61,0	-13,00	-2,10	-2,43	
97	LwK 7.5.1(excl. Red.)	77,0	2,98	0,48	0,56	
99	LwK 7.5.1(excl. Red.)	74,0	0,00	0,00	0,00	

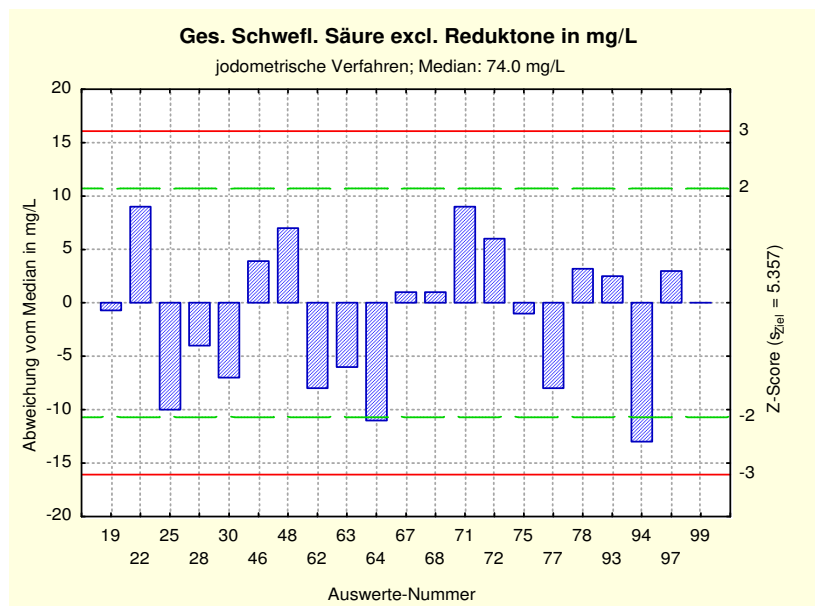
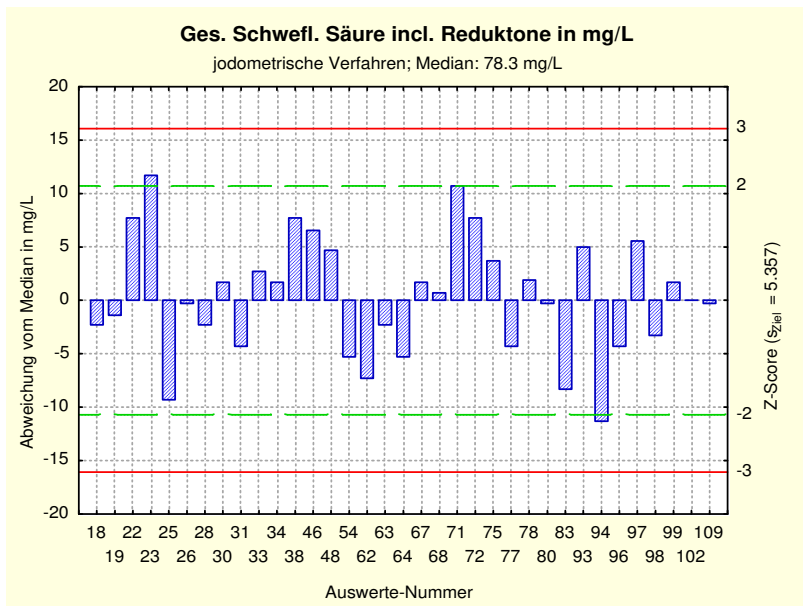
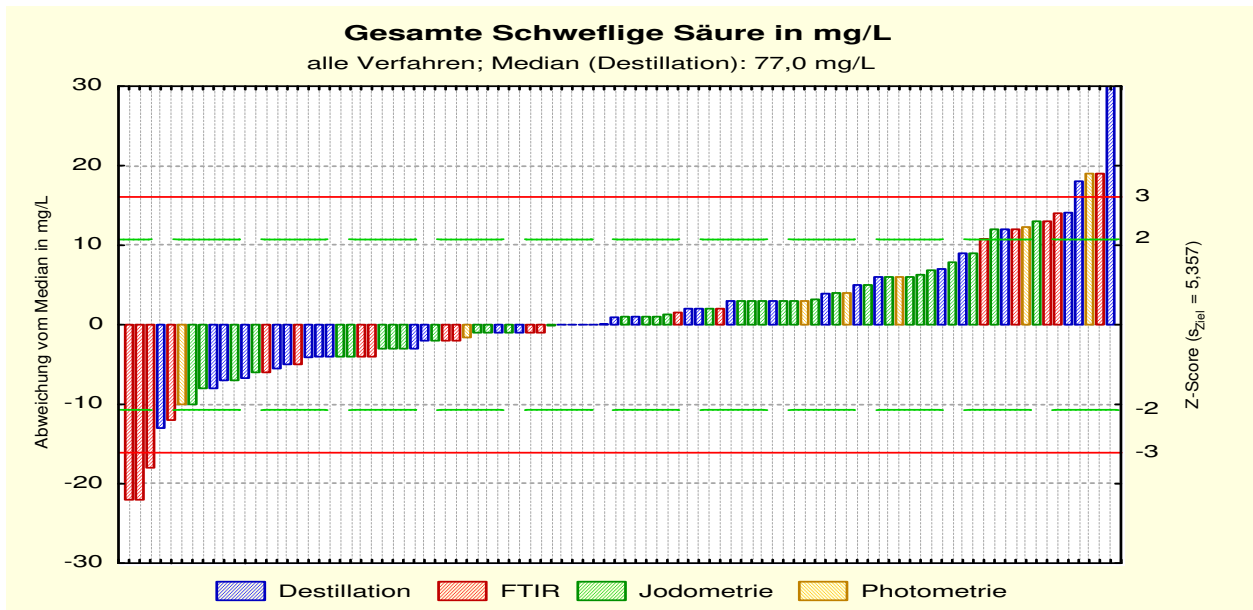
4.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		incl. Reduktone	excl. Reduktone
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	33	32	35	21
Minimalwert	64,0	64,0	67,0	61,0
Mittelwert	78,60	77,71	78,61	72,90
Median	77,00	77,00	78,30	74,00
Maximalwert	107,2	95,0	90,0	83,0
Standardabweichung (s_L)	8,245	6,555	5,584	6,651
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,435	1,159	0,944	1,451
Zielstandardabweichung				
- n. Horwitz (s_H)	6,407	6,407	6,499	6,194
- experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,29	1,02	0,86	1,07
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,54	1,22	1,04	1,24
Quotient (u_M/s_H)	0,22	0,18	0,15	0,23
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,27	0,22	0,18	0,27

4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	77,33	9,282
LwK 7.3 m	modifiziert: 10 ml Probe, 5 ml 15%ige Phosphorsäure	1	95,04	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	5	76,50	4,878
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	16	77,67	4,329
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	86,00	
	alle Destillationsverfahren	33	77,70	6,259
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	29	79,70	5,262
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	3	70,33	3,464
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein ohne Abzug	2	75,00	8,019
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inklusive Reduktone	1	78,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktionabzug	35	78,59	5,846
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	18	73,84	7,132
LwK 7.5.2(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktionabzug	2	63,50	4,009
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	75,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktionabzug	21	72,93	7,471
LwK 7.6	Pararosanlinmethode	1	89,30	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	80,59	10,341
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	75,47	12,045





5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P03

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	1,00819	-0,000025	-0,19	
02	LwK 8.1	1,00806	-0,000155	-1,17	
04	LwK 8.4	1,00825	0,000035	0,27	
05	LwK 8.4	1,00815	-0,000065	-0,49	
06	LwK 8.4	1,00839	0,000175	1,33	
07	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
08	LwK 8.4	1,00815	-0,000065	-0,49	
10	LwK 8.1	1,00812	-0,000095	-0,72	
11	LwK 8.1	1,00820	-0,000015	-0,11	
12	LwK 8.4	1,00832	0,000110	0,83	
14	LwK 8.4	1,00818	-0,000035	-0,27	
15	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	
16	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
18	LwK 8.4	1,00810	-0,000115	-0,87	
21	LwK 8.4	1,00816	-0,000055	-0,42	
22	LwK 8.4	1,00822	0,000005	0,04	
23	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	
24	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	
25	LwK 8.4	1,00825	0,000035	0,27	
27	LwK 8.4	1,00827	0,000055	0,42	
28	LwK 8.4	1,00810	-0,000115	-0,87	
29	LwK 8.4	1,00822	0,000005	0,04	
31	LwK 8.2	1,00840	0,000185	1,40	
32	LwK 8.4	1,00810	-0,000115	-0,87	
36	LwK 8.4	1,00817	-0,000045	-0,34	
38	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
39	LwK 8.3	1,00822	0,000005	0,04	
40	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
41	LwK 8.4	1,00816	-0,000055	-0,42	
44	LwK 8.4	1,00821	-0,000005	-0,04	
46	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
47	LwK 8.4	1,00824	0,000025	0,19	
48	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	
50	LwK 8.4	1,00818	-0,000035	-0,27	
52	LwK 8.4	1,00826	0,000045	0,34	
54	LwK 8.4	1,00819	-0,000022	-0,17	
55	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
56	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
57	LwK 8.4	1,00823	0,000015	0,11	
58	LwK 8.4	1,00814	-0,000075	-0,57	
60	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	
62	LwK 8.4	1,00810	-0,000115	-0,87	
63	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
64	LwK 8.3	1,00810	-0,000115	-0,87	
65	LwK 8.4	1,00824	0,000025	0,19	
66	LwK 8.4	1,00840	0,000185	1,40	
67	LwK 8.4	1,00780	-0,000415	-3,14	
70	LwK 8.4	1,00823	0,000015	0,11	
71	LwK 8.1	1,00800	-0,000215	-1,63	
72	LwK 8.4	1,00831	0,000095	0,72	
78	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
79	LwK 8.4	1,00870	0,000485	3,67	
80	LwK 8.4	1,00610	-0,002115	-16,02	(**)
95	LwK 8.4	1,00830	0,000085	0,64	
99	LwK 8.4	1,00820	-0,000015	-0,11	

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

5.1.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
202	FTIR	1,00819	-0,000025	-0,13	
203	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
204	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
205	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
206	FTIR	1,00910	0,000885	4,66	
207	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
208	FTIR	1,00780	-0,000415	-2,18	
209	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
210	FTIR	1,00838	0,000165	0,87	
211	FTIR	1,00870	0,000485	2,55	
213	FTIR	1,00840	0,000185	0,97	
215	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
216	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
217	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
218	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
219	FTIR	1,00793	-0,000285	-1,50	
220	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
221	FTIR	1,00770	-0,000515	-2,71	
222	FTIR	1,00790	-0,000315	-1,66	
223	FTIR	1,00814	-0,000075	-0,39	
224	FTIR	1,00841	0,000195	1,03	
225	FTIR	1,00850	0,000285	1,50	
226	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
227	FTIR	1,00811	-0,000105	-0,55	
228	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
229	FTIR	1,00823	0,000015	0,08	
230	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
231	FTIR	1,00828	0,000065	0,34	
232	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
234	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
236	FTIR	1,00805	-0,000165	-0,87	
238	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
239	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
243	FTIR	1,00840	0,000185	0,97	
244	FTIR	1,00818	-0,000035	-0,18	
245	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
246	FTIR	1,00840	0,000185	0,97	
247	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
248	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
249	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
251	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
252	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
253	FTIR	1,00850	0,000285	1,50	
254	FTIR	1,00850	0,000285	1,50	
256	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
257	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
258	FTIR	1,00813	-0,000085	-0,45	
259	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
260	FTIR	1,00910	0,000885	4,66	
261	FTIR	1,00841	0,000195	1,03	
262	FTIR	1,00822	0,000005	0,03	
263	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
264	FTIR	1,00850	0,000285	1,50	
265	FTIR	1,00840	0,000185	0,97	
266	FTIR	1,00890	0,000685	3,61	
267	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
268	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
269	FTIR	1,00843	0,000215	1,13	
270	FTIR	1,00815	-0,000065	-0,34	
271	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
272	FTIR	1,00778	-0,000435	-2,29	
273	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
274	FTIR	1,00790	-0,000315	-1,66	
275	FTIR	1,00870	0,000485	2,55	
276	FTIR	1,00845	0,000235	1,24	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	1,00820	-0,000015	-0,08	
278	FTIR	1,01113	0,002914	15,34	(**)
279	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
281	FTIR	1,00900	0,000785	4,13	
282	FTIR	1,00840	0,000185	0,97	
283	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
284	FTIR	1,00935	0,001135	5,97	(**)
285	FTIR	1,00930	0,001085	5,71	(**)
286	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	
320	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
321	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
339	FTIR	1,00830	0,000085	0,45	
346	FTIR	1,00860	0,000385	2,03	
351	FTIR	1,00800	-0,000215	-1,13	
366	FTIR	1,00880	0,000585	3,08	
371	FTIR	1,00810	-0,000115	-0,61	

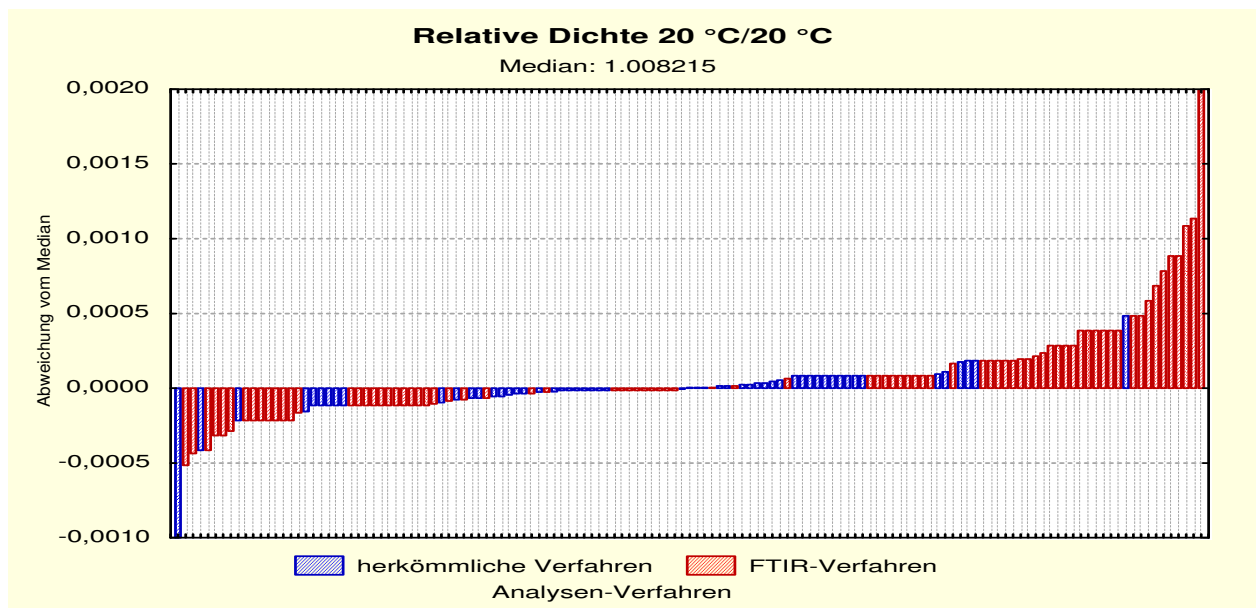
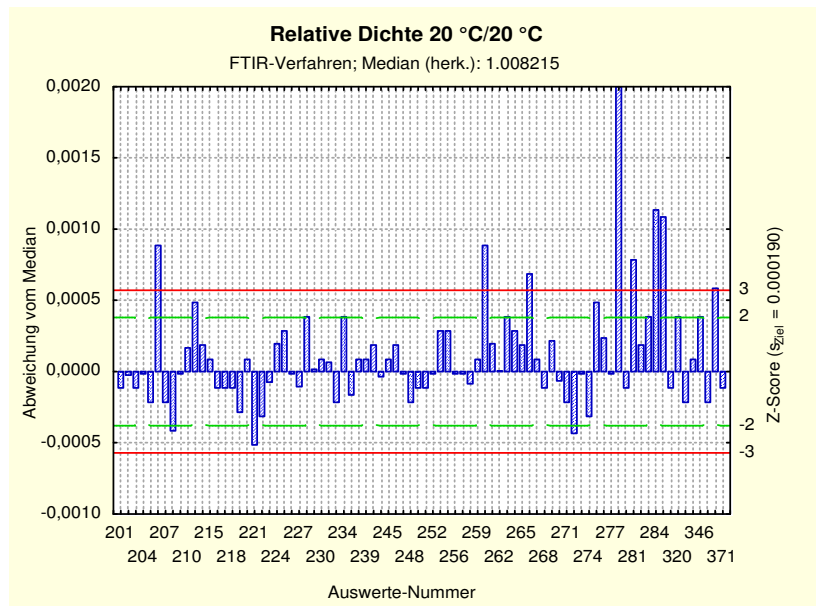
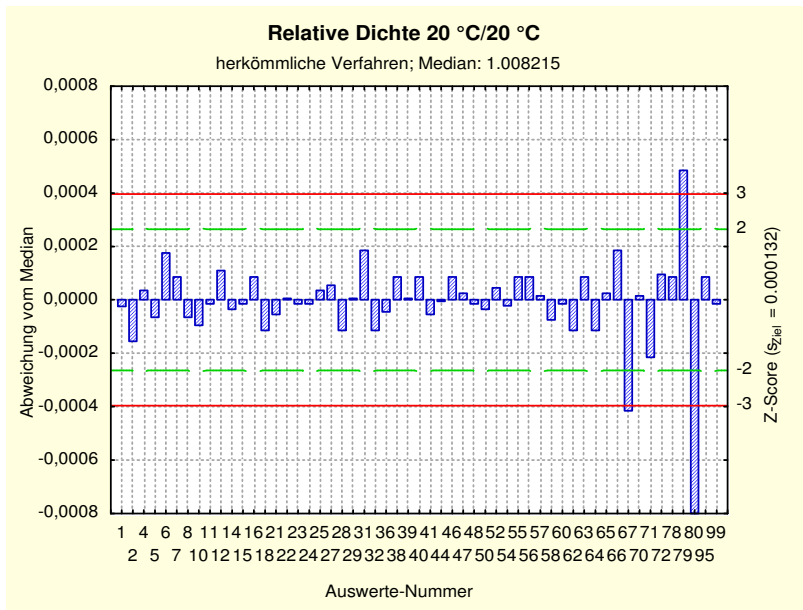
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score vom Median der herkömmlichen Werte ab.

5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	55	54
Minimalwert	1,00610	1,00780
Mittelwert	1,008182	1,008221
Median	1,008210	1,008215
Maximalwert	1,00870	1,00870
Standardabweichung (s_L)	0,000310	0,000121
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000042	0,000017
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 ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,35	0,92
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,63	0,64
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,32	0,13
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,22	0,09

5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	5	1,00811	0,000097
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00840	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	2	1,00816	0,000096
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	47	1,00823	0,000086
	herkömmliche Verfahren	55	1,00822	0,000092
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	1,00828	0,000274



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	80,65	-0,270	-0,11	-0,50	
02	LwK 2.1	80,65	-0,270	-0,11	-0,50	
04	LwK 2.9	82,18	1,260	0,53	2,36	
05	LwK 2.9	80,42	-0,496	-0,21	-0,93	
06	LwK 2.4	81,07	0,150	0,06	0,28	
07	LwK 2.4	80,70	-0,220	-0,09	-0,41	
08	LwK 2.4	80,91	-0,010	-0,00	-0,02	
10	LwK 2.4	81,59	0,670	0,28	1,25	
11	LwK 2.1	79,80	-1,120	-0,47	-2,09	
12	LwK 2.1	81,38	0,455	0,19	0,85	
14	LwK 2.1	80,90	-0,020	-0,01	-0,04	
15	LwK 2.9	81,30	0,380	0,16	0,71	
16	LwK 2.1	81,40	0,480	0,20	0,90	
18	LwK 2.9	81,60	0,680	0,29	1,27	
19	LwK 2.7	80,79	-0,130	-0,06	-0,24	
21	LwK 2.7	81,50	0,580	0,25	1,08	
22	LwK 2.4	80,72	-0,200	-0,08	-0,37	
23	LwK 2.7	80,64	-0,280	-0,12	-0,52	
24	LwK 2.9	81,30	0,380	0,16	0,71	
25	LwK 2.5	80,90	-0,020	-0,01	-0,04	
27	LwK 2.1	80,93	0,010	0,00	0,02	
28	LwK 2.4	81,50	0,580	0,25	1,08	
29	LwK 2.5	81,30	0,380	0,16	0,71	
31	LwK 2.4	80,10	-0,820	-0,35	-1,53	
32	LwK 2.1	81,20	0,280	0,12	0,52	
39	LwK 2.2	81,40	0,480	0,20	0,90	
40	LwK 2.9	81,40	0,480	0,20	0,90	
44	LwK 2.4	81,10	0,180	0,08	0,34	
46	LwK 2.9	81,10	0,180	0,08	0,34	
47	LwK 2.1	80,50	-0,420	-0,18	-0,79	
48	LwK 2.5	81,80	0,880	0,37	1,64	
50	LwK 2.4	81,20	0,280	0,12	0,52	
52	LwK 2.9	81,30	0,380	0,16	0,71	
54	LwK 2.9	81,66	0,740	0,31	1,38	
55	LwK 2.9	80,20	-0,720	-0,30	-1,35	
57	LwK 2.1	81,06	0,140	0,06	0,26	
58	LwK 2.9	81,42	0,500	0,21	0,93	
60	LwK 2.9	81,10	0,180	0,08	0,34	
62	LwK 2.1	80,40	-0,520	-0,22	-0,97	
63	LwK 2.7	82,80	1,880	0,80	3,51	
64	LwK 2.1	80,20	-0,720	-0,30	-1,35	
65	LwK 2.1	79,80	-1,120	-0,47	-2,09	
66	LwK 2.5	80,00	-0,920	-0,39	-1,72	
70	LwK 2.4	80,60	-0,320	-0,14	-0,60	
71	LwK 2.4	81,10	0,180	0,08	0,34	
72	LwK 2.9	81,23	0,310	0,13	0,58	
75	LwK 2.3	81,30	0,380	0,16	0,71	
78	LwK 2.1	79,48	-1,440	-0,61	-2,69	
79	LwK 2.9	80,05	-0,870	-0,37	-1,63	
91	LwK 2.1	81,37	0,451	0,19	0,84	
92	LwK 2.9	80,50	-0,420	-0,18	-0,79	
93	LwK 2.5	81,70	0,780	0,33	1,46	
94	LwK 2.9	81,60	0,680	0,29	1,27	
95	LwK 2.1	81,07	0,150	0,06	0,28	
97	LwK 2.5	81,11	0,190	0,08	0,36	
99	LwK 2.9	81,30	0,380	0,16	0,71	
102	LwK 2.7	81,30	0,380	0,16	0,71	
104	LwK 2.9	81,06	0,140	0,06	0,26	
107	LwK 2.4	81,30	0,380	0,16	0,71	

5.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	79,94	-0,980	-0,41	-1,11	
202	LwK 2.8	80,35	-0,570	-0,24	-0,64	
203	LwK 2.8	81,50	0,580	0,25	0,65	
204	LwK 2.8	80,90	-0,020	-0,01	-0,02	
205	LwK 2.8	80,58	-0,339	-0,14	-0,38	
206	LwK 2.8	82,06	1,140	0,48	1,29	
207	LwK 2.8	83,50	2,580	1,09	2,91	
208	LwK 2.8	79,90	-1,020	-0,43	-1,15	
209	LwK 2.8	81,92	1,000	0,42	1,13	
210	LwK 2.8	81,86	0,940	0,40	1,06	
211	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
213	LwK 2.8	81,60	0,680	0,29	0,77	
215	LwK 2.8	80,80	-0,120	-0,05	-0,14	
216	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
217	LwK 2.8	81,10	0,180	0,08	0,20	
218	LwK 2.8	81,30	0,380	0,16	0,43	
219	LwK 2.8	80,80	-0,120	-0,05	-0,14	
220	LwK 2.8	82,40	1,480	0,63	1,67	
221	LwK 2.8	81,30	0,380	0,16	0,43	
222	LwK 2.8	81,28	0,360	0,15	0,41	
223	LwK 2.8	81,05	0,130	0,06	0,15	
224	LwK 2.8	81,80	0,880	0,37	0,99	
225	LwK 2.8	81,30	0,380	0,16	0,43	
226	LwK 2.8	81,36	0,440	0,19	0,50	
227	LwK 2.8	80,76	-0,160	-0,07	-0,18	
228	LwK 2.8	79,21	-1,710	-0,72	-1,93	
229	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
230	LwK 2.8	80,20	-0,720	-0,30	-0,81	
231	LwK 2.8	77,14	-3,780	-1,60	-4,27	
232	LwK 2.8	80,50	-0,420	-0,18	-0,47	
234	LwK 2.8	80,00	-0,920	-0,39	-1,04	
236	LwK 2.8	79,10	-1,820	-0,77	-2,05	
238	LwK 2.8	80,40	-0,520	-0,22	-0,59	
239	LwK 2.8	79,70	-1,220	-0,52	-1,38	
243	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
244	LwK 2.8	81,72	0,800	0,34	0,90	
245	LwK 2.8	81,30	0,380	0,16	0,43	
246	LwK 2.8	81,60	0,680	0,29	0,77	
247	LwK 2.8	80,17	-0,750	-0,32	-0,85	
248	LwK 2.8	80,05	-0,870	-0,37	-0,98	
249	LwK 2.8	80,04	-0,880	-0,37	-0,99	
250	LwK 2.8	80,21	-0,710	-0,30	-0,80	
251	LwK 2.8	79,10	-1,820	-0,77	-2,05	
252	LwK 2.8	79,39	-1,530	-0,65	-1,73	
253	LwK 2.8	80,80	-0,120	-0,05	-0,14	
254	LwK 2.8	81,40	0,480	0,20	0,54	
256	LwK 2.8	81,60	0,680	0,29	0,77	
257	LwK 2.8	79,50	-1,420	-0,60	-1,60	
258	LwK 2.8	81,80	0,880	0,37	0,99	
259	LwK 2.8	81,40	0,480	0,20	0,54	
260	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
261	LwK 2.8	81,31	0,390	0,17	0,44	
262	LwK 2.8	79,03	-1,890	-0,80	-2,13	
263	LwK 2.8	81,90	0,980	0,41	1,11	
264	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
265	LwK 2.8	81,70	0,780	0,33	0,88	
266	LwK 2.8	79,40	-1,520	-0,64	-1,72	
267	LwK 2.8	80,71	-0,210	-0,09	-0,24	
268	LwK 2.8	81,43	0,510	0,22	0,58	
269	LwK 2.8	81,00	0,080	0,03	0,09	
270	LwK 2.8	81,40	0,480	0,20	0,54	
271	LwK 2.8	80,15	-0,770	-0,33	-0,87	
272	LwK 2.8	80,10	-0,820	-0,35	-0,93	
273	LwK 2.8	79,52	-1,400	-0,59	-1,58	
274	LwK 2.8	83,38	2,460	1,04	2,78	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

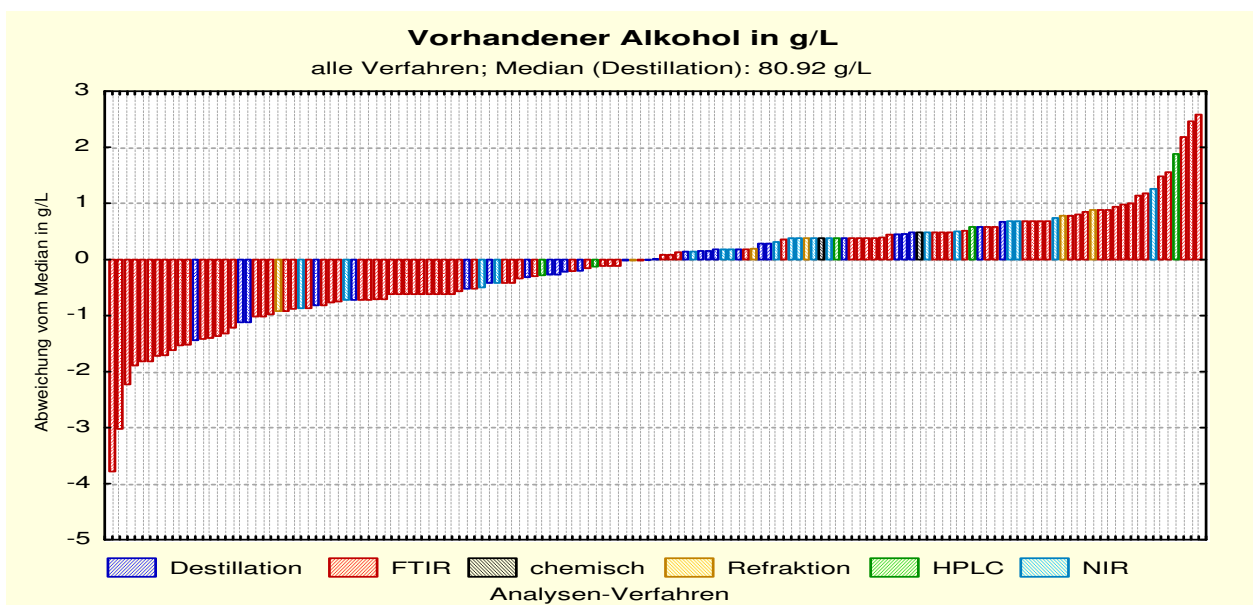
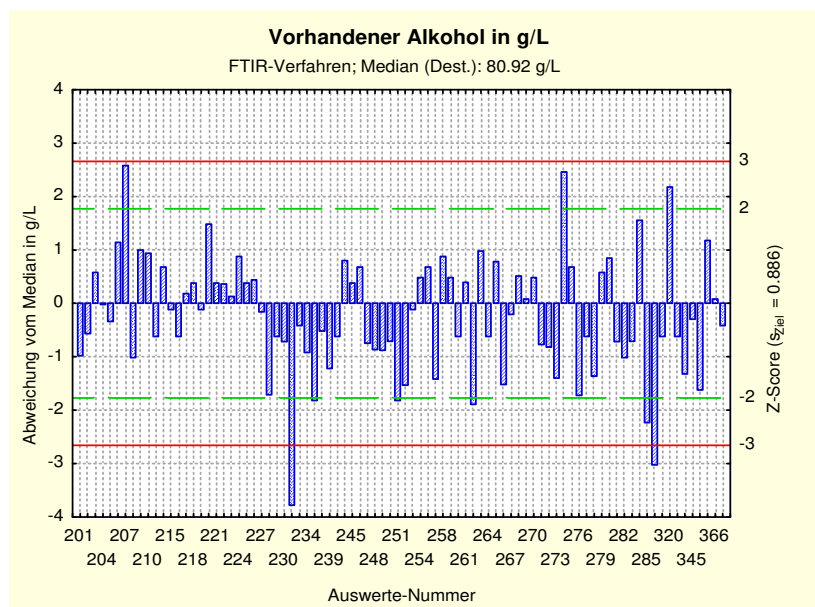
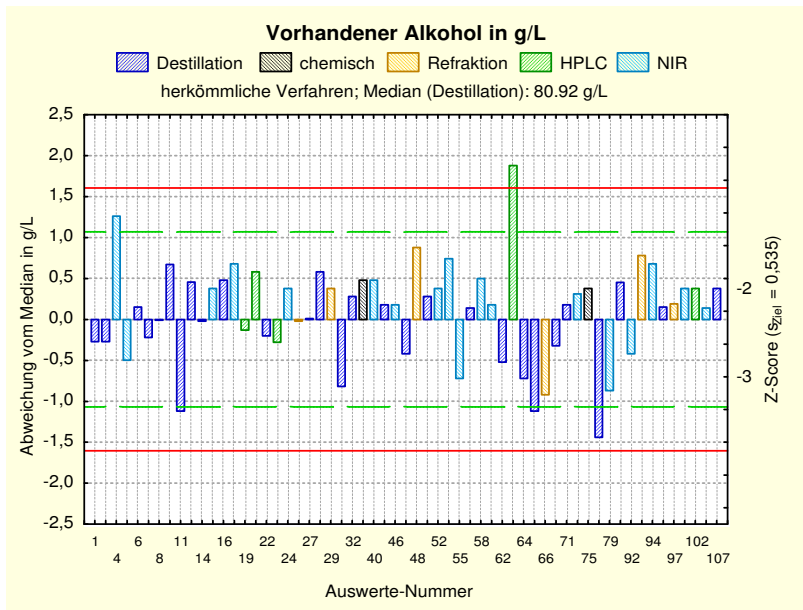
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 2.8	81,60	0,680	0,29	0,77	
276	LwK 2.8	79,20	-1,720	-0,73	-1,94	
277	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
278	LwK 2.8	79,56	-1,365	-0,58	-1,54	
279	LwK 2.8	81,50	0,580	0,25	0,65	
280	LwK 2.8	81,77	0,845	0,36	0,95	
281	LwK 2.8	80,20	-0,720	-0,30	-0,81	
282	LwK 2.8	79,90	-1,020	-0,43	-1,15	
283	LwK 2.8	80,21	-0,710	-0,30	-0,80	
284	LwK 2.8	82,48	1,556	0,66	1,76	
285	LwK 2.8	78,69	-2,230	-0,94	-2,52	
286	LwK 2.8	77,90	-3,022	-1,28	-3,41	
313	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
320	LwK 2.8	83,10	2,180	0,92	2,46	
321	LwK 2.8	80,30	-0,620	-0,26	-0,70	
339	LwK 2.8	79,60	-1,320	-0,56	-1,49	
345	LwK 2.8	80,62	-0,300	-0,13	-0,34	
346	LwK 2.8	79,30	-1,620	-0,69	-1,83	
351	LwK 2.8	82,10	1,180	0,50	1,33	
366	LwK 2.8	81,00	0,080	0,03	0,09	
371	LwK 2.8	80,50	-0,420	-0,18	-0,47	

5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	28
Minimalwert	79,48
Mittelwert	80,810
Median	80,920
Maximalwert	81,59
Standardabweichung (s_L)	0,547
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,103
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,363
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,886
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,23
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,02
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,62
Quotient (u_M/s_H)	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,19
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,12

5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	16	80,702	0,628
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	12	81,016	0,411
	Destillationsverfahren	28	80,852	0,526
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	81,400	
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	81,300	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	81,152	0,701
LwK 2.7	HPLC z.B. nach Heidger	5	81,403	0,963
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	86	80,683	1,059
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	18	81,171	0,519



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	56,30	-0,70	-0,40	-1,18	
02	Biegeschwinger	57,20	0,20	0,11	0,34	
04	LwK 3.3	57,60	0,60	0,34	1,01	
06	LwK 3.3	57,40	0,40	0,23	0,67	
07	LwK 3.3	57,00	0,00	0,00	0,00	
08	LwK 3.3	56,70	-0,30	-0,17	-0,51	
10	LwK 3.1	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
11	LwK 3.2	56,40	-0,60	-0,34	-1,01	
12	LwK 3.3	57,77	0,77	0,44	1,30	
14	LwK 3.3	56,80	-0,20	-0,11	-0,34	
15	LwK 3.3	57,60	0,60	0,34	1,01	
16	LwK 3.3	57,20	0,20	0,11	0,34	
18	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
21	LwK 3.3	57,00	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
23	LwK 3.3	56,60	-0,40	-0,23	-0,67	
24	LwK 3.3	57,00	0,00	0,00	0,00	
25	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
27	LwK 3.2	57,10	0,10	0,06	0,17	
28	LwK 3.3	58,07	1,07	0,61	1,80	
29	LwK 3.3	57,20	0,20	0,11	0,34	
31	LwK 3.2	57,00	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 3.2	56,70	-0,30	-0,17	-0,51	
39	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
40	LwK 3.3	57,30	0,30	0,17	0,51	
41	LwK 3.3	57,10	0,10	0,06	0,17	
44	LwK 3.3	57,00	0,00	0,00	0,00	
46	LwK 3.3	57,30	0,30	0,17	0,51	
47	LwK 3.2	57,60	0,60	0,34	1,01	
50	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
52	LwK 3.3	57,20	0,20	0,11	0,34	
54	LwK 3.3	57,20	0,20	0,11	0,34	
55	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
58	LwK 3.3	56,92	-0,08	-0,05	-0,13	
60	LwK 3.3	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
62	LwK 3.2	56,40	-0,60	-0,34	-1,01	
63	LwK 3.3	57,70	0,70	0,40	1,18	
64	LwK 3.2	56,30	-0,70	-0,40	-1,18	
65	LwK 3.2	56,10	-0,90	-0,51	-1,52	
70	LwK 3.3	56,80	-0,20	-0,11	-0,34	
71	LwK 3.3	56,40	-0,60	-0,34	-1,01	
79	LwK 3.3	58,10	1,10	0,63	1,85	
95	LwK 3.2	57,10	0,10	0,06	0,17	
97	LwK 3.3	57,10	0,10	0,06	0,17	
99	LwK 3.3	57,00	0,00	0,00	0,00	

5.3.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	56,900	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	10	56,685	0,512
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	34	57,103	0,340
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	45	57,019	0,418
Biegeschwinger	ungenauere Verfahrensangabe; eigentliches Vorgehen nicht erkennbar	52	57,749	0,815
		1	57,200	

5.3.3 FTIR-Laborergebnisse

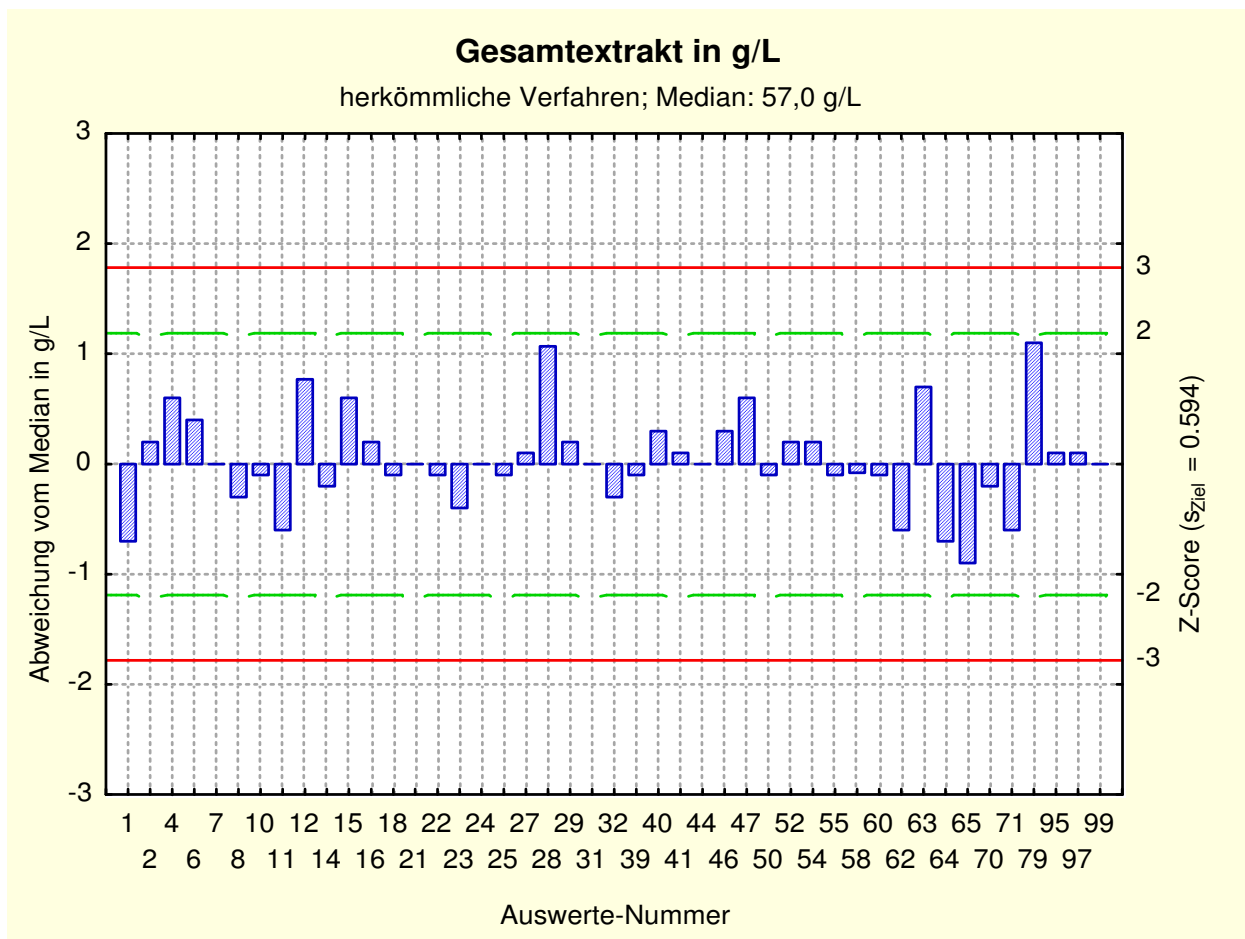
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	56,42	-0,58	-0,33	-0,98	
202	FTIR	58,21	1,21	0,69	2,04	
203	FTIR	57,20	0,20	0,11	0,34	
204	FTIR	59,10	2,10	1,20	3,54	
206	FTIR	63,91	6,91	3,94	11,63	(**)
209	FTIR	57,59	0,59	0,34	0,99	
210	FTIR	57,70	0,70	0,40	1,18	
211	FTIR	57,70	0,70	0,40	1,18	
216	FTIR	58,20	1,20	0,68	2,02	
217	FTIR	57,00	0,00	0,00	0,00	
218	FTIR	57,80	0,80	0,46	1,35	
219	FTIR	57,10	0,10	0,06	0,17	
221	FTIR	57,80	0,80	0,46	1,35	
223	FTIR	57,12	0,12	0,07	0,20	
225	FTIR	57,50	0,50	0,28	0,84	
227	FTIR	57,72	0,72	0,41	1,21	
228	LwK 3.3	57,17	0,17	0,10	0,28	
229	FTIR	57,50	0,50	0,28	0,84	
230	FTIR	57,40	0,40	0,23	0,67	
231	FTIR	57,17	0,17	0,10	0,29	
232	FTIR	56,10	-0,90	-0,51	-1,52	
234	FTIR	57,94	0,94	0,54	1,58	
238	FTIR	58,10	1,10	0,63	1,85	
239	FTIR	58,60	1,60	0,91	2,69	
244	FTIR	57,10	0,10	0,06	0,17	
248	FTIR	57,70	0,70	0,40	1,18	
249	FTIR	57,70	0,70	0,40	1,18	
251	FTIR	58,10	1,10	0,63	1,85	
253	FTIR	58,30	1,30	0,74	2,19	
254	FTIR	57,80	0,80	0,46	1,35	
256	FTIR	58,90	1,90	1,08	3,20	
257	FTIR	57,80	0,80	0,46	1,35	
260	FTIR	57,70	0,70	0,40	1,18	
261	FTIR	57,55	0,55	0,31	0,93	
264	FTIR	58,50	1,50	0,85	2,53	
265	FTIR	57,00	0,00	0,00	0,00	
266	FTIR	58,90	1,90	1,08	3,20	
268	FTIR	56,30	-0,70	-0,40	-1,18	
269	FTIR	56,80	-0,20	-0,11	-0,34	
270	FTIR	56,70	-0,30	-0,17	-0,51	
271	FTIR	58,55	1,55	0,88	2,61	
272	FTIR	55,90	-1,10	-0,63	-1,85	
273	FTIR	58,00	1,00	0,57	1,68	
274	FTIR	58,09	1,09	0,62	1,84	
275	FTIR	58,10	1,10	0,63	1,85	
276	FTIR	58,00	1,00	0,57	1,68	
279	FTIR	58,15	1,15	0,66	1,94	
281	FTIR	59,00	2,00	1,14	3,37	
282	FTIR	41,90	-15,10	-8,61	-25,42	(**)
283	FTIR	58,20	1,20	0,68	2,02	
321	FTIR	56,90	-0,10	-0,06	-0,17	
339	FTIR	58,60	1,60	0,91	2,69	
366	FTIR	59,20	2,20	1,25	3,70	

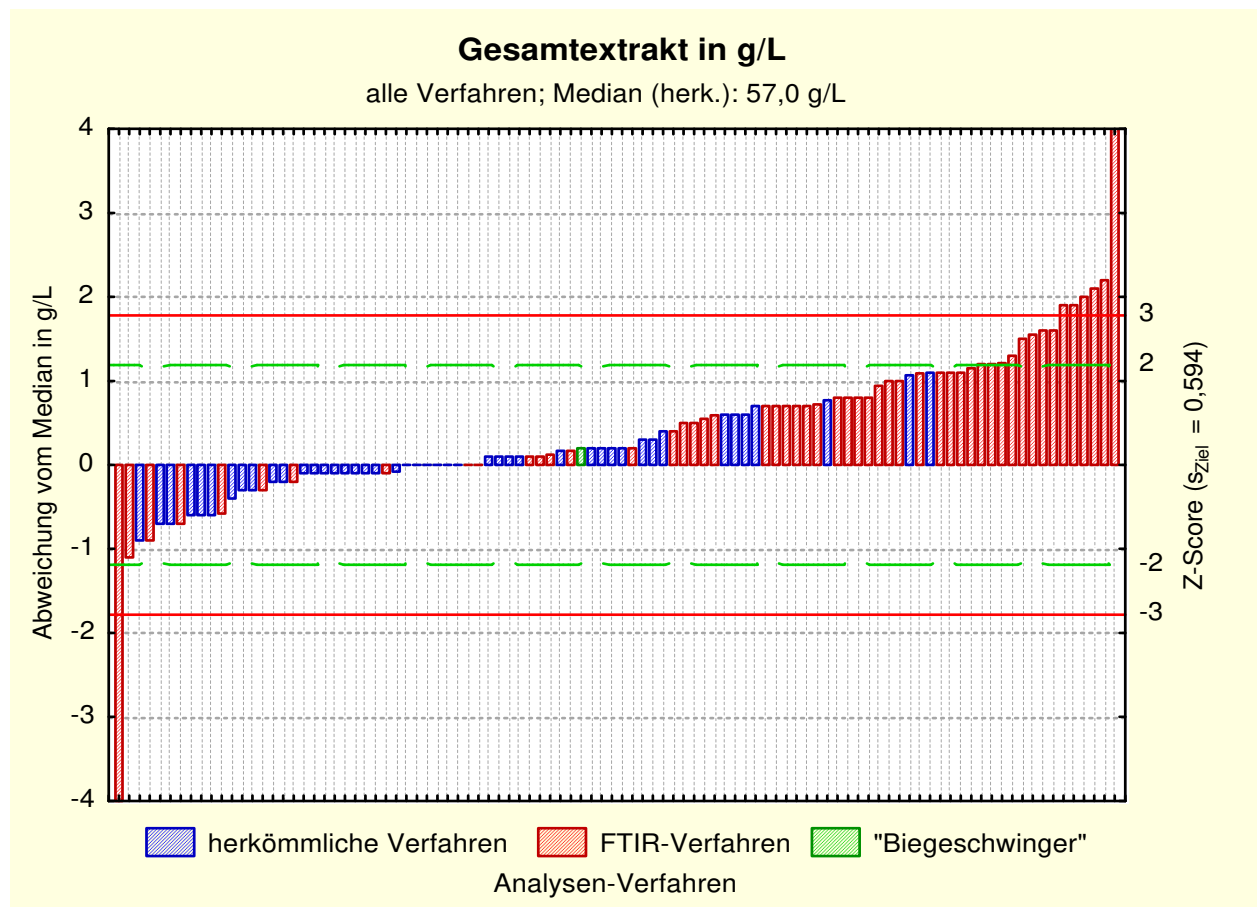
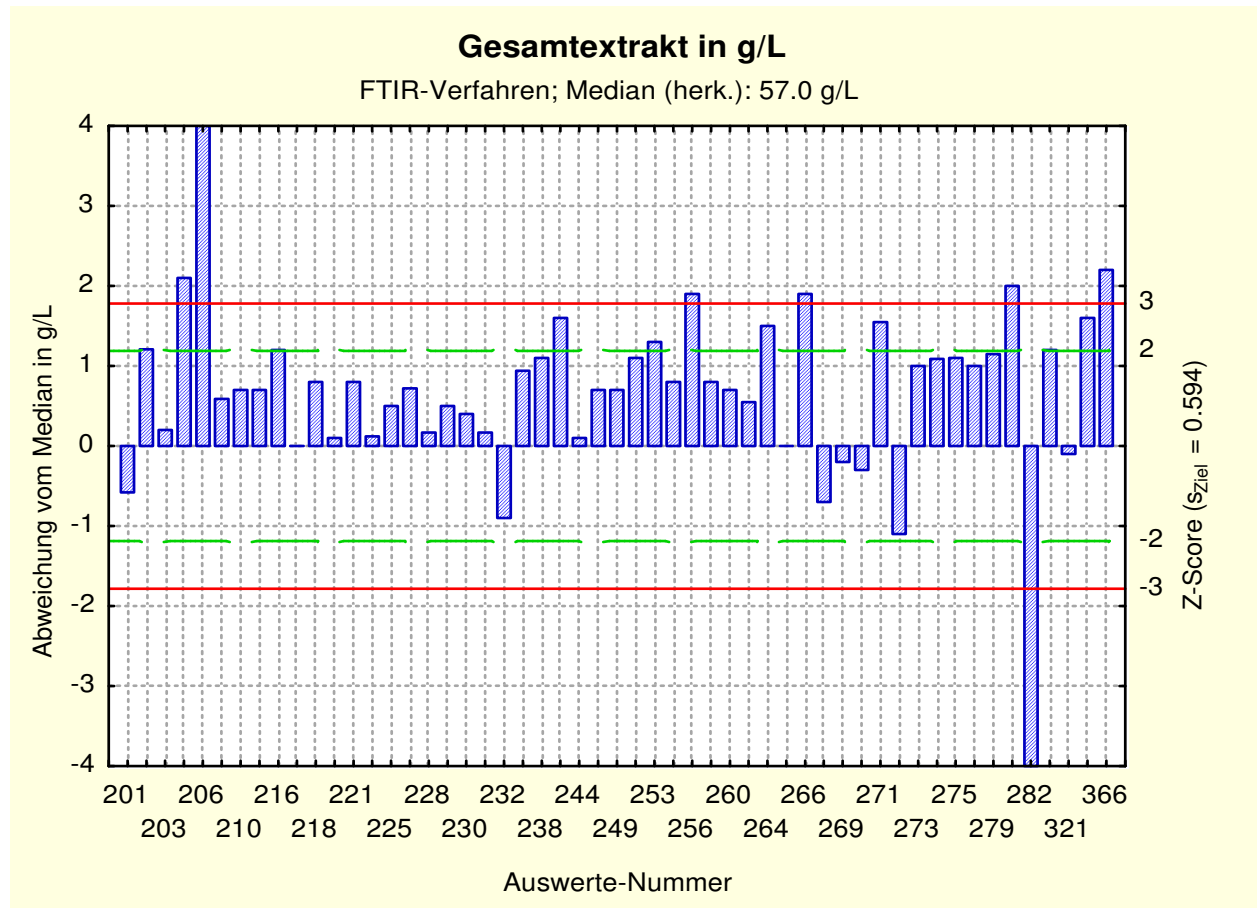
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

5.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	56,1
Mittelwert	57,03
Median	57,00
Maximalwert	58,1
Standardabweichung (s_L)	0,437
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,065
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,755
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,565)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,25
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,74
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,77)
Quotient (u_M/s_H)	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,12)

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





5.4 Vergärbare Zucker [g/L]

5.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 4.5	36,40	1,900	1,66	1,95	
04	LwK 4.7	34,67	0,170	0,15	0,17	
06	LwK 4.5	33,80	-0,700	-0,61	-0,72	
07	LwK 4.5	34,50	0,000	0,00	0,00	
08	LwK 4.5	34,20	-0,300	-0,26	-0,31	
10	LwK 4.5	35,99	1,490	1,30	1,53	
11	LwK 4.5	33,30	-1,200	-1,05	-1,23	
12	LwK 4.5	32,83	-1,669	-1,46	-1,71	
14	LwK 4.7	34,80	0,300	0,26	0,31	
15	LwK 4.5	34,80	0,300	0,26	0,31	
16	LwK 4.5	34,80	0,300	0,26	0,31	
18	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
19	LwK 4.7	35,12	0,620	0,54	0,64	
21	LwK 4.7	34,24	-0,260	-0,23	-0,27	
22	LwK 4.5	34,66	0,160	0,14	0,16	
23	LwK 4.7	34,37	-0,130	-0,11	-0,13	
24	NMR	35,02	0,520	0,45	0,53	
25	LwK 4.4	34,00	-0,500	-0,44	-0,51	
27	LwK 4.5	34,82	0,320	0,28	0,33	
28	LwK 4.7	34,70	0,200	0,17	0,21	
29	LwK 4.4	36,20	1,700	1,48	1,74	
31	LwK 4.4	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
32	LwK 4.5	35,50	1,000	0,87	1,03	
39	LwK 4.3	34,60	0,100	0,09	0,10	
40	LwK 4.5	34,80	0,300	0,26	0,31	
41	LwK 4.7	33,60	-0,900	-0,79	-0,92	
42	LwK 4.5	33,82	-0,680	-0,59	-0,70	
44	LwK 4.7	34,43	-0,066	-0,06	-0,07	
46	LwK 4.5	33,49	-1,013	-0,88	-1,04	
47	LwK 4.5	34,00	-0,500	-0,44	-0,51	
48	LwK 4.3	33,50	-1,000	-0,87	-1,03	
50	LwK 4.5	35,31	0,810	0,71	0,83	
52	LwK 4.7	34,60	0,100	0,09	0,10	
54	LwK 4.5	34,55	0,050	0,04	0,05	
55	LwK 4.5	34,10	-0,400	-0,35	-0,41	
57	LwK 4.5	34,90	0,400	0,35	0,41	
58	LwK 4.5	34,30	-0,200	-0,17	-0,21	
60	LwK 4.4	34,20	-0,300	-0,26	-0,31	
62	LwK 4.4	37,26	2,760	2,41	2,83	
63	LwK 4.7	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
64	LwK 4.4	35,20	0,700	0,61	0,72	
65	LwK 4.5	32,30	-2,200	-1,92	-2,26	
66	LwK 4.4	35,00	0,500	0,44	0,51	
70	LwK 4.1	31,80	-2,700	-2,36	-2,77	
71	LwK 4.4	36,00	1,500	1,31	1,54	
72	LwK 4.5	33,81	-0,690	-0,60	-0,71	
78	LwK 4.4	36,10	1,600	1,40	1,64	
79	LwK 4.4	37,40	2,900	2,53	2,98	
95	LwK 4.5	34,21	-0,290	-0,25	-0,30	
97	LwK 4.7	35,11	0,610	0,53	0,63	

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	35,13	0,630	0,55	0,65	
203	LwK 4.8	35,15	0,650	0,57	0,67	
204	LwK 4.8	34,56	0,060	0,05	0,06	
206	LwK 4.8	39,79	5,290	4,62	5,43	(**)
207	LwK 4.8	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
208	LwK 4.8	35,10	0,600	0,52	0,62	
209	LwK 4.8	33,88	-0,620	-0,54	-0,64	
210	LwK 4.8	35,55	1,050	0,92	1,08	
211	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	
213	LwK 4.8	34,72	0,220	0,19	0,23	
215	LwK 4.8	34,30	-0,200	-0,17	-0,21	
216	LwK 4.8	35,30	0,800	0,70	0,82	
217	LwK 4.8	34,32	-0,180	-0,16	-0,18	
218	LwK 4.8	35,15	0,650	0,57	0,67	
219	LwK 4.8	34,20	-0,300	-0,26	-0,31	
220	LwK 4.8	35,10	0,600	0,52	0,62	
221	LwK 4.8	35,02	0,520	0,45	0,53	
222	LwK 4.8	36,58	2,080	1,82	2,13	
223	LwK 4.8	34,14	-0,360	-0,31	-0,37	
224	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
225	LwK 4.8	34,00	-0,500	-0,44	-0,51	
226	LwK 4.8	35,77	1,270	1,11	1,30	
227	LwK 4.8	34,45	-0,050	-0,04	-0,05	
228	LwK 4.8	32,10	-2,400	-2,10	-2,46	
229	LwK 4.8	34,86	0,360	0,31	0,37	
230	LwK 4.8	35,40	0,900	0,79	0,92	
231	LwK 4.8	32,94	-1,560	-1,36	-1,60	
232	LwK 4.8	33,10	-1,400	-1,22	-1,44	
234	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	
236	LwK 4.8	35,07	0,570	0,50	0,58	
238	LwK 4.8	34,87	0,370	0,32	0,38	
239	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
243	LwK 4.8	34,20	-0,300	-0,26	-0,31	
244	LwK 4.8	33,70	-0,800	-0,70	-0,82	
245	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
246	LwK 4.8	34,10	-0,400	-0,35	-0,41	
247	LwK 4.8	34,38	-0,120	-0,10	-0,12	
248	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
249	LwK 4.8	32,81	-1,690	-1,48	-1,73	
250	LwK 4.8	33,64	-0,860	-0,75	-0,88	
251	LwK 4.8	35,10	0,600	0,52	0,62	
252	LwK 4.8	33,01	-1,490	-1,30	-1,53	
253	LwK 4.8	33,53	-0,970	-0,85	-1,00	
254	LwK 4.8	35,50	1,000	0,87	1,03	
256	LwK 4.8	35,80	1,300	1,14	1,33	
257	LwK 4.8	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
258	LwK 4.8	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
259	LwK 4.8	34,51	0,010	0,01	0,01	
260	LwK 4.8	32,91	-1,590	-1,39	-1,63	
261	LwK 4.8	36,61	2,110	1,84	2,17	
262	LwK 4.8	36,30	1,800	1,57	1,85	
263	LwK 4.8	35,80	1,300	1,14	1,33	
264	LwK 4.8	33,30	-1,200	-1,05	-1,23	
265	LwK 4.8	35,30	0,800	0,70	0,82	
266	LwK 4.8	36,00	1,500	1,31	1,54	
267	LwK 4.8	33,75	-0,750	-0,65	-0,77	
268	LwK 4.8	33,59	-0,910	-0,79	-0,93	
269	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
270	LwK 4.8	33,37	-1,130	-0,99	-1,16	
271	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
272	LwK 4.8	35,50	1,000	0,87	1,03	
273	LwK 4.8	34,90	0,400	0,35	0,41	
274	LwK 4.8	36,92	2,420	2,11	2,48	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	35,30	0,800	0,70	0,82	
276	LwK 4.8	35,45	0,950	0,83	0,97	
277	LwK 4.8	35,40	0,900	0,79	0,92	
278	LwK 4.8	33,87	-0,630	-0,55	-0,65	
279	LwK 4.8	36,50	2,000	1,75	2,05	
281	LwK 4.8	35,16	0,660	0,58	0,68	
282	LwK 4.8	33,60	-0,900	-0,79	-0,92	
283	LwK 4.8	35,90	1,400	1,22	1,44	
284	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
285	LwK 4.8	36,89	2,390	2,09	2,45	
286	LwK 4.8	32,10	-2,400	-2,10	-2,46	
320	LwK 4.8	35,40	0,900	0,79	0,92	
321	LwK 4.8	35,84	1,340	1,17	1,38	
339	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
346	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
351	LwK 4.8	34,00	-0,500	-0,44	-0,51	
366	LwK 4.8	36,60	2,100	1,83	2,16	
371	LwK 4.8	34,30	-0,200	-0,17	-0,21	

5.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
25	LwK 4.4	34,00	-1,000	-0,86	-1,01	
29	LwK 4.4	36,20	1,200	1,04	1,21	
31	LwK 4.4	34,40	-0,600	-0,52	-0,61	
39	LwK 4.3	34,60	-0,400	-0,35	-0,40	
48	LwK 4.3	33,50	-1,500	-1,29	-1,52	
60	LwK 4.4	34,20	-0,800	-0,69	-0,81	
62	LwK 4.4	37,26	2,260	1,95	2,29	
64	LwK 4.4	35,20	0,200	0,17	0,20	
66	LwK 4.4	35,00	0,000	0,00	0,00	
70	LwK 4.1	31,80	-3,200	-2,76	-3,24	
71	LwK 4.4	36,00	1,000	0,86	1,01	
78	LwK 4.4	36,10	1,100	0,95	1,11	
79	LwK 4.4	37,40	2,400	2,07	2,43	

5.4.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	35,13	0,130	0,11	0,13	
203	LwK 4.8	35,15	0,150	0,13	0,15	
204	LwK 4.8	34,56	-0,440	-0,38	-0,45	
206	LwK 4.8	39,79	4,790	4,13	4,85	
207	LwK 4.8	34,40	-0,600	-0,52	-0,61	
208	LwK 4.8	35,10	0,100	0,09	0,10	
209	LwK 4.8	33,88	-1,120	-0,97	-1,13	
210	LwK 4.8	35,55	0,550	0,47	0,56	
211	LwK 4.8	35,00	0,000	0,00	0,00	
213	LwK 4.8	34,72	-0,280	-0,24	-0,28	
215	LwK 4.8	34,30	-0,700	-0,60	-0,71	
216	LwK 4.8	35,30	0,300	0,26	0,30	
217	LwK 4.8	34,32	-0,680	-0,59	-0,69	
218	LwK 4.8	35,15	0,150	0,13	0,15	
219	LwK 4.8	34,20	-0,800	-0,69	-0,81	
220	LwK 4.8	35,10	0,100	0,09	0,10	
221	LwK 4.8	35,02	0,020	0,02	0,02	
222	LwK 4.8	36,58	1,580	1,36	1,60	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	LwK 4.8	34,14	-0,860	-0,74	-0,87	
224	LwK 4.8	34,60	-0,400	-0,35	-0,40	
225	LwK 4.8	34,00	-1,000	-0,86	-1,01	
226	LwK 4.8	35,77	0,770	0,66	0,78	
227	LwK 4.8	34,45	-0,550	-0,47	-0,56	
228	LwK 4.8	32,10	-2,900	-2,50	-2,94	
229	LwK 4.8	34,86	-0,140	-0,12	-0,14	
230	LwK 4.8	35,40	0,400	0,35	0,40	
231	LwK 4.8	32,94	-2,060	-1,78	-2,09	
232	LwK 4.8	33,10	-1,900	-1,64	-1,92	
234	LwK 4.8	35,00	0,000	0,00	0,00	
236	LwK 4.8	35,07	0,070	0,06	0,07	
238	LwK 4.8	34,87	-0,130	-0,11	-0,13	
239	LwK 4.8	35,20	0,200	0,17	0,20	
243	LwK 4.8	34,20	-0,800	-0,69	-0,81	
244	LwK 4.8	33,70	-1,300	-1,12	-1,32	
245	LwK 4.8	35,20	0,200	0,17	0,20	
246	LwK 4.8	34,10	-0,900	-0,78	-0,91	
247	LwK 4.8	34,38	-0,620	-0,53	-0,63	
248	LwK 4.8	34,80	-0,200	-0,17	-0,20	
249	LwK 4.8	32,81	-2,190	-1,89	-2,22	
250	LwK 4.8	33,64	-1,360	-1,17	-1,38	
251	LwK 4.8	35,10	0,100	0,09	0,10	
252	LwK 4.8	33,01	-1,990	-1,72	-2,01	
253	LwK 4.8	33,53	-1,470	-1,27	-1,49	
254	LwK 4.8	35,50	0,500	0,43	0,51	
256	LwK 4.8	35,80	0,800	0,69	0,81	
257	LwK 4.8	34,40	-0,600	-0,52	-0,61	
258	LwK 4.8	34,40	-0,600	-0,52	-0,61	
259	LwK 4.8	34,51	-0,490	-0,42	-0,50	
260	LwK 4.8	32,91	-2,090	-1,80	-2,12	
261	LwK 4.8	36,61	1,610	1,39	1,63	
262	LwK 4.8	36,30	1,300	1,12	1,32	
263	LwK 4.8	35,80	0,800	0,69	0,81	
264	LwK 4.8	33,30	-1,700	-1,47	-1,72	
265	LwK 4.8	35,30	0,300	0,26	0,30	
266	LwK 4.8	36,00	1,000	0,86	1,01	
267	LwK 4.8	33,75	-1,250	-1,08	-1,27	
268	LwK 4.8	33,59	-1,410	-1,22	-1,43	
269	LwK 4.8	34,80	-0,200	-0,17	-0,20	
270	LwK 4.8	33,37	-1,630	-1,41	-1,65	
271	LwK 4.8	35,20	0,200	0,17	0,20	
272	LwK 4.8	35,50	0,500	0,43	0,51	
273	LwK 4.8	34,90	-0,100	-0,09	-0,10	
274	LwK 4.8	36,92	1,920	1,66	1,94	
275	LwK 4.8	35,30	0,300	0,26	0,30	
276	LwK 4.8	35,45	0,450	0,39	0,46	
277	LwK 4.8	35,40	0,400	0,35	0,40	
278	LwK 4.8	33,87	-1,130	-0,97	-1,14	
279	LwK 4.8	36,50	1,500	1,29	1,52	
281	LwK 4.8	35,16	0,160	0,14	0,16	
282	LwK 4.8	33,60	-1,400	-1,21	-1,42	
283	LwK 4.8	35,90	0,900	0,78	0,91	
284	LwK 4.8	34,60	-0,400	-0,35	-0,40	
285	LwK 4.8	36,89	1,890	1,63	1,91	
286	LwK 4.8	32,10	-2,900	-2,50	-2,94	
320	LwK 4.8	35,40	0,400	0,35	0,40	
321	LwK 4.8	35,84	0,840	0,72	0,85	
339	LwK 4.8	35,20	0,200	0,17	0,20	
346	LwK 4.8	34,60	-0,400	-0,35	-0,40	
351	LwK 4.8	34,00	-1,000	-0,86	-1,01	
366	LwK 4.8	36,60	1,600	1,38	1,62	
371	LwK 4.8	34,30	-0,700	-0,60	-0,71	

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	35,82	1,320	1,15	1,35	
202	LwK 4.8	35,13	0,630	0,55	0,65	
203	LwK 4.8	35,18	0,680	0,59	0,70	
204	LwK 4.8	36,10	1,600	1,40	1,64	
205	LwK 4.8	38,60	4,100	3,58	4,21	
206	LwK 4.8	39,79	5,290	4,62	5,43	(**)
207	LwK 4.8	35,10	0,600	0,52	0,62	
208	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
209	LwK 4.8	33,88	-0,620	-0,54	-0,64	
210	LwK 4.8	35,55	1,050	0,92	1,08	
211	LwK 4.8	33,60	-0,900	-0,79	-0,92	
213	LwK 4.8	35,36	0,860	0,75	0,88	
215	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
216	LwK 4.8	36,81	2,310	2,02	2,37	
217	LwK 4.8	32,62	-1,880	-1,64	-1,93	
218	LwK 4.8	40,10	5,600	4,89	5,75	(**)
219	LwK 4.8	34,40	-0,100	-0,09	-0,10	
220	LwK 4.8	34,90	0,400	0,35	0,41	
221	LwK 4.8	34,46	-0,040	-0,03	-0,04	
222	LwK 4.8	37,55	3,050	2,66	3,13	
223	LwK 4.8	32,76	-1,740	-1,52	-1,79	
224	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
225	LwK 4.8	34,90	0,400	0,35	0,41	
226	LwK 4.8	34,76	0,260	0,23	0,27	
227	LwK 4.8	35,61	1,110	0,97	1,14	
228	LwK 4.8	34,68	0,180	0,16	0,18	
229	LwK 4.8	34,49	-0,010	-0,01	-0,01	
230	LwK 4.8	33,67	-0,830	-0,72	-0,85	
231	LwK 4.8	34,49	-0,010	-0,01	-0,01	
232	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	
234	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	
236	LwK 4.8	34,57	0,070	0,06	0,07	
238	LwK 4.8	34,32	-0,180	-0,16	-0,18	
239	LwK 4.8	34,50	0,000	0,00	0,00	
243	LwK 4.8	33,00	-1,500	-1,31	-1,54	
244	LwK 4.8	33,70	-0,800	-0,70	-0,82	
245	LwK 4.8	35,70	1,200	1,05	1,23	
246	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
247	LwK 4.8	35,91	1,410	1,23	1,45	
248	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
249	LwK 4.8	35,52	1,020	0,89	1,05	
251	LwK 4.8	35,20	0,700	0,61	0,72	
252	LwK 4.8	35,70	1,200	1,05	1,23	
253	LwK 4.8	33,53	-0,970	-0,85	-1,00	
254	LwK 4.8	35,86	1,360	1,19	1,40	
256	LwK 4.8	35,40	0,900	0,79	0,92	
257	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
258	LwK 4.8	34,00	-0,500	-0,44	-0,51	
259	LwK 4.8	35,19	0,690	0,60	0,71	
260	LwK 4.8	34,11	-0,390	-0,34	-0,40	
261	LwK 4.8	35,53	1,030	0,90	1,06	
262	LwK 4.8	34,84	0,340	0,30	0,35	
263	LwK 4.8	34,90	0,400	0,35	0,41	
264	LwK 4.8	33,90	-0,600	-0,52	-0,62	
265	LwK 4.8	35,30	0,800	0,70	0,82	
266	LwK 4.8	36,10	1,600	1,40	1,64	
267	LwK 4.8	35,85	1,350	1,18	1,39	
268	LwK 4.8	34,42	-0,080	-0,07	-0,08	
269	LwK 4.8	36,40	1,900	1,66	1,95	
270	LwK 4.8	33,39	-1,110	-0,97	-1,14	
271	LwK 4.8	34,65	0,150	0,13	0,15	
273	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	35,03	0,530	0,46	0,54	
275	LwK 4.8	34,30	-0,200	-0,17	-0,21	
276	LwK 4.8	36,79	2,290	2,00	2,35	
277	LwK 4.8	35,70	1,200	1,05	1,23	
279	LwK 4.8	36,10	1,600	1,40	1,64	
281	LwK 4.8	34,89	0,390	0,34	0,40	
282	LwK 4.8	33,30	-1,200	-1,05	-1,23	
283	LwK 4.8	35,03	0,530	0,46	0,54	
284	LwK 4.8	34,60	0,100	0,09	0,10	
285	LwK 4.8	36,89	2,390	2,09	2,45	
286	LwK 4.8	32,05	-2,450	-2,14	-2,51	
313	LwK 4.8	34,18	-0,320	-0,28	-0,33	
320	LwK 4.8	34,80	0,300	0,26	0,31	
321	LwK 4.8	34,55	0,050	0,04	0,05	
339	LwK 4.8	35,40	0,900	0,79	0,92	
345	LwK 4.8	35,07	0,570	0,50	0,58	
346	LwK 4.8	32,00	-2,500	-2,18	-2,57	
351	LwK 4.8	35,00	0,500	0,44	0,51	
366	LwK 4.8	35,60	1,100	0,96	1,13	
371	LwK 4.8	33,95	-0,550	-0,48	-0,56	

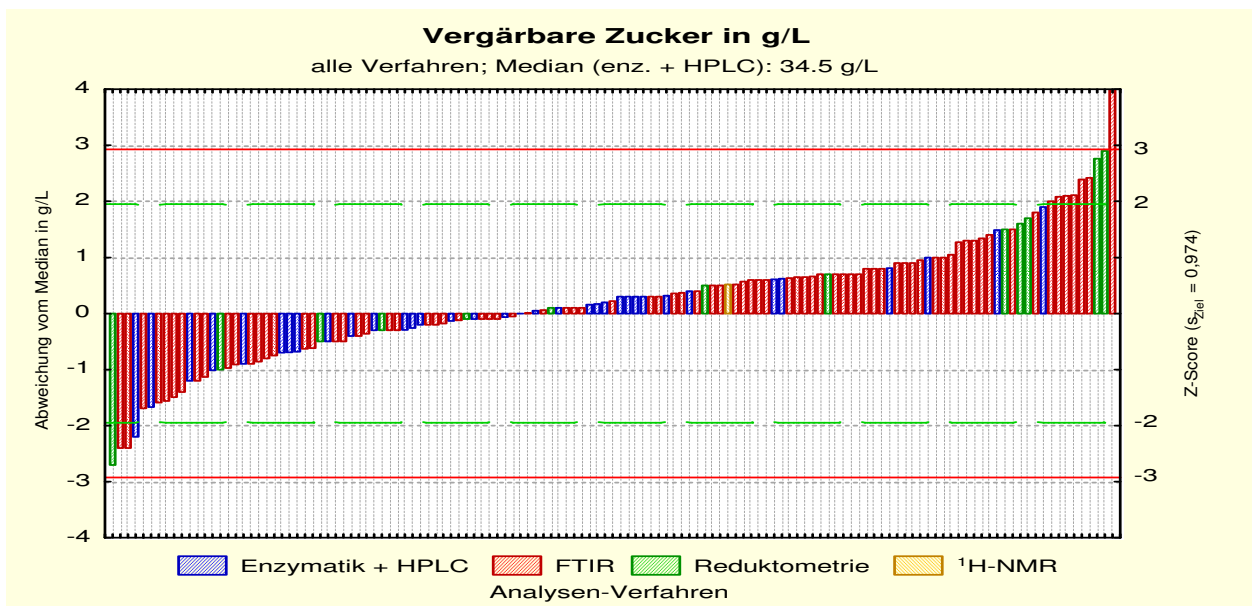
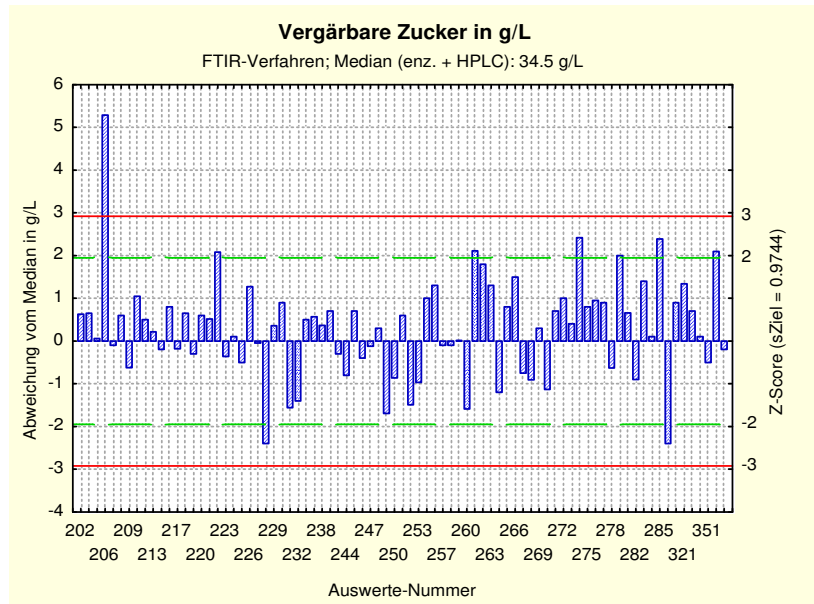
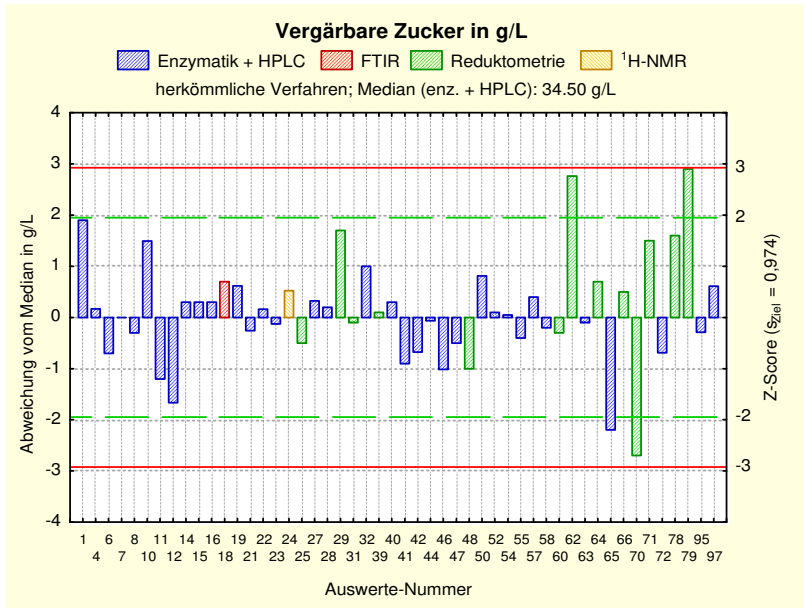
5.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

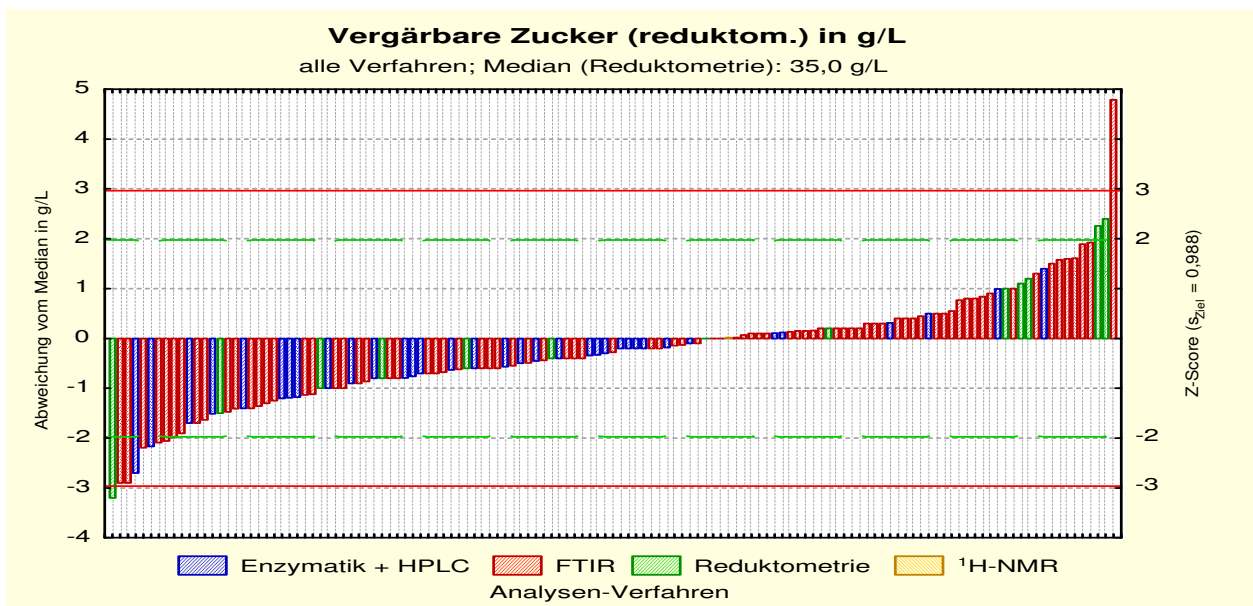
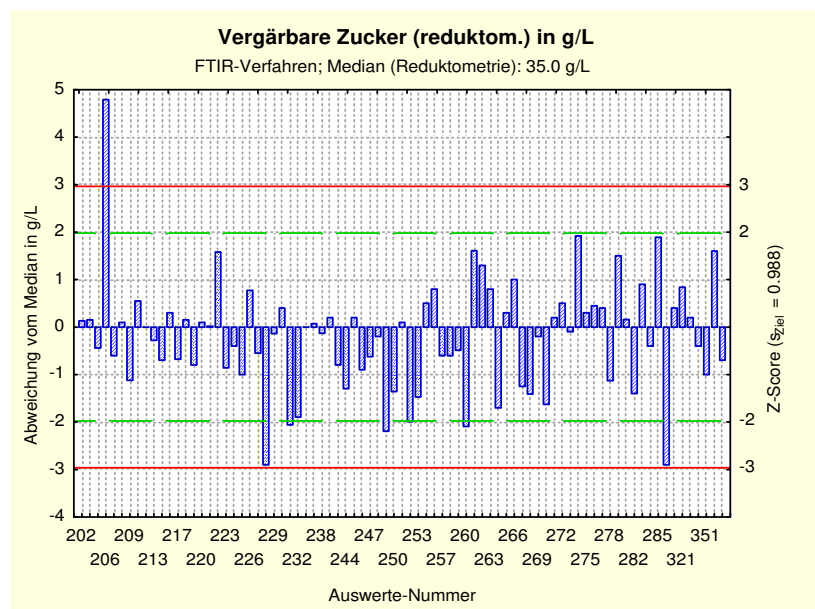
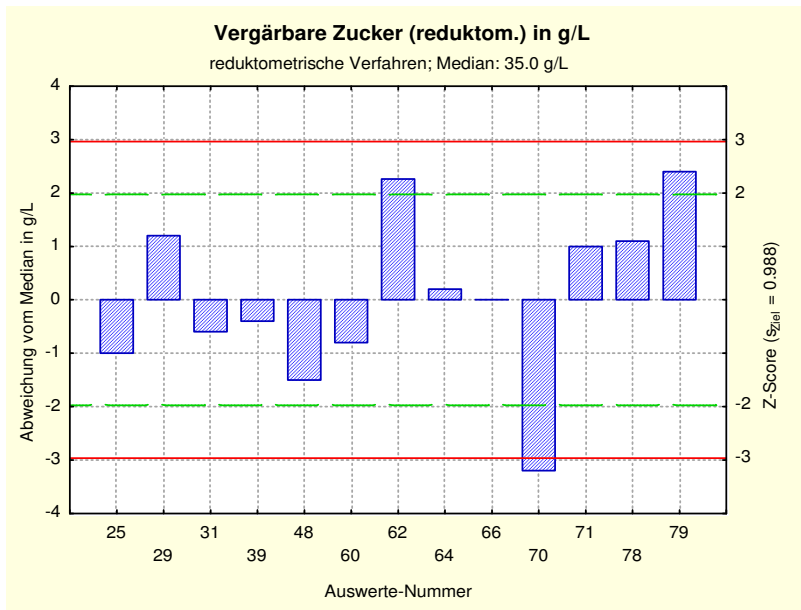
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymat. alle Daten	Reduktometrisch alle Daten
Gültige Werte	35	13
Minimalwert	32,30	31,80
Mittelwert	34,435	35,051
Median	34,500	35,000
Maximalwert	36,40	37,40
Standardabweichung (s _L)	0,802	1,559
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,136	0,432
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,145	1,159
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,974	0,988
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,584)	(0,584)
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,70	1,34
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,82	1,58
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(1,37)	(1,69)
Quotient (u _M /s _H)	0,12	0,37
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,14	0,44
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,23)	(0,74)

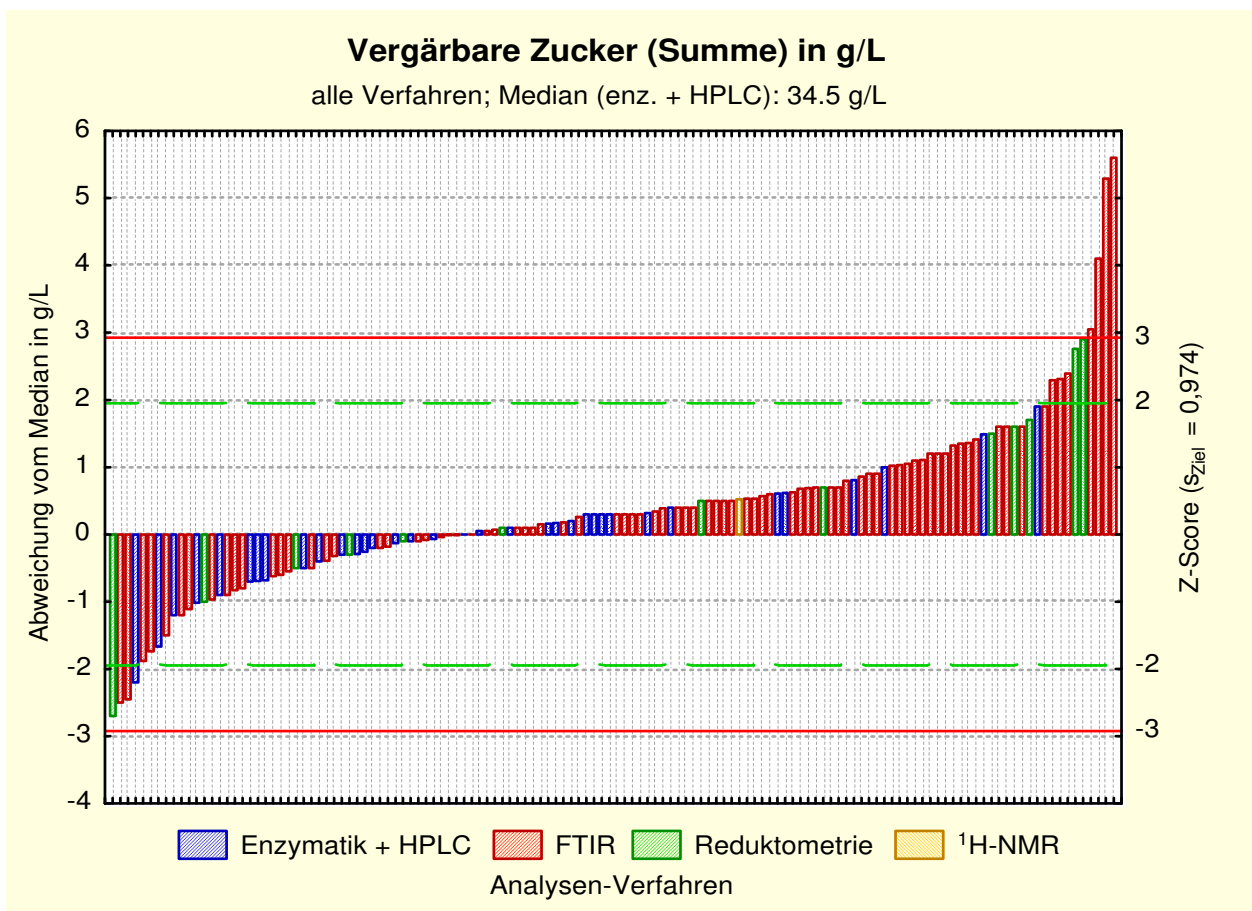
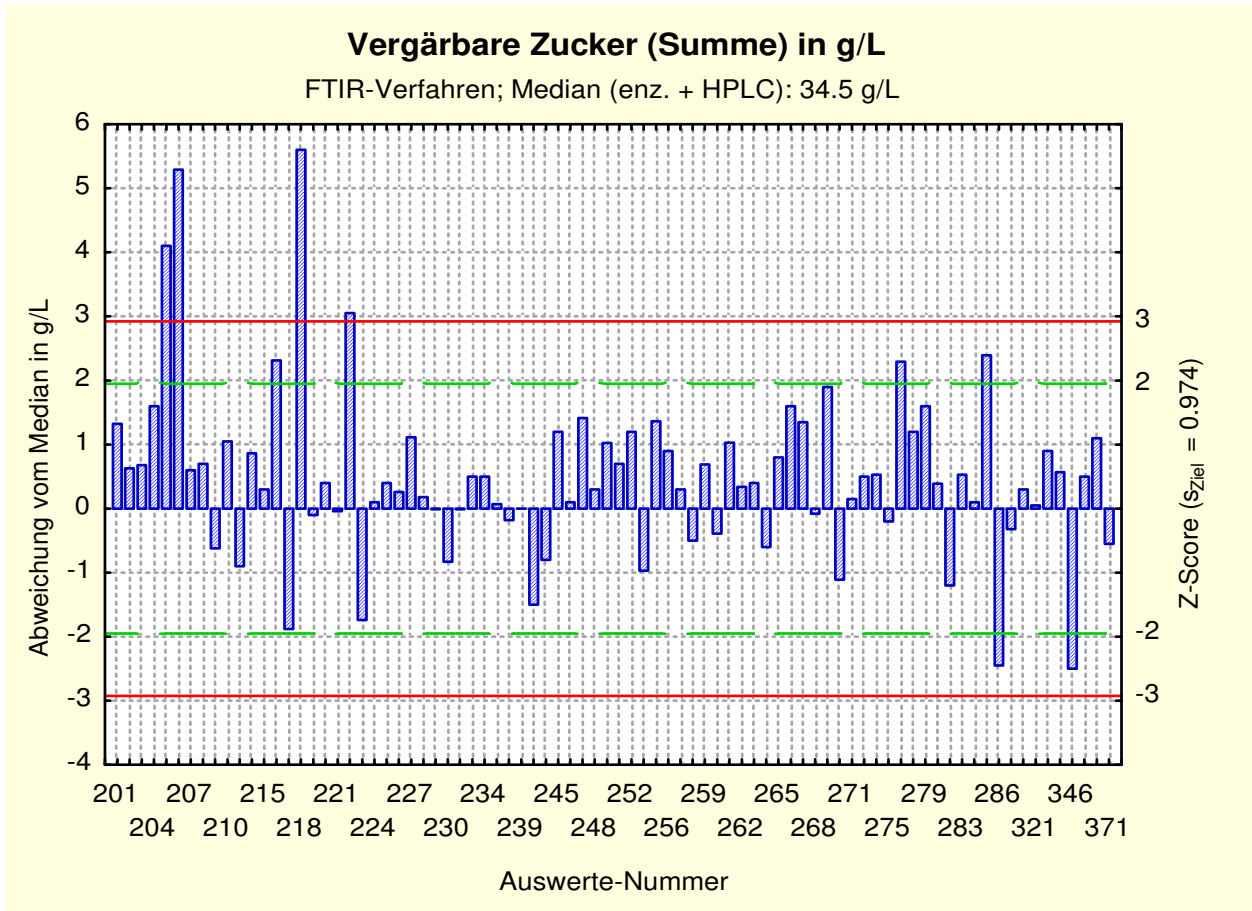
^{*)} Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp herk} bewertet.

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	31,800	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	34,050	0,882
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	10	35,576	1,375
	reduktometrische Verfahren	13	35,109	1,565
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	24	34,383	0,831
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	34,583	0,384
	enzymatische und HPLC-Verfahren	35	34,448	0,673
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	82	34,783	1,024
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	83	34,933	0,958
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	35,020	







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	17,99	1,276	2,06	2,58	
02	enzymat. Hand	16,92	0,206	0,33	0,42	
04	HPLC	16,63	-0,084	-0,14	-0,17	
05	enzymat., autom.	17,30	0,586	0,95	1,19	
06	enzymat., autom.	16,31	-0,404	-0,65	-0,82	
07	enzymat. Hand	16,60	-0,114	-0,18	-0,23	
08	enzymat. Hand	16,60	-0,114	-0,18	-0,23	
10	enzymat. Hand	17,52	0,806	1,30	1,63	
11	enzymat., autom.	15,80	-0,914	-1,48	-1,85	
12	enzymat., autom.	16,21	-0,504	-0,81	-1,02	
14	HPLC	16,94	0,223	0,36	0,45	
15	enzymat., autom.	16,82	0,106	0,17	0,21	
16	enzymat., autom.	16,90	0,186	0,30	0,38	
19	HPLC	17,07	0,356	0,58	0,72	
21	HPLC	16,64	-0,074	-0,12	-0,15	
22	enzymat., autom.	16,86	0,146	0,24	0,30	
23	HPLC	16,77	0,056	0,09	0,11	
24	NMR	17,16	0,446	0,72	0,90	
27	enzymat., autom.	17,24	0,526	0,85	1,06	
28	HPLC	17,50	0,786	1,27	1,59	
32	enzymat., autom.	16,70	-0,014	-0,02	-0,03	
40	enzymat., autom.	16,90	0,186	0,30	0,38	
41	HPLC	16,40	-0,314	-0,51	-0,64	
42	enzymat., autom.	16,43	-0,284	-0,46	-0,57	
44	HPLC	16,78	0,069	0,11	0,14	
46	enzymat., autom.	16,56	-0,157	-0,25	-0,32	
47	enzymat., autom.	16,55	-0,164	-0,27	-0,33	
50	enzymat., autom.	17,40	0,686	1,11	1,39	
52	HPLC	16,87	0,156	0,25	0,32	
54	enzymat., autom.	16,94	0,226	0,37	0,46	
55	enzymat., autom.	16,70	-0,014	-0,02	-0,03	
57	enzymat., autom.	16,80	0,086	0,14	0,17	
58	enzymat., autom.	16,67	-0,048	-0,08	-0,10	
60	enzymat., autom.	16,48	-0,234	-0,38	-0,47	
63	HPLC	16,73	0,014	0,02	0,03	
65	enzymat., autom.	16,20	-0,514	-0,83	-1,04	
66	enzymat. Hand	16,68	-0,034	-0,05	-0,07	
70	enzymat., autom.	17,95	1,236	2,00	2,50	
72	enzymat., autom.	16,35	-0,364	-0,59	-0,74	
79	enzymat. Hand	16,62	-0,094	-0,15	-0,19	
95	enzymat., autom.	16,63	-0,084	-0,14	-0,17	
97	HPLC	17,09	0,376	0,61	0,76	
99	enzymat., autom.	16,50	-0,214	-0,35	-0,43	

5.5.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	42
Minimalwert	15,80
Mittelwert	16,799
Median	16,714
Maximalwert	17,99
Standardabweichung (s_L)	0,436
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,067
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,619
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,494
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,408)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,71
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,88
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(1,07)
Quotient (u_M/s_H)	0,11
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,14
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,17)

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

5.5.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	17,62	0,906	1,46	1,83	
202	FTIR	16,88	0,166	0,27	0,34	
203	FTIR	17,17	0,456	0,74	0,92	
204	FTIR	17,54	0,826	1,33	1,67	
205	FTIR	16,80	0,086	0,14	0,17	
206	FTIR	19,27	2,556	4,13	5,17	(**)
207	FTIR	16,80	0,086	0,14	0,17	
208	FTIR	16,80	0,086	0,14	0,17	
209	FTIR	16,48	-0,234	-0,38	-0,47	
210	FTIR	16,71	-0,004	-0,01	-0,01	
211	FTIR	16,10	-0,614	-0,99	-1,24	
213	FTIR	16,90	0,186	0,30	0,38	
215	FTIR	17,70	0,986	1,59	2,00	
216	FTIR	18,83	2,116	3,42	4,28	
217	FTIR	15,90	-0,814	-1,32	-1,65	
218	FTIR	18,13	1,416	2,29	2,87	
219	FTIR	16,60	-0,114	-0,18	-0,23	
220	FTIR	17,00	0,286	0,46	0,58	
221	FTIR	16,56	-0,154	-0,25	-0,31	
222	FTIR	18,40	1,686	2,72	3,41	
223	FTIR	16,06	-0,654	-1,06	-1,32	
224	FTIR	17,10	0,386	0,62	0,78	
225	FTIR	16,90	0,186	0,30	0,38	
226	FTIR	16,91	0,196	0,32	0,40	
227	FTIR	17,57	0,856	1,38	1,73	
228	FTIR	16,41	-0,304	-0,49	-0,62	
229	FTIR	17,23	0,516	0,83	1,04	
230	FTIR	17,05	0,336	0,54	0,68	
231	FTIR	15,54	-1,174	-1,90	-2,38	
232	FTIR	16,60	-0,114	-0,18	-0,23	
234	FTIR	17,64	0,926	1,50	1,87	
236	FTIR	17,01	0,296	0,48	0,60	
238	FTIR	17,29	0,576	0,93	1,17	
239	FTIR	18,40	1,686	2,72	3,41	
243	FTIR	15,90	-0,814	-1,32	-1,65	
244	FTIR	16,10	-0,614	-0,99	-1,24	
245	FTIR	17,50	0,786	1,27	1,59	
246	FTIR	15,90	-0,814	-1,32	-1,65	
247	FTIR	17,29	0,576	0,93	1,17	
248	FTIR	16,50	-0,214	-0,35	-0,43	
249	FTIR	17,10	0,386	0,62	0,78	
251	FTIR	17,00	0,286	0,46	0,58	
252	FTIR	17,52	0,806	1,30	1,63	
253	FTIR	16,11	-0,604	-0,98	-1,22	
254	FTIR	17,58	0,866	1,40	1,75	
256	FTIR	17,60	0,886	1,43	1,79	
257	FTIR	17,50	0,786	1,27	1,59	
258	FTIR	16,10	-0,614	-0,99	-1,24	
259	FTIR	17,25	0,536	0,87	1,08	
260	FTIR	16,79	0,076	0,12	0,15	
261	FTIR	17,41	0,696	1,12	1,41	
262	FTIR	17,44	0,726	1,17	1,47	
263	FTIR	16,60	-0,114	-0,18	-0,23	
264	FTIR	17,50	0,786	1,27	1,59	
265	FTIR	17,40	0,686	1,11	1,39	
266	FTIR	17,40	0,686	1,11	1,39	
267	FTIR	17,20	0,486	0,79	0,98	
268	FTIR	16,63	-0,084	-0,14	-0,17	
269	FTIR	17,60	0,886	1,43	1,79	
270	FTIR	15,67	-1,044	-1,69	-2,11	
271	FTIR	16,95	0,236	0,38	0,48	
273	FTIR	18,10	1,386	2,24	2,80	
274	FTIR	17,77	1,056	1,71	2,14	

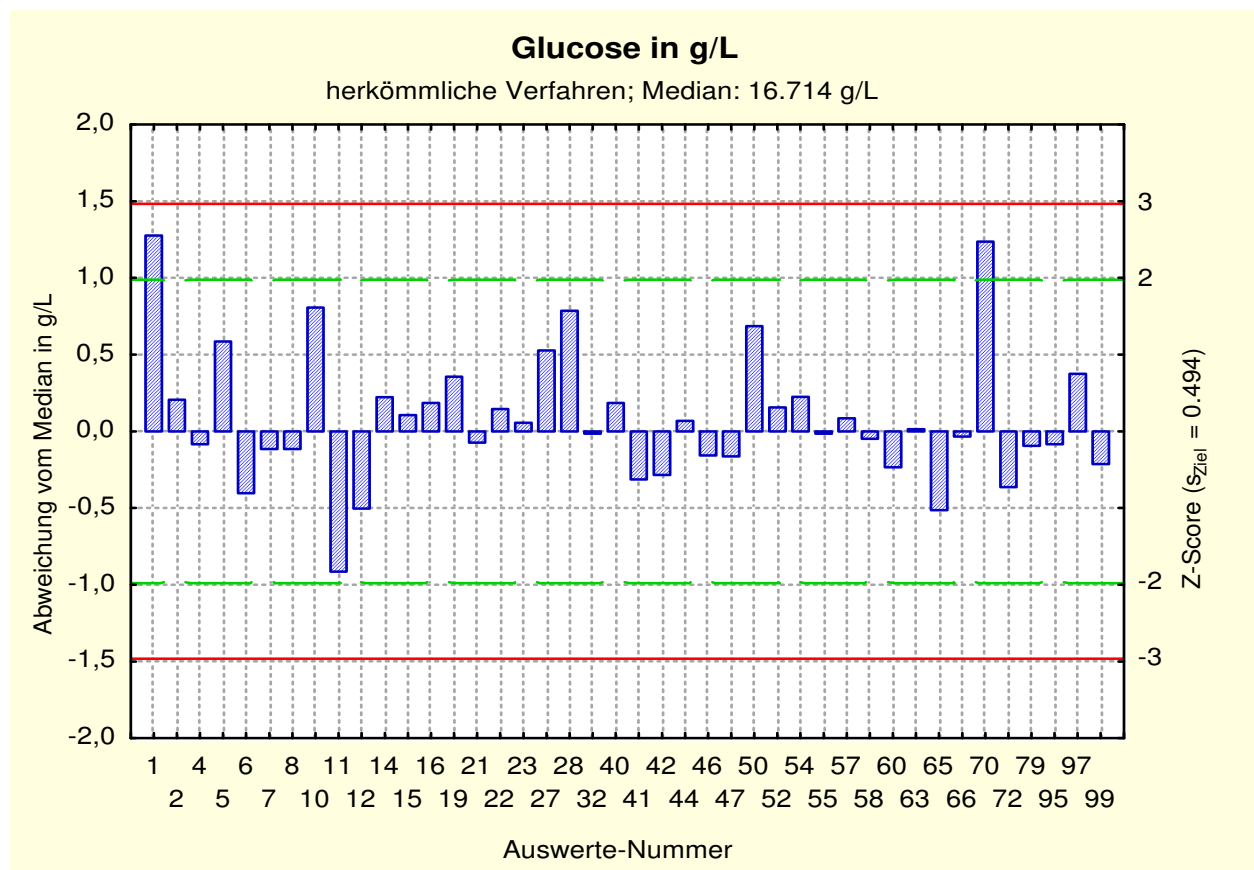
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score vom Median der herkömmlichen Werte ab.

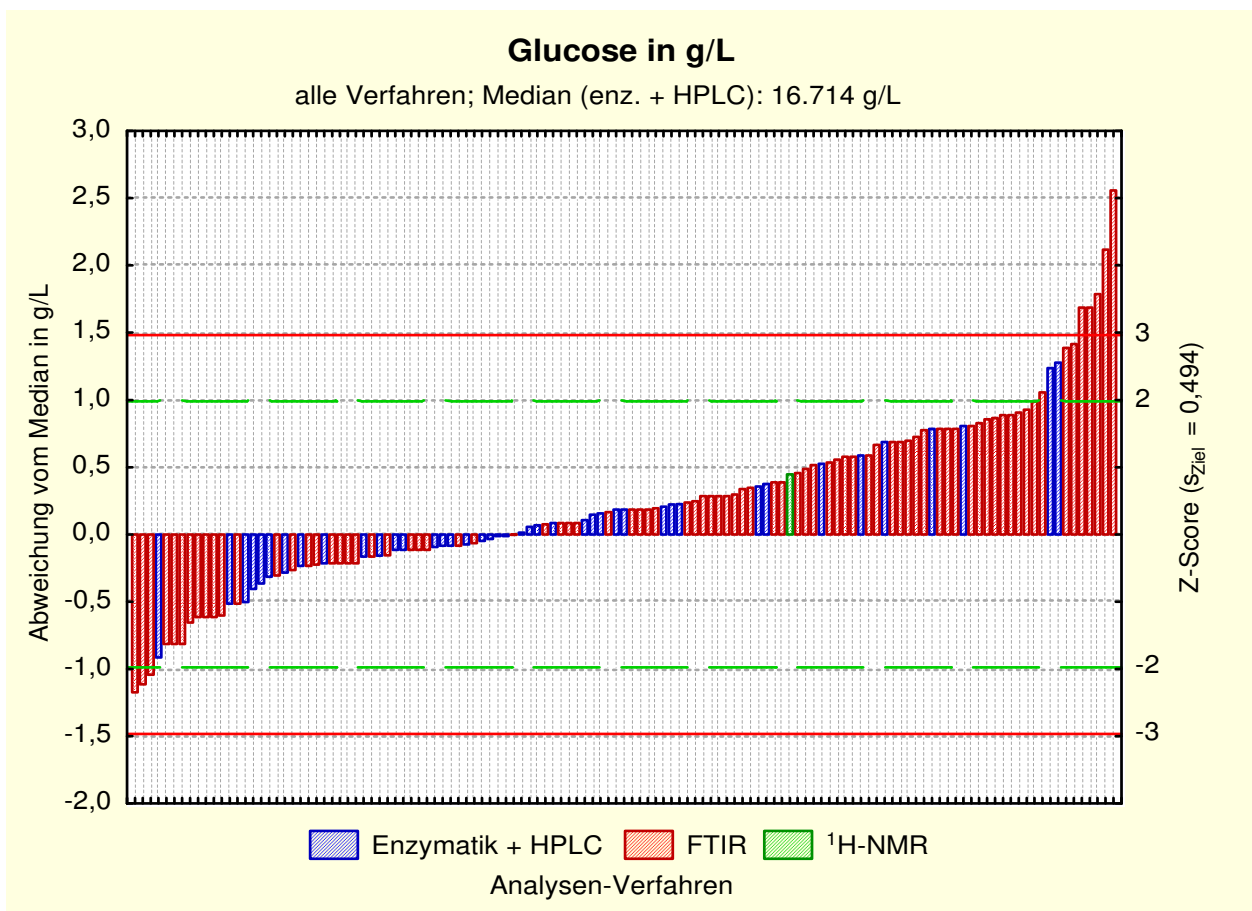
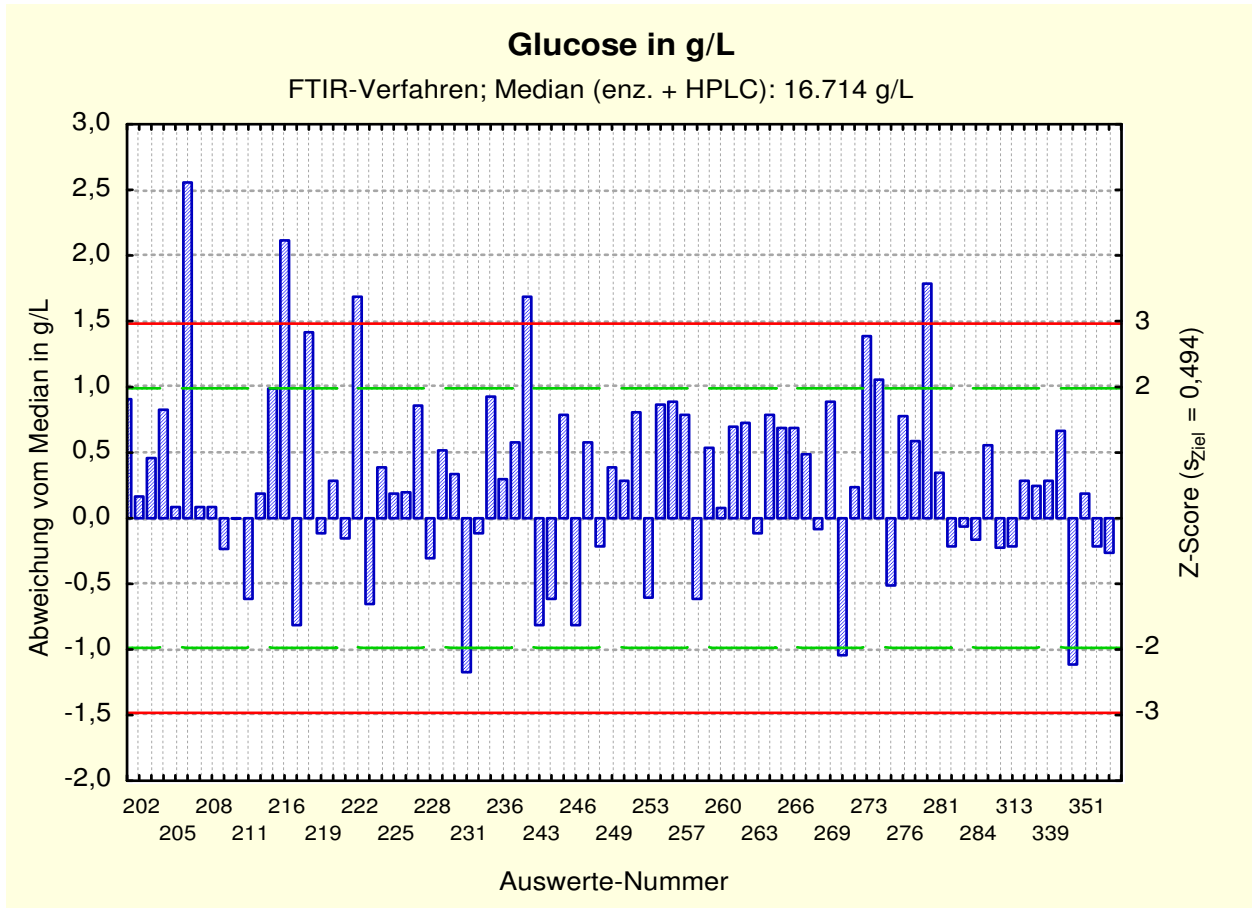
Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	16,20	-0,514	-0,83	-1,04	
276	FTIR	17,49	0,776	1,25	1,57	
277	FTIR	17,30	0,586	0,95	1,19	
279	FTIR	18,50	1,786	2,89	3,61	
281	FTIR	17,06	0,346	0,56	0,70	
282	FTIR	16,50	-0,214	-0,35	-0,43	
283	FTIR	16,65	-0,064	-0,10	-0,13	
284	FTIR	16,55	-0,164	-0,27	-0,33	
285	FTIR	17,27	0,556	0,90	1,13	
286	FTIR	16,49	-0,224	-0,36	-0,45	
313	FTIR	16,50	-0,214	-0,35	-0,43	
320	FTIR	17,00	0,286	0,46	0,58	
321	FTIR	16,96	0,246	0,40	0,50	
339	FTIR	17,00	0,286	0,46	0,58	
345	FTIR	17,38	0,666	1,08	1,35	
346	FTIR	15,60	-1,114	-1,80	-2,25	
351	FTIR	16,90	0,186	0,30	0,38	
366	FTIR	16,50	-0,214	-0,35	-0,43	
371	FTIR	16,45	-0,264	-0,43	-0,53	

5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	11	16,835	0,265
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	24	16,696	0,399
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	7	16,932	0,521
	herkömmliche Verfahren	42	16,766	0,365
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	16,992	0,657
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	17,160	





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	18,41	0,780	1,20	1,50	
02	enzymat. Hand	18,08	0,450	0,69	0,87	
04	HPLC	18,04	0,410	0,63	0,79	
05	enzymat., autom.	17,76	0,130	0,20	0,25	
06	enzymat., autom.	17,44	-0,190	-0,29	-0,37	
07	enzymat. Hand	17,25	-0,380	-0,59	-0,73	
08	enzymat. Hand	17,60	-0,030	-0,05	-0,06	
10	enzymat. Hand	18,47	0,840	1,30	1,62	
11	enzymat., autom.	17,48	-0,150	-0,23	-0,29	
12	enzymat., autom.	16,62	-1,009	-1,56	-1,94	
14	HPLC	17,87	0,239	0,37	0,46	
15	enzymat., autom.	18,03	0,400	0,62	0,77	
16	enzymat., autom.	17,90	0,270	0,42	0,52	
19	HPLC	18,05	0,420	0,65	0,81	
21	HPLC	17,60	-0,030	-0,05	-0,06	
22	enzymat., autom.	17,80	0,170	0,26	0,33	
23	HPLC	17,60	-0,030	-0,05	-0,06	
24	NMR	17,86	0,230	0,36	0,44	
27	enzymat., autom.	17,58	-0,050	-0,08	-0,10	
28	HPLC	17,20	-0,430	-0,66	-0,83	
32	enzymat., autom.	18,60	0,970	1,50	1,87	
40	enzymat., autom.	17,90	0,270	0,42	0,52	
41	HPLC	17,15	-0,480	-0,74	-0,93	
42	enzymat., autom.	17,39	-0,240	-0,37	-0,46	
44	HPLC	17,65	0,021	0,03	0,04	
46	enzymat., autom.	16,93	-0,700	-1,08	-1,35	
47	enzymat., autom.	17,45	-0,180	-0,28	-0,35	
50	enzymat., autom.	17,91	0,280	0,43	0,54	
52	HPLC	17,76	0,130	0,20	0,25	
54	enzymat., autom.	17,61	-0,020	-0,03	-0,04	
55	enzymat., autom.	17,69	0,060	0,09	0,12	
57	enzymat., autom.	17,90	0,270	0,42	0,52	
58	enzymat., autom.	17,63	0,000	0,00	0,00	
60	enzymat., autom.	17,56	-0,070	-0,11	-0,13	
63	HPLC	17,64	0,013	0,02	0,03	
65	enzymat., autom.	17,10	-0,530	-0,82	-1,02	
66	enzymat. Hand	17,51	-0,120	-0,19	-0,23	
70	enzymat., autom.	19,06	1,430	2,21	2,76	
72	enzymat., autom.	17,46	-0,170	-0,26	-0,33	
79	enzymat. Hand	17,08	-0,550	-0,85	-1,06	
95	enzymat., autom.	17,58	-0,050	-0,08	-0,10	
97	HPLC	18,02	0,390	0,60	0,75	

5.6.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	41
Minimalwert	16,62
Mittelwert	17,692
Median	17,630
Maximalwert	19,06
Standardabweichung (s_L)	0,455
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,071
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,648
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,519
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\overline{U}_{FTIR}}$)	(0,330)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,70
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,88
Quotient ($s_L/s_{\overline{U}_{FTIR}}$)	(1,38)
Quotient (u_M/s_H)	0,11
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,14
Quotient ($u_M/s_{\overline{U}_{FTIR}}$)	(0,22)

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

5.6.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	18,20	0,570	0,88	1,10	
202	FTIR	18,25	0,620	0,96	1,19	
203	FTIR	18,01	0,380	0,59	0,73	
204	FTIR	18,56	0,930	1,44	1,79	
205	FTIR	21,80	4,170	6,44	8,04	(**)
206	FTIR	20,52	2,890	4,46	5,57	(**)
207	FTIR	18,30	0,670	1,03	1,29	
208	FTIR	18,40	0,770	1,19	1,48	
209	FTIR	17,40	-0,230	-0,36	-0,44	
210	FTIR	18,84	1,210	1,87	2,33	
211	FTIR	17,50	-0,130	-0,20	-0,25	
213	FTIR	18,46	0,830	1,28	1,60	
215	FTIR	17,10	-0,530	-0,82	-1,02	
216	FTIR	17,98	0,350	0,54	0,67	
217	FTIR	16,72	-0,910	-1,41	-1,75	
218	FTIR	21,97	4,340	6,70	8,36	(**)
219	FTIR	17,80	0,170	0,26	0,33	
220	FTIR	17,90	0,270	0,42	0,52	
221	FTIR	17,90	0,270	0,42	0,52	
222	FTIR	19,15	1,520	2,35	2,93	
223	FTIR	16,70	-0,930	-1,44	-1,79	
224	FTIR	17,50	-0,130	-0,20	-0,25	
225	FTIR	18,00	0,370	0,57	0,71	
226	FTIR	17,85	0,220	0,34	0,42	
227	FTIR	18,04	0,410	0,63	0,79	
228	FTIR	18,27	0,640	0,99	1,23	
229	FTIR	17,26	-0,370	-0,57	-0,71	
230	FTIR	16,62	-1,010	-1,56	-1,95	
231	FTIR	18,95	1,320	2,04	2,54	
232	FTIR	18,40	0,770	1,19	1,48	
234	FTIR	17,36	-0,270	-0,42	-0,52	
236	FTIR	17,56	-0,070	-0,11	-0,13	
238	FTIR	17,03	-0,600	-0,93	-1,16	
239	FTIR	16,10	-1,530	-2,36	-2,95	
243	FTIR	17,10	-0,530	-0,82	-1,02	
244	FTIR	17,60	-0,030	-0,05	-0,06	
245	FTIR	18,20	0,570	0,88	1,10	
246	FTIR	18,70	1,070	1,65	2,06	
247	FTIR	18,62	0,990	1,53	1,91	
248	FTIR	18,30	0,670	1,03	1,29	
249	FTIR	18,42	0,790	1,22	1,52	
251	FTIR	18,20	0,570	0,88	1,10	
252	FTIR	18,18	0,550	0,85	1,06	
253	FTIR	17,42	-0,210	-0,32	-0,40	
254	FTIR	18,28	0,650	1,00	1,25	
256	FTIR	17,80	0,170	0,26	0,33	
257	FTIR	17,30	-0,330	-0,51	-0,64	
258	FTIR	17,90	0,270	0,42	0,52	
259	FTIR	17,94	0,310	0,48	0,60	
260	FTIR	17,32	-0,310	-0,48	-0,60	
261	FTIR	18,12	0,490	0,76	0,94	
262	FTIR	17,40	-0,230	-0,36	-0,44	
263	FTIR	18,30	0,670	1,03	1,29	
264	FTIR	16,40	-1,230	-1,90	-2,37	
265	FTIR	17,90	0,270	0,42	0,52	
266	FTIR	18,70	1,070	1,65	2,06	
267	FTIR	18,65	1,020	1,58	1,97	
268	FTIR	17,79	0,160	0,25	0,31	
269	FTIR	18,80	1,170	1,81	2,25	
270	FTIR	17,72	0,090	0,14	0,17	
271	FTIR	17,70	0,070	0,11	0,13	
273	FTIR	16,90	-0,730	-1,13	-1,41	
274	FTIR	17,26	-0,370	-0,57	-0,71	
275	FTIR	18,10	0,470	0,73	0,91	

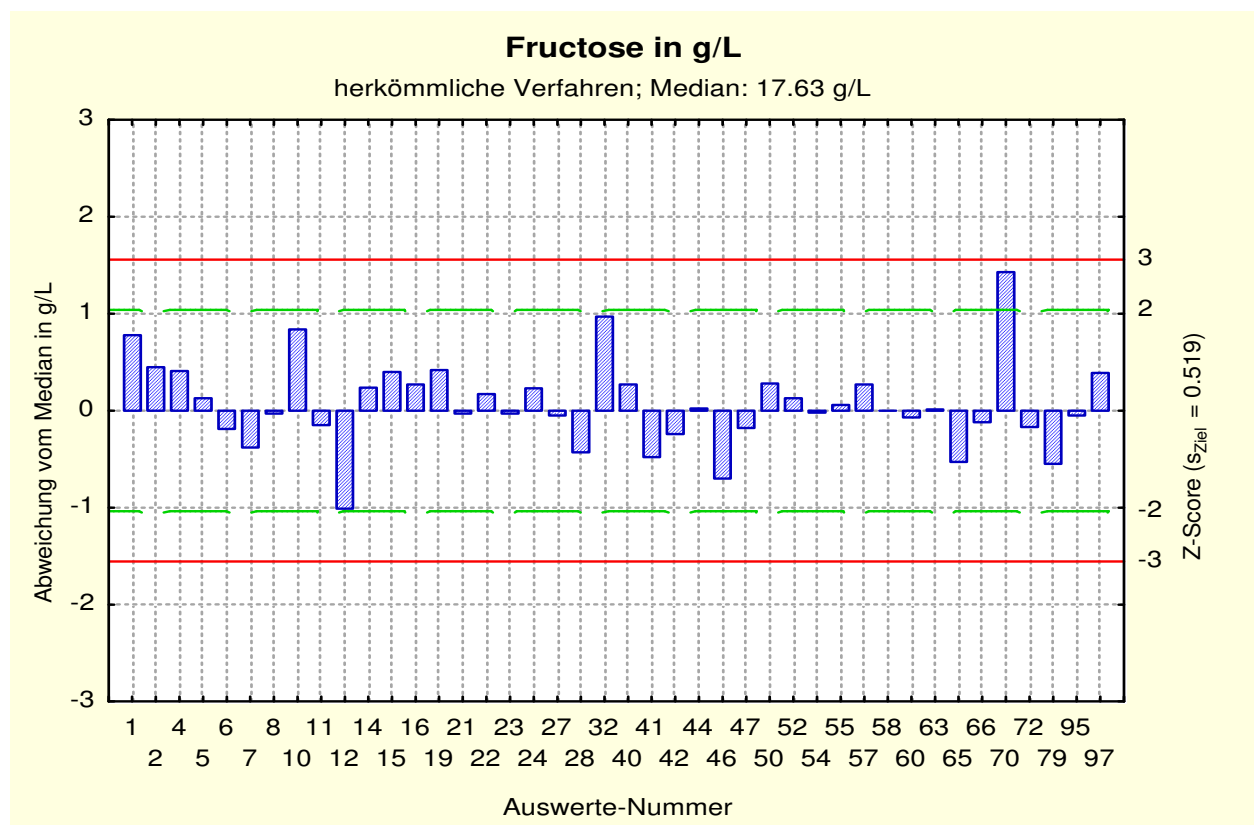
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score vom Median der herkömmlichen Werte ab.

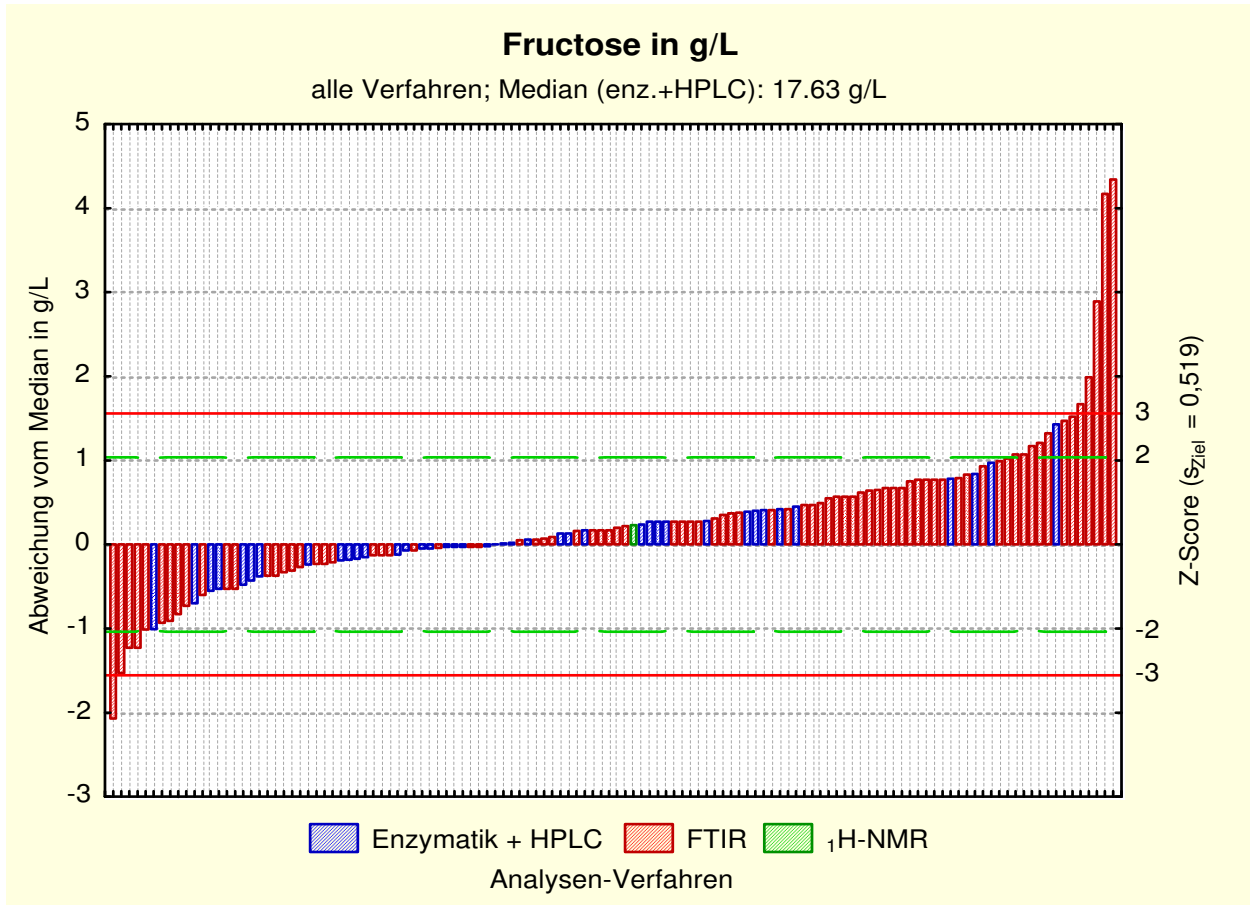
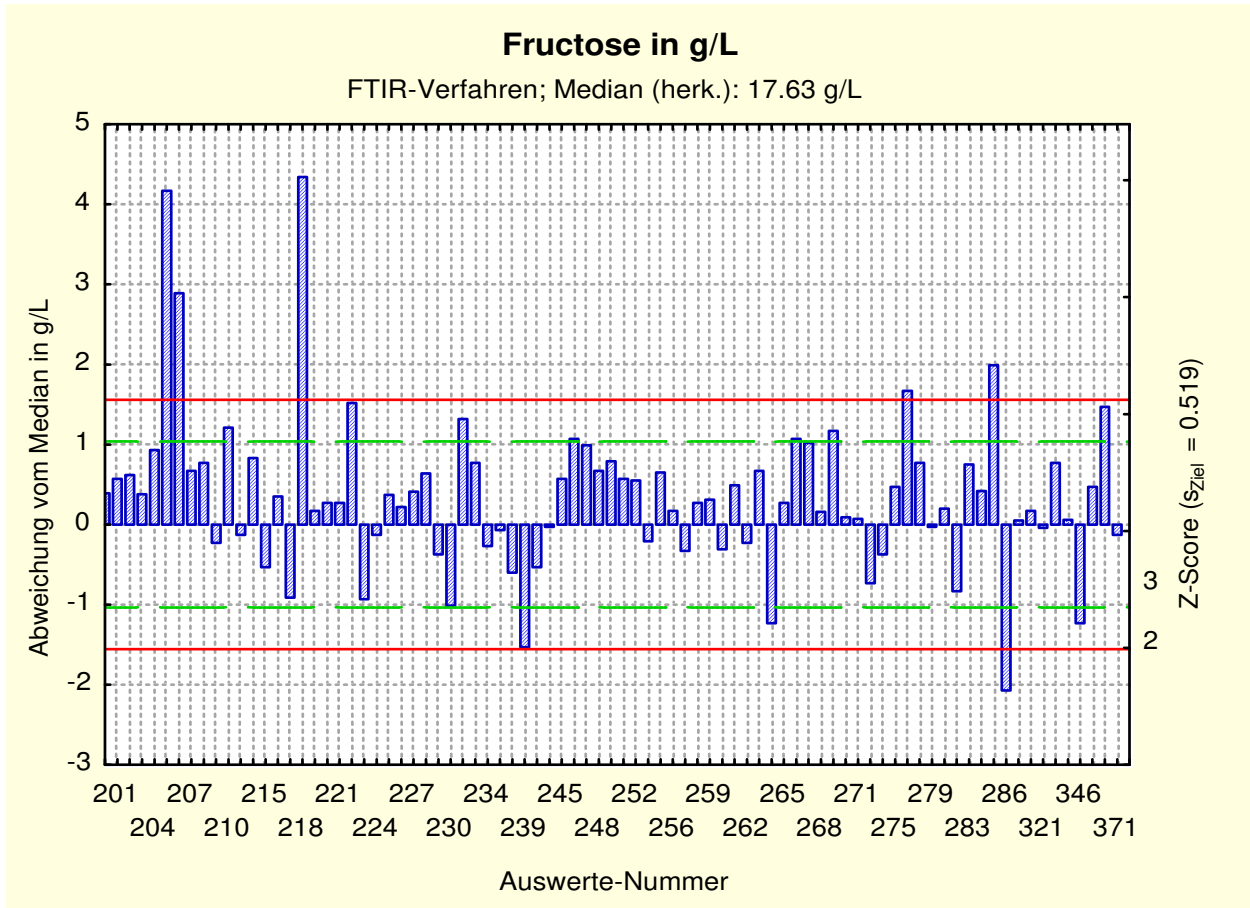
Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	19,30	1,670	2,58	3,22	
277	FTIR	18,40	0,770	1,19	1,48	
279	FTIR	17,60	-0,030	-0,05	-0,06	
281	FTIR	17,83	0,200	0,31	0,39	
282	FTIR	16,80	-0,830	-1,28	-1,60	
283	FTIR	18,38	0,750	1,16	1,45	
284	FTIR	18,05	0,420	0,65	0,81	
285	FTIR	19,62	1,990	3,07	3,83	
286	FTIR	15,56	-2,070	-3,20	-3,99	
313	FTIR	17,68	0,050	0,08	0,10	
320	FTIR	17,80	0,170	0,26	0,33	
321	FTIR	17,59	-0,040	-0,06	-0,08	
339	FTIR	18,40	0,770	1,19	1,48	
345	FTIR	17,69	0,060	0,09	0,12	
346	FTIR	16,40	-1,230	-1,90	-2,37	
351	FTIR	18,10	0,470	0,73	0,91	
366	FTIR	19,10	1,470	2,27	2,83	
371	FTIR	17,50	-0,130	-0,20	-0,25	

5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	17,692	0,345
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	17,642	0,340
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	7	17,771	0,628
	herkömmliche Verfahren	41	17,670	0,388
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	17,931	0,724
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	17,860	





5.7 Glycerin [g/L]

5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,25	0,43	1,69	
02	enzymat. Hand	5,59	-0,23	-0,92	
03	enzymat. Hand	5,69	-0,13	-0,53	
04	HPLC	5,85	0,03	0,10	
05	enzymat. autom.	5,81	-0,01	-0,05	
06	enzymat. autom.	5,86	0,04	0,14	
07	enzymat. Hand	5,70	-0,12	-0,49	
08	enzymat. Hand	5,54	-0,28	-1,12	
11	enzymat. autom.	5,64	-0,18	-0,73	
12	enzymat. autom.	6,93	1,11	4,37	
14	HPLC	5,82	-0,01	-0,03	
21	HPLC	5,81	-0,01	-0,05	
22	HPLC	5,97	0,15	0,58	
23	HPLC	5,79	-0,03	-0,13	
24	NMR	5,59	-0,23	-0,92	
27	HPLC	6,03	0,21	0,83	
28	HPLC	5,91	0,09	0,35	
41	HPLC	5,71	-0,11	-0,45	
44	HPLC	5,90	0,08	0,30	
47	enzymat. autom.	5,85	0,03	0,10	
52	HPLC	5,88	0,06	0,22	
60	enzymat. autom.	5,83	0,01	0,03	
63	HPLC	5,87	0,04	0,18	
70	enzymat. Hand	5,80	-0,02	-0,09	
79	enzymat. Hand	5,70	-0,12	-0,49	

5.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	5,5
Mittelwert	5,86
Median	5,82
Maximalwert	6,9
Standardabweichung (s_L)	0,271
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,055
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,253
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,07
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,78
Quotient (u_M/s_H)	0,22
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,16

5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	5,866	0,089
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	5,847	0,161
enzymat. Hand	Enzymatisch, manuell	7	5,706	0,144
	herkömmliche Verfahren	4	5,821	0,143
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	5,863	0,645
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	5,590	

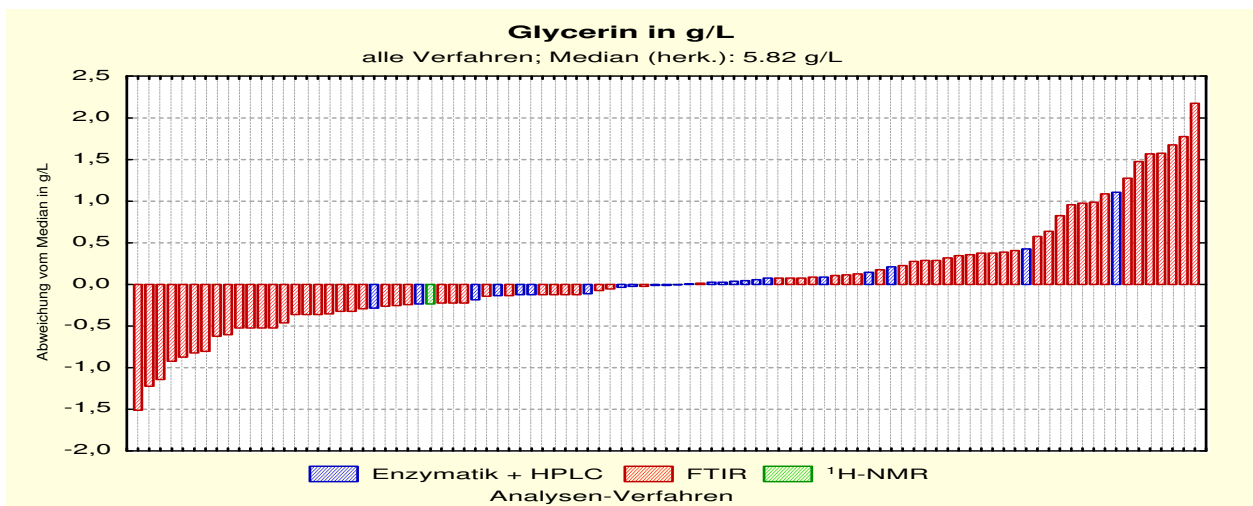
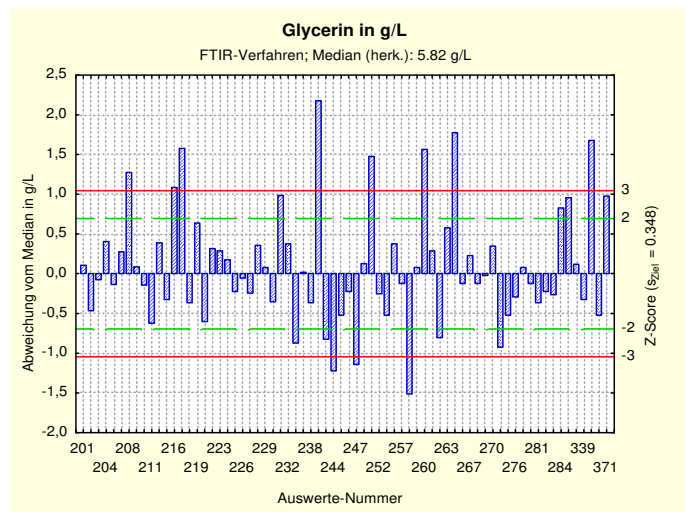
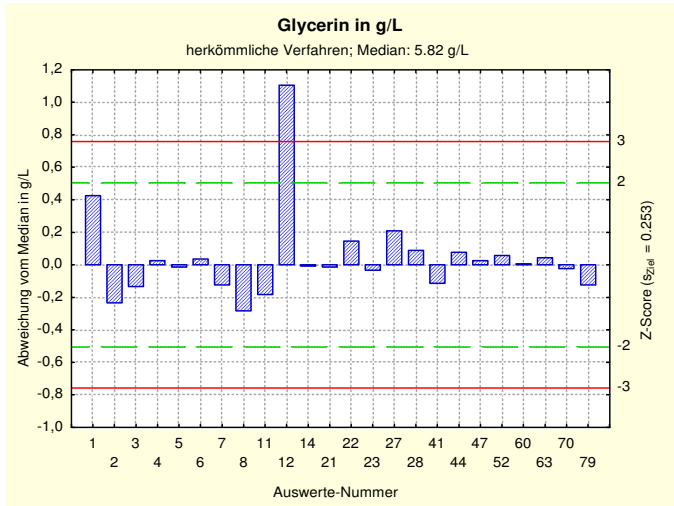
5.7.4 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,93	0,11	0,42	0,31	
202	FTIR	5,36	-0,46	-1,83	-1,33	
203	FTIR	5,75	-0,07	-0,29	-0,21	
204	FTIR	6,23	0,41	1,61	1,17	
206	FTIR	5,69	-0,13	-0,53	-0,38	
207	FTIR	6,10	0,28	1,09	0,79	
208	FTIR	7,10	1,28	5,05	3,67	
209	FTIR	5,91	0,09	0,34	0,25	
210	FTIR	5,68	-0,14	-0,57	-0,41	
211	FTIR	5,20	-0,62	-2,47	-1,79	
213	FTIR	6,21	0,39	1,53	1,11	
215	FTIR	5,50	-0,32	-1,28	-0,93	
216	FTIR	6,91	1,09	4,30	3,12	
217	FTIR	7,40	1,58	6,24	4,53	
218	FTIR	5,46	-0,36	-1,44	-1,04	
219	FTIR	6,46	0,64	2,52	1,83	
221	FTIR	5,22	-0,60	-2,39	-1,73	
222	FTIR	6,14	0,32	1,25	0,91	
223	FTIR	6,11	0,29	1,13	0,82	
224	FTIR	6,00	0,18	0,70	0,51	
225	FTIR	5,60	-0,22	-0,88	-0,64	
226	FTIR	5,77	-0,05	-0,21	-0,15	
227	FTIR	5,58	-0,24	-0,96	-0,70	
228	FTIR	6,18	0,36	1,41	1,02	
229	FTIR	5,90	0,08	0,30	0,22	
230	FTIR	5,47	-0,35	-1,40	-1,02	
231	FTIR	6,81	0,99	3,90	2,83	
232	FTIR	6,20	0,38	1,49	1,08	
234	FTIR	4,95	-0,87	-3,46	-2,51	
236	FTIR	5,84	0,02	0,07	0,05	
238	FTIR	5,46	-0,36	-1,44	-1,04	
239	FTIR	8,00	2,18	8,61	6,25	(**)
243	FTIR	5,00	-0,82	-3,26	-2,37	
244	FTIR	4,60	-1,22	-4,84	-3,52	
245	FTIR	5,30	-0,52	-2,07	-1,50	
246	FTIR	5,60	-0,22	-0,88	-0,64	
247	FTIR	4,68	-1,14	-4,53	-3,29	
248	FTIR	5,95	0,13	0,50	0,36	
251	FTIR	7,30	1,48	5,84	4,24	
252	FTIR	5,57	-0,25	-1,00	-0,73	
254	FTIR	5,30	-0,52	-2,07	-1,50	
256	FTIR	6,20	0,38	1,49	1,08	
257	FTIR	5,70	-0,12	-0,49	-0,35	
258	FTIR	4,31	-1,51	-5,99	-4,35	
259	FTIR	5,90	0,08	0,30	0,22	
260	FTIR	7,39	1,57	6,20	4,50	
261	FTIR	6,11	0,29	1,13	0,82	
262	FTIR	5,02	-0,80	-3,18	-2,31	
263	FTIR	6,40	0,58	2,28	1,66	
264	FTIR	7,60	1,78	7,03	5,10	(**)
265	FTIR	5,70	-0,12	-0,49	-0,35	
267	FTIR	6,05	0,23	0,90	0,65	
268	FTIR	5,70	-0,12	-0,49	-0,35	
269	FTIR	5,80	-0,02	-0,09	-0,07	
270	FTIR	6,17	0,35	1,37	1,00	
274	FTIR	4,90	-0,92	-3,65	-2,65	
275	FTIR	5,30	-0,52	-2,07	-1,50	
276	FTIR	5,53	-0,29	-1,16	-0,84	
277	FTIR	5,90	0,08	0,30	0,22	
279	FTIR	5,70	-0,12	-0,49	-0,35	
281	FTIR	5,46	-0,36	-1,44	-1,04	
282	FTIR	5,60	-0,22	-0,88	-0,64	
283	FTIR	5,56	-0,26	-1,04	-0,76	
284	FTIR	6,65	0,83	3,27	2,38	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
285	FTIR	6,78	0,96	3,79	2,75	
321	FTIR	5,94	0,12	0,46	0,33	
339	FTIR	5,50	-0,32	-1,28	-0,93	
346	FTIR	7,50	1,68	6,63	4,82	
351	FTIR	5,30	-0,52	-2,07	-1,50	
371	FTIR	6,80	0,98	3,86	2,81	



5.8 pH-Wert

5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	elektrom.	3,44	0,020	0,42	
02	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
03	elektrom.	3,35	-0,070	-1,47	
04	elektrom.	3,45	0,030	0,63	
05	elektrom.	3,46	0,040	0,84	
06	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
07	elektrom.	3,40	-0,020	-0,42	
10	elektrom.	3,45	0,030	0,63	
11	elektrom.	3,50	0,080	1,68	
12	elektrom.	3,42	0,005	0,11	
14	elektrom.	3,41	-0,010	-0,21	
15	elektrom.	3,43	0,010	0,21	
16	elektrom.	3,35	-0,070	-1,47	
19	elektrom.	3,44	0,020	0,42	
21	elektrom.	3,25	-0,170	-3,57	
22	elektrom.	3,38	-0,040	-0,84	
23	elektrom.	3,38	-0,040	-0,84	
24	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
25	elektrom.	3,47	0,050	1,05	
27	elektrom.	3,39	-0,030	-0,63	
28	elektrom.	3,47	0,050	1,05	
29	elektrom.	3,47	0,050	1,05	
32	elektrom.	3,37	-0,050	-1,05	
39	elektrom.	3,40	-0,020	-0,42	
40	elektrom.	3,51	0,090	1,89	
41	elektrom.	3,37	-0,050	-1,05	
42	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
44	elektrom.	3,31	-0,110	-2,31	
46	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
47	elektrom.	3,44	0,020	0,42	
50	elektrom.	3,36	-0,060	-1,26	
52	elektrom.	3,40	-0,025	-0,53	
57	elektrom.	3,36	-0,060	-1,26	
58	elektrom.	3,43	0,010	0,21	
60	elektrom.	3,46	0,040	0,84	
62	elektrom.	3,40	-0,020	-0,42	
63	elektrom.	3,23	-0,190	-3,99	
64	elektrom.	3,48	0,060	1,26	
65	elektrom.	3,50	0,080	1,68	
66	elektrom.	3,34	-0,080	-1,68	
70	elektrom.	3,42	0,000	0,00	
72	elektrom.	3,62	0,200	4,20	
78	elektrom.	3,53	0,110	2,31	
79	elektrom.	3,38	-0,040	-0,84	
83	elektrom.	3,37	-0,050	-1,05	

5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	45	3,416	0,0575
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	3,414	0,0637

5.8.3 FTIR-Laborergebnisse

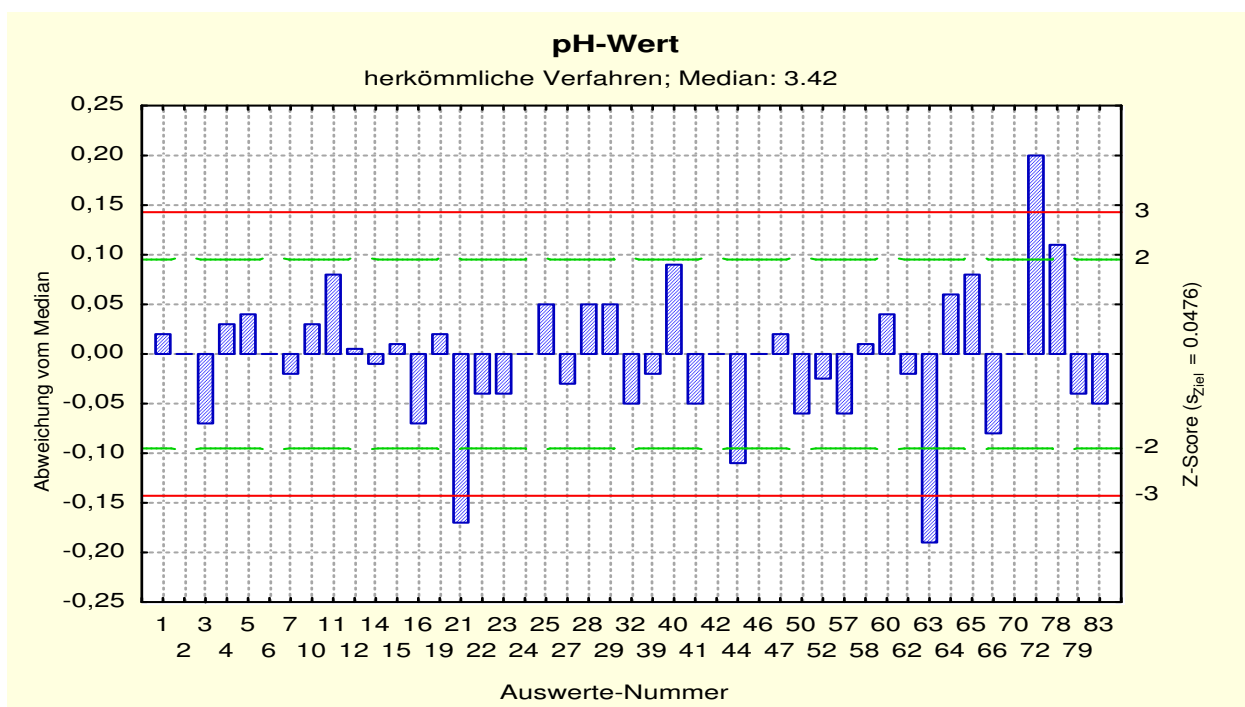
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,38	-0,040	-0,81	
202	FTIR	3,48	0,060	1,22	
203	FTIR	3,44	0,020	0,41	
204	FTIR	3,38	-0,040	-0,81	
205	FTIR	3,43	0,010	0,20	
206	FTIR	3,35	-0,070	-1,42	
207	FTIR	3,37	-0,050	-1,01	
208	FTIR	3,37	-0,050	-1,01	
209	FTIR	3,39	-0,030	-0,61	
210	FTIR	3,44	0,020	0,41	
211	FTIR	3,41	-0,010	-0,20	
213	FTIR	3,30	-0,120	-2,43	
215	FTIR	3,43	0,010	0,20	
216	FTIR	3,40	-0,020	-0,41	
217	FTIR	3,55	0,130	2,64	
218	FTIR	3,37	-0,050	-1,01	
219	FTIR	3,39	-0,030	-0,61	
220	FTIR	3,19	-0,230	-4,67	
221	FTIR	3,28	-0,140	-2,84	
222	FTIR	3,41	-0,010	-0,20	
223	FTIR	3,45	0,030	0,61	
224	FTIR	3,41	-0,010	-0,20	
225	FTIR	3,47	0,050	1,01	
226	FTIR	3,36	-0,060	-1,22	
227	FTIR	3,40	-0,020	-0,41	
228	FTIR	3,44	0,020	0,41	
229	FTIR	3,43	0,010	0,20	
230	FTIR	3,41	-0,010	-0,20	
231	FTIR	3,38	-0,040	-0,81	
232	FTIR	3,40	-0,020	-0,41	
234	FTIR	3,47	0,050	1,01	
236	FTIR	3,46	0,040	0,81	
238	FTIR	3,40	-0,020	-0,41	
239	FTIR	3,53	0,110	2,23	
243	FTIR	3,46	0,040	0,81	
244	FTIR	3,35	-0,070	-1,42	
245	FTIR	3,39	-0,030	-0,61	
246	FTIR	3,51	0,090	1,83	
247	FTIR	3,39	-0,030	-0,61	
248	FTIR	3,43	0,010	0,20	
249	FTIR	3,40	-0,020	-0,41	
251	FTIR	3,42	0,000	0,00	
252	FTIR	3,53	0,110	2,23	
253	FTIR	3,44	0,020	0,41	
254	FTIR	3,37	-0,050	-1,01	
256	FTIR	3,45	0,030	0,61	
257	FTIR	3,45	0,030	0,61	
258	FTIR	3,42	0,000	0,00	
259	FTIR	3,45	0,030	0,61	
260	FTIR	3,34	-0,080	-1,62	
261	FTIR	3,32	-0,100	-2,03	
262	FTIR	3,47	0,050	1,01	
263	FTIR	3,23	-0,190	-3,85	
264	FTIR	3,54	0,120	2,43	
265	FTIR	3,44	0,020	0,41	
266	FTIR	3,48	0,060	1,22	
267	FTIR	3,42	0,000	0,00	
268	FTIR	3,43	0,010	0,20	
269	FTIR	3,39	-0,030	-0,61	
270	FTIR	3,33	-0,090	-1,83	
271	FTIR	3,38	-0,035	-0,71	
272	FTIR	3,29	-0,130	-2,64	
273	FTIR	3,54	0,120	2,43	
274	FTIR	3,37	-0,050	-1,01	
275	FTIR	3,34	-0,080	-1,62	

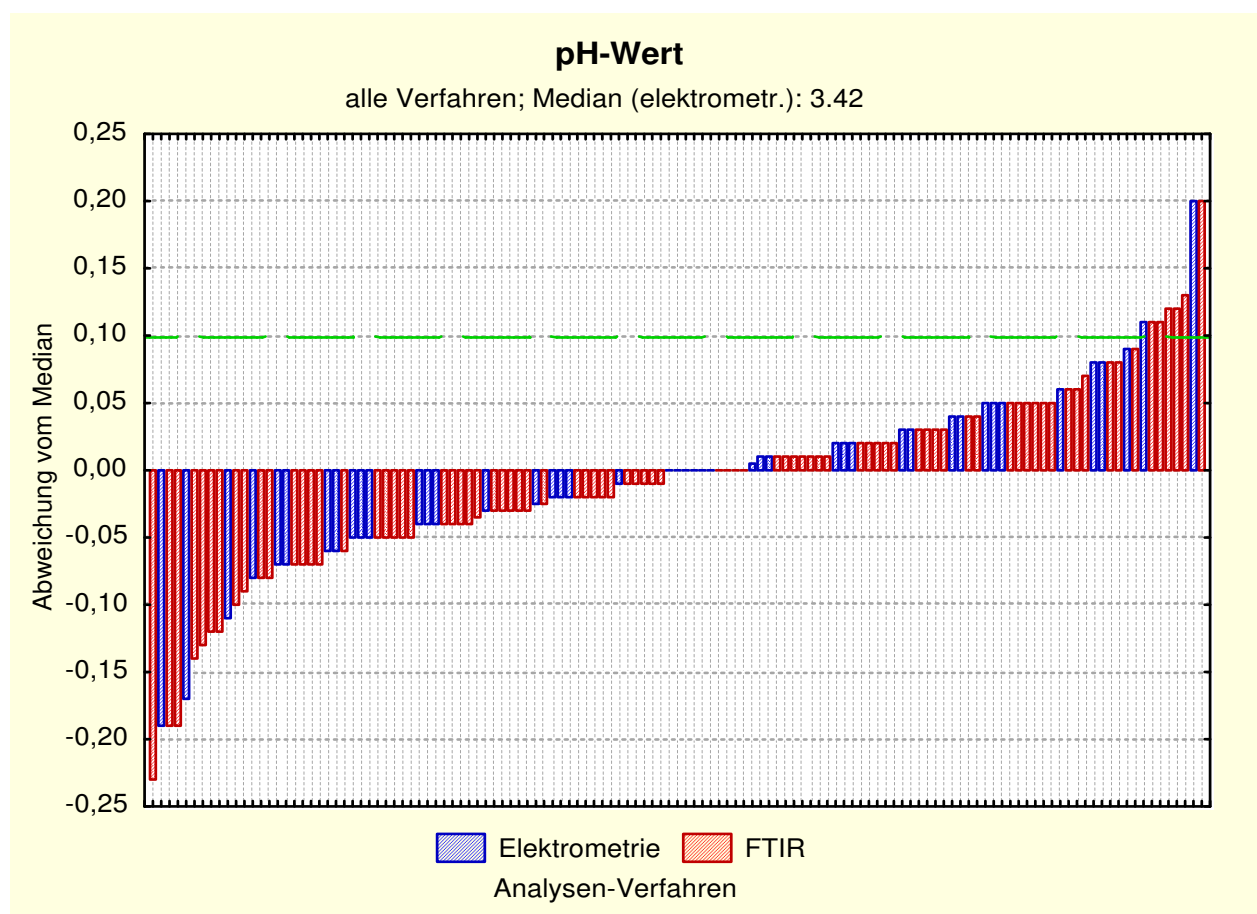
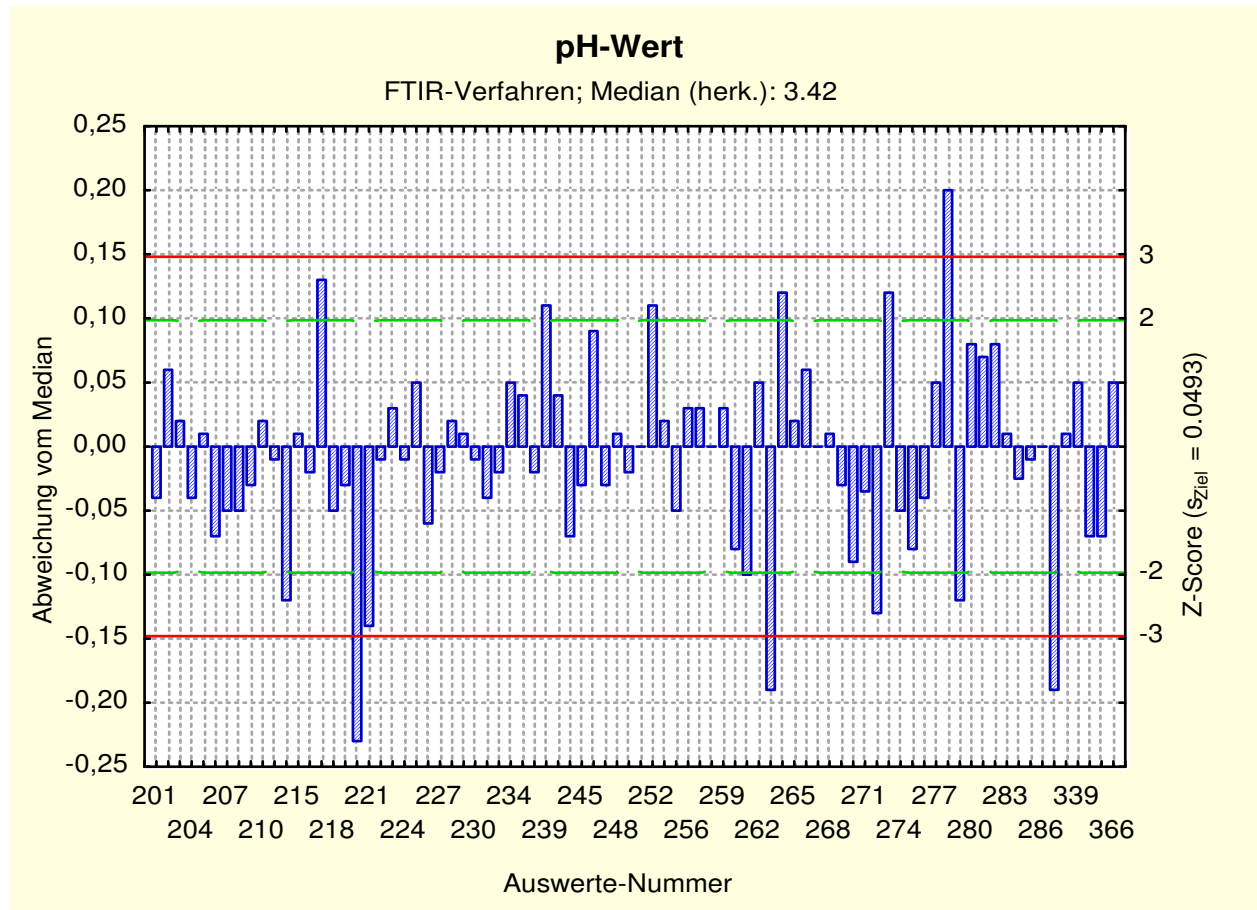
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,38	-0,040	-0,81	
277	FTIR	3,47	0,050	1,01	
278	FTIR	3,62	0,200	4,06	
279	FTIR	3,30	-0,120	-2,43	
280	FTIR	3,50	0,080	1,62	
281	FTIR	3,49	0,070	1,42	
282	FTIR	3,50	0,080	1,62	
283	FTIR	3,43	0,010	0,20	
284	FTIR	3,40	-0,025	-0,51	
285	FTIR	3,41	-0,010	-0,20	
286	FTIR	3,42	0,000	0,00	
320	FTIR	3,23	-0,190	-3,85	
321	FTIR	3,43	0,010	0,20	
339	FTIR	3,47	0,050	1,01	
346	FTIR	3,35	-0,070	-1,42	
351	FTIR	3,35	-0,070	-1,42	
366	FTIR	3,47	0,050	1,01	

5.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	3,23
Mittelwert	3,415
Median	3,420
Maximalwert	3,62
Standardabweichung (s_L)	0,0683
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0102
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,0493
Horvat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,43
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,39
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,21
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,21





5.9 Gesamtsäure [g/L]

5.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,39	-0,095	-0,40	-0,89	
02	LwK 5.2.1	5,43	-0,055	-0,23	-0,51	
03	LwK 5.2.1	5,48	-0,005	-0,02	-0,05	
05	LwK 5.2.1	5,41	-0,075	-0,31	-0,70	
06	LwK 5.1	5,34	-0,145	-0,60	-1,35	
07	LwK 5.1	5,45	-0,035	-0,15	-0,33	
08	LwK 5.2.1	5,72	0,235	0,98	2,19	
10	LwK 5.2.1	5,42	-0,065	-0,27	-0,61	
11	LwK 5.1	5,30	-0,185	-0,77	-1,73	
12	LwK 5.2.1	5,43	-0,055	-0,23	-0,51	
14	LwK 5.1	5,53	0,045	0,19	0,42	
15	LwK 5.1	5,60	0,115	0,48	1,07	
16	LwK 5.2.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
18	LwK 5.2.2	5,50	0,015	0,06	0,14	
19	LwK 5.2.1	5,61	0,125	0,52	1,17	
21	LwK 5.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
22	LwK 5.1	5,35	-0,135	-0,56	-1,26	
23	LwK 5.1	5,60	0,115	0,48	1,07	
24	LwK 5.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
27	LwK 5.1	5,55	0,065	0,27	0,61	
28	LwK 5.1	5,60	0,115	0,48	1,07	
29	LwK 5.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
32	LwK 5.2.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
39	LwK 5.1	5,69	0,205	0,85	1,91	
40	LwK 5.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
41	LwK 5.2.1	5,57	0,085	0,35	0,79	
42	LwK 5.1	5,45	-0,035	-0,15	-0,33	
44	LwK 5.1	5,42	-0,065	-0,27	-0,61	
46	LwK 5.1	5,48	-0,005	-0,02	-0,05	
47	LwK 5.1	5,49	0,005	0,02	0,05	
48	LwK 5.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
50	LwK 5.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
52	LwK 5.1	5,46	-0,025	-0,10	-0,23	
54	LwK 5.2.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
55	LwK 5.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
57	LwK 5.2.2	5,20	-0,285	-1,19	-2,66	
58	LwK 5.2.1	5,45	-0,035	-0,15	-0,33	
60	LwK 5.1	5,69	0,205	0,85	1,91	
62	LwK 5.2.1	5,47	-0,015	-0,06	-0,14	
63	LwK 5.2.2	5,50	0,015	0,06	0,14	
64	LwK 5.1	5,20	-0,285	-1,19	-2,66	
65	LwK 5.2.1	5,60	0,115	0,48	1,07	
66	LwK 5.1	5,41	-0,075	-0,31	-0,70	
70	LwK 5.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
71	LwK 5.1	5,40	-0,085	-0,35	-0,79	
72	LwK 5.2.1	5,57	0,085	0,35	0,79	
78	LwK 5.1	5,81	0,325	1,35	3,03	
79	LwK 5.1	5,63	0,145	0,60	1,35	
83	LwK 5.2.1	5,50	0,015	0,06	0,14	
90	LwK 5.2.1	5,53	0,045	0,19	0,42	

5.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	29	5,485	0,119
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	18	5,488	0,089
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	3	5,402	0,193
	herkömmliche Verfahren	50	5,483	0,103
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	5,468	0,173

5.9.3 FTIR-Laborergebnisse

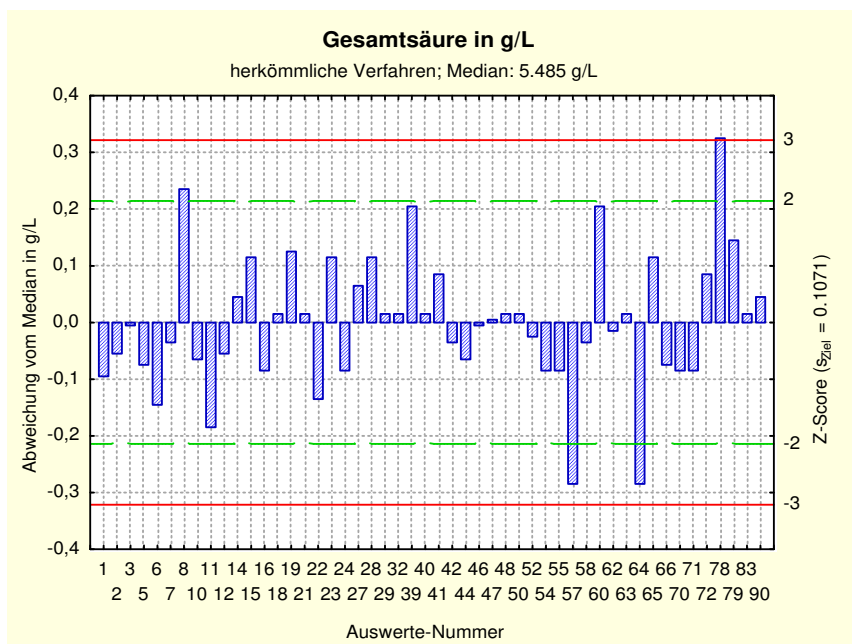
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
202	LwK 5.3	5,44	-0,045	-0,19	-0,31	
203	LwK 5.3	5,37	-0,115	-0,48	-0,79	
204	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
205	LwK 5.3	5,51	0,025	0,10	0,17	
206	LwK 5.3	5,42	-0,065	-0,27	-0,45	
207	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
208	LwK 5.3	5,20	-0,285	-1,19	-1,97	
209	LwK 5.3	5,46	-0,025	-0,10	-0,17	
210	LwK 5.3	5,38	-0,105	-0,44	-0,72	
211	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
213	LwK 5.3	5,52	0,035	0,15	0,24	
215	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
216	LwK 5.3	5,66	0,175	0,73	1,21	
217	LwK 5.3	5,25	-0,235	-0,98	-1,62	
218	LwK 5.3	5,21	-0,275	-1,15	-1,90	
219	LwK 5.3	5,47	-0,015	-0,06	-0,10	
220	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
221	LwK 5.3	5,51	0,025	0,10	0,17	
222	LwK 5.3	5,47	-0,015	-0,06	-0,10	
223	LwK 5.3	5,20	-0,285	-1,19	-1,97	
224	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
225	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
226	LwK 5.3	5,63	0,145	0,60	1,00	
227	LwK 5.3	5,39	-0,095	-0,40	-0,66	
228	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
229	LwK 5.3	5,58	0,095	0,40	0,66	
230	LwK 5.3	5,49	0,005	0,02	0,03	
231	LwK 5.3	5,14	-0,345	-1,44	-2,38	
232	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
234	LwK 5.3	5,68	0,195	0,81	1,34	
236	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
238	LwK 5.3	5,29	-0,195	-0,81	-1,34	
239	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
243	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
244	LwK 5.3	5,37	-0,115	-0,48	-0,79	
245	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
246	LwK 5.3	5,90	0,415	1,73	2,86	
247	LwK 5.3	5,62	0,135	0,56	0,93	
248	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
249	LwK 5.3	5,45	-0,035	-0,15	-0,24	
250	LwK 5.3	5,62	0,135	0,56	0,93	
251	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
252	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
253	LwK 5.3	5,74	0,255	1,06	1,76	
254	LwK 5.3	5,78	0,295	1,23	2,03	
256	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
257	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
258	LwK 5.3	5,48	-0,005	-0,02	-0,03	
259	LwK 5.3	5,41	-0,075	-0,31	-0,52	
260	LwK 5.3	5,71	0,225	0,94	1,55	
261	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
262	LwK 5.3	5,01	-0,475	-1,98	-3,28	
263	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
264	LwK 5.3	5,20	-0,285	-1,19	-1,97	
265	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
266	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
267	LwK 5.3	5,45	-0,035	-0,15	-0,24	
268	LwK 5.3	5,31	-0,175	-0,73	-1,21	
269	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
270	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
271	LwK 5.3	5,36	-0,130	-0,54	-0,90	
272	LwK 5.3	5,20	-0,285	-1,19	-1,97	
273	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
274	LwK 5.3	5,46	-0,025	-0,10	-0,17	

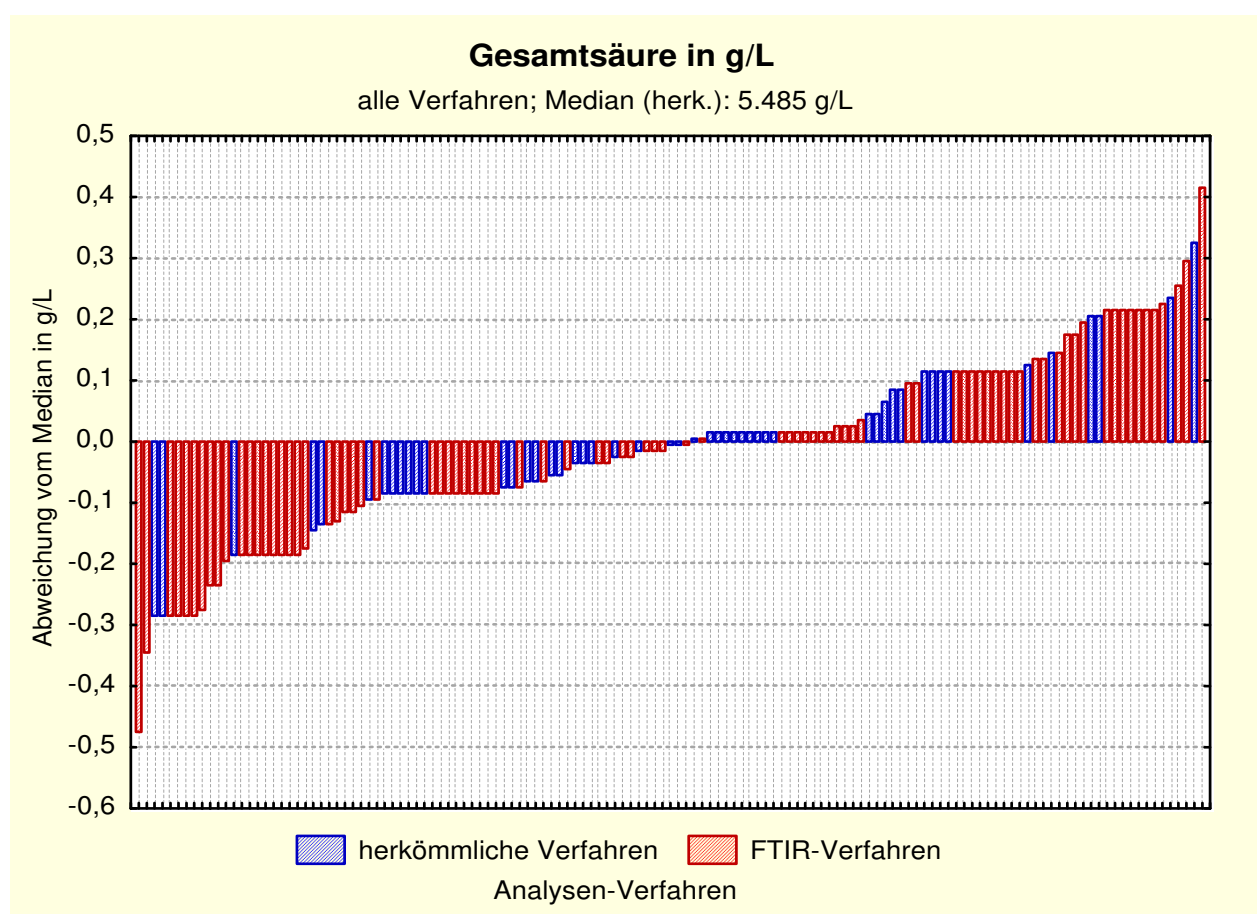
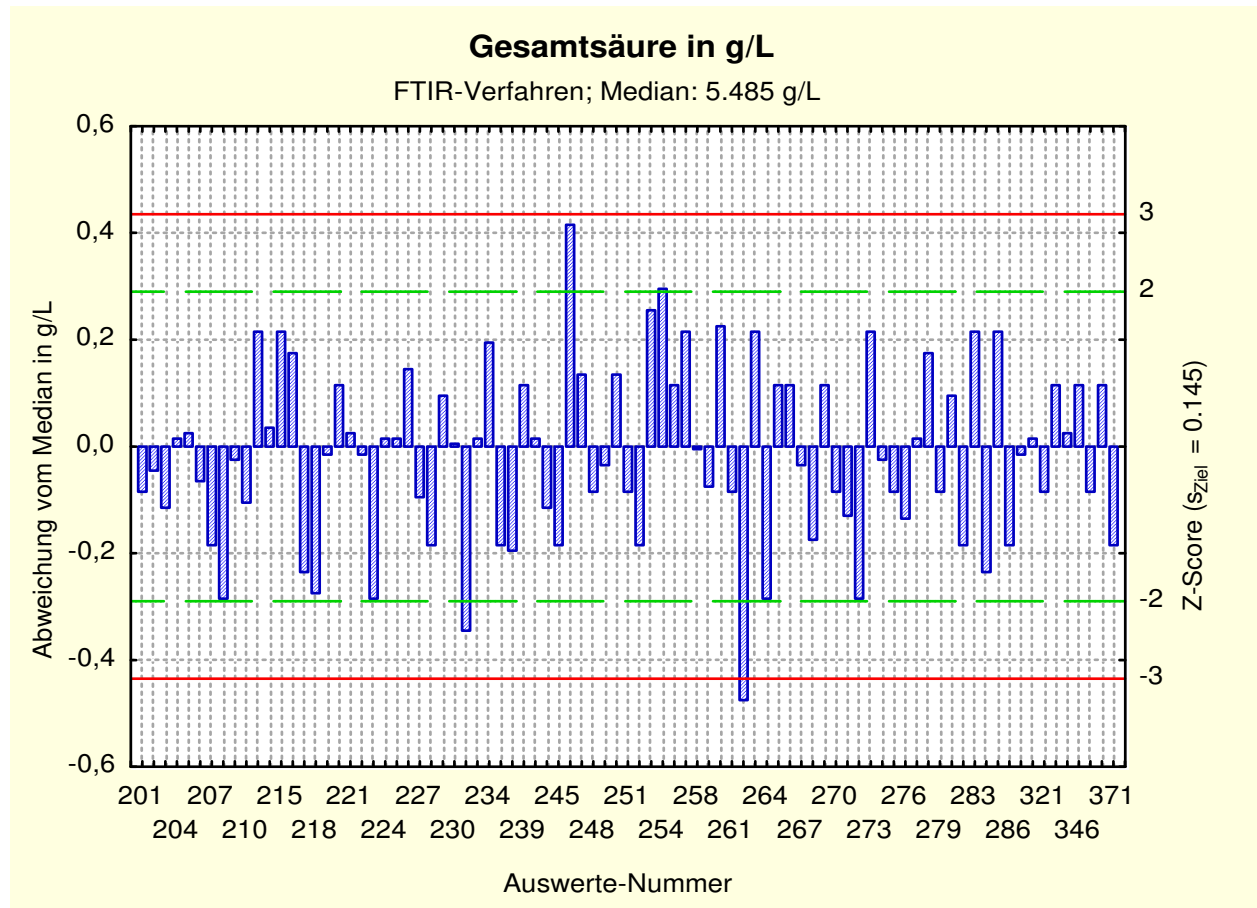
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
276	LwK 5.3	5,35	-0,135	-0,56	-0,93	
277	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
278	LwK 5.3	5,66	0,175	0,73	1,21	
279	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
281	LwK 5.3	5,58	0,095	0,40	0,66	
282	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
283	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
284	LwK 5.3	5,25	-0,235	-0,98	-1,62	
285	LwK 5.3	5,70	0,215	0,90	1,48	
286	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	
313	LwK 5.3	5,47	-0,015	-0,06	-0,10	
320	LwK 5.3	5,50	0,015	0,06	0,10	
321	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
339	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
345	LwK 5.3	5,51	0,025	0,10	0,17	
346	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
351	LwK 5.3	5,40	-0,085	-0,35	-0,59	
366	LwK 5.3	5,60	0,115	0,48	0,79	
371	LwK 5.3	5,30	-0,185	-0,77	-1,28	

5.9.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	50
Minimalwert	5,20
Mittelwert	5,485
Median	5,485
Maximalwert	5,81
Standardabweichung (s _L)	0,118
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,240
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,145
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,49
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,10
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,81
Quotient (u _M /s _H)	0,07
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,16
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,11





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,83	-0,140	-0,98	
02	IC	2,82	-0,148	-1,04	
05	photometr.	2,66	-0,310	-2,17	
06	HPLC	3,10	0,130	0,91	
07	HPLC	2,73	-0,240	-1,68	
08	HPLC	2,72	-0,250	-1,75	
09	IC	2,76	-0,210	-1,47	
11	photometr., autom.	3,20	0,230	1,61	
12	photometr., autom.	2,79	-0,179	-1,26	
16	photometr., autom.	3,50	0,530	3,72	
19	IC	3,13	0,160	1,12	
22	HPLC	3,14	0,170	1,19	
23	HPLC	3,51	0,540	3,79	
24	NMR	2,96	-0,010	-0,07	
27	photometr., autom.	2,52	-0,450	-3,16	
28	HPLC	3,07	0,100	0,70	
32	photometr., autom.	3,20	0,230	1,61	
40	photometr., autom.	2,81	-0,160	-1,12	
41	HPLC	2,84	-0,130	-0,91	
47	photometr., autom.	2,90	-0,070	-0,49	
50	photometr., autom.	2,92	-0,050	-0,35	
52	HPLC	3,33	0,360	2,52	
57	photometr., autom.	3,00	0,030	0,21	
58	photometr., autom.	3,34	0,370	2,59	
60	photometr., autom.	2,88	-0,090	-0,63	
63	photometr.	2,90	-0,070	-0,49	
65	HPLC	3,23	0,260	1,82	
70	photometr.	3,12	0,150	1,05	
79	photometr.	2,98	0,010	0,07	
90	HPLC	3,08	0,110	0,77	

5.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,80	-0,170	-1,19	-0,75	
202	FTIR	3,11	0,140	0,98	0,62	
203	FTIR	2,63	-0,340	-2,38	-1,50	
204	FTIR	2,95	-0,020	-0,14	-0,09	
206	FTIR	3,22	0,250	1,75	1,10	
208	FTIR	2,70	-0,270	-1,89	-1,19	
209	FTIR	2,92	-0,050	-0,35	-0,22	
210	FTIR	3,14	0,170	1,19	0,75	
211	FTIR	2,70	-0,270	-1,89	-1,19	
213	FTIR	2,34	-0,630	-4,42	-2,78	
215	FTIR	2,50	-0,470	-3,30	-2,07	
216	FTIR	2,56	-0,410	-2,87	-1,81	
217	FTIR	3,00	0,030	0,21	0,13	
218	FTIR	4,24	1,270	8,90	5,59	(**)
219	FTIR	2,73	-0,240	-1,68	-1,06	
220	FTIR	2,60	-0,370	-2,59	-1,63	
221	FTIR	2,77	-0,200	-1,40	-0,88	
222	FTIR	2,86	-0,110	-0,77	-0,48	
223	FTIR	3,11	0,140	0,98	0,62	
224	FTIR	2,97	0,000	0,00	0,00	
225	FTIR	2,80	-0,170	-1,19	-0,75	
226	FTIR	3,10	0,130	0,91	0,57	
227	FTIR	3,22	0,250	1,75	1,10	
228	FTIR	2,70	-0,270	-1,89	-1,19	
229	FTIR	3,10	0,130	0,91	0,57	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
230	FTIR	2,99	0,020	0,14	0,09	
231	FTIR	2,65	-0,320	-2,24	-1,41	
232	FTIR	2,20	-0,770	-5,40	-3,39	
234	FTIR	2,94	-0,030	-0,21	-0,13	
236	FTIR	3,15	0,180	1,26	0,79	
238	FTIR	2,75	-0,220	-1,54	-0,97	
239	FTIR	3,00	0,030	0,21	0,13	
243	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
244	FTIR	3,68	0,710	4,98	3,13	
245	FTIR	2,50	-0,470	-3,30	-2,07	
246	FTIR	3,00	0,030	0,21	0,13	
247	FTIR	3,15	0,180	1,26	0,79	
248	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
249	FTIR	2,82	-0,150	-1,05	-0,66	
251	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
252	FTIR	2,88	-0,090	-0,63	-0,40	
254	FTIR	3,10	0,130	0,91	0,57	
256	FTIR	2,80	-0,170	-1,19	-0,75	
257	FTIR	3,20	0,230	1,61	1,01	
258	FTIR	3,42	0,450	3,16	1,98	
259	FTIR	2,72	-0,250	-1,75	-1,10	
260	FTIR	3,22	0,250	1,75	1,10	
261	FTIR	2,94	-0,030	-0,21	-0,13	
262	FTIR	2,68	-0,290	-2,03	-1,28	
263	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
264	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
267	FTIR	2,77	-0,200	-1,40	-0,88	
268	FTIR	3,04	0,070	0,49	0,31	
269	FTIR	2,60	-0,370	-2,59	-1,63	
270	FTIR	3,13	0,160	1,12	0,70	
271	FTIR	2,75	-0,220	-1,54	-0,97	
272	FTIR	3,31	0,340	2,38	1,50	
273	FTIR	3,00	0,030	0,21	0,13	
274	FTIR	2,76	-0,210	-1,47	-0,93	
275	FTIR	3,10	0,130	0,91	0,57	
276	FTIR	2,96	-0,010	-0,07	-0,04	
277	FTIR	3,00	0,030	0,21	0,13	
278	FTIR	2,01	-0,960	-6,73	-4,23	
279	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
280	FTIR	5,46	2,490	17,46	10,97	(*)
281	FTIR	2,79	-0,180	-1,26	-0,79	
282	FTIR	2,80	-0,170	-1,19	-0,75	
283	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
284	FTIR	2,94	-0,025	-0,18	-0,11	
285	FTIR	3,50	0,530	3,72	2,33	
286	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
320	FTIR	2,80	-0,170	-1,19	-0,75	
321	FTIR	2,51	-0,460	-3,23	-2,03	
339	FTIR	2,50	-0,470	-3,30	-2,07	
346	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	
351	FTIR	2,90	-0,070	-0,49	-0,31	

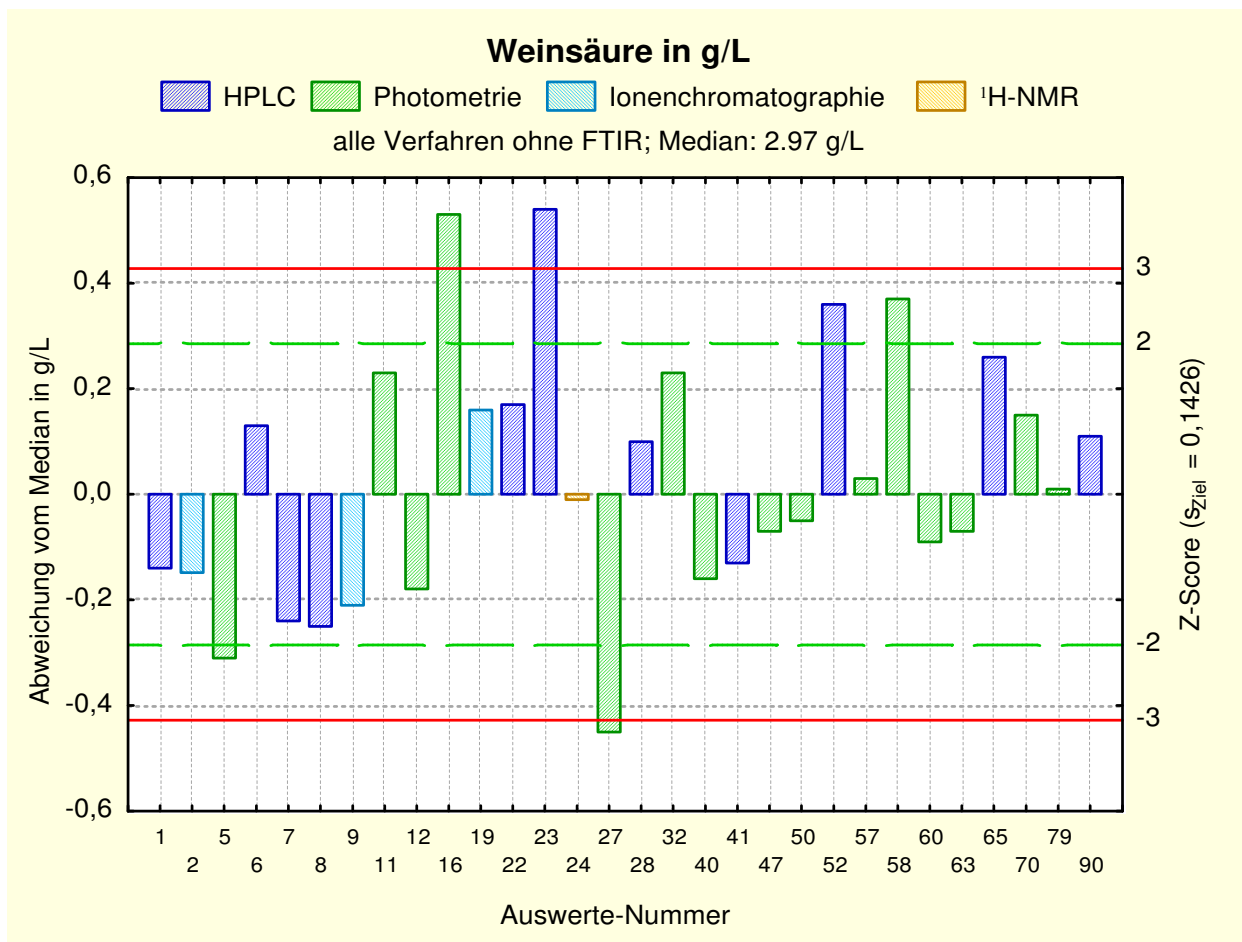
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

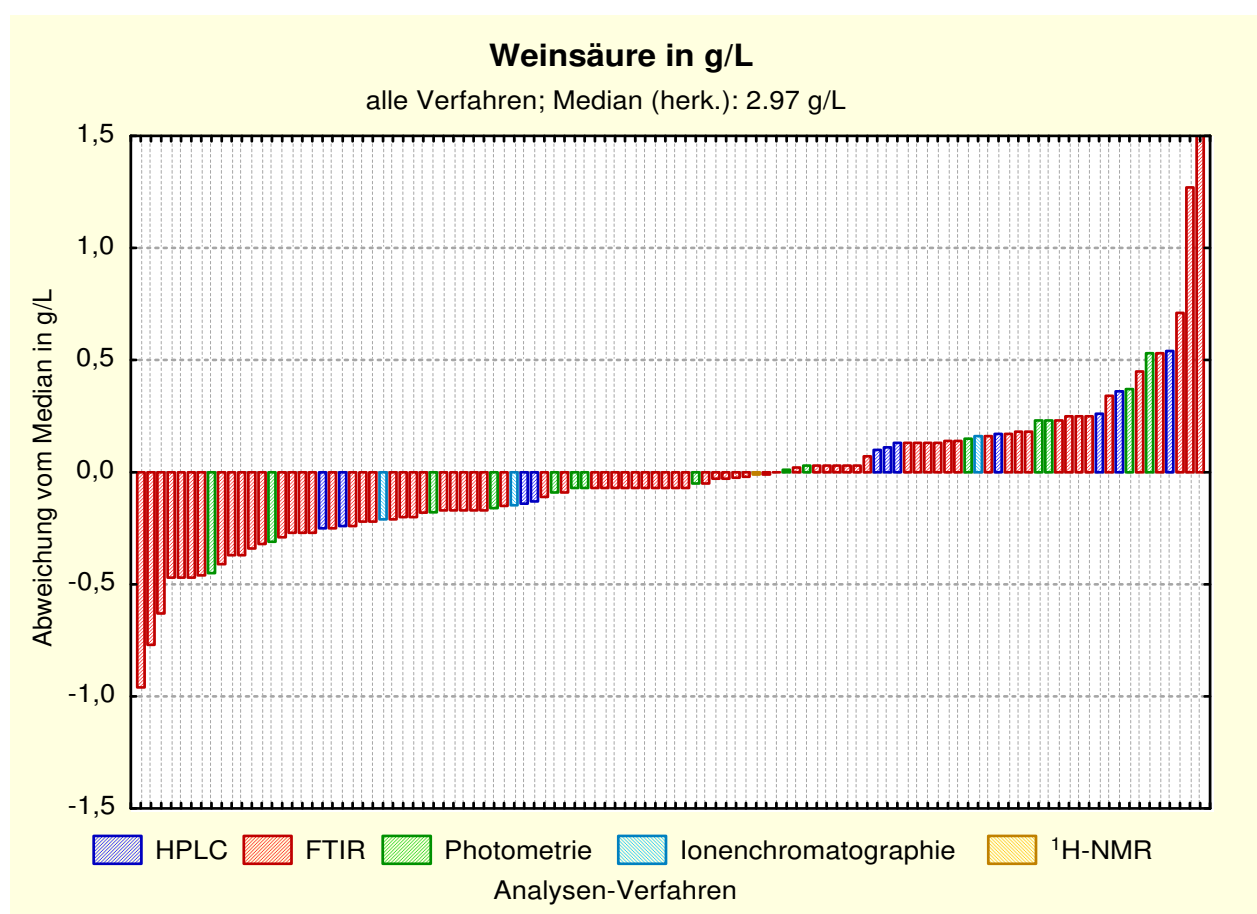
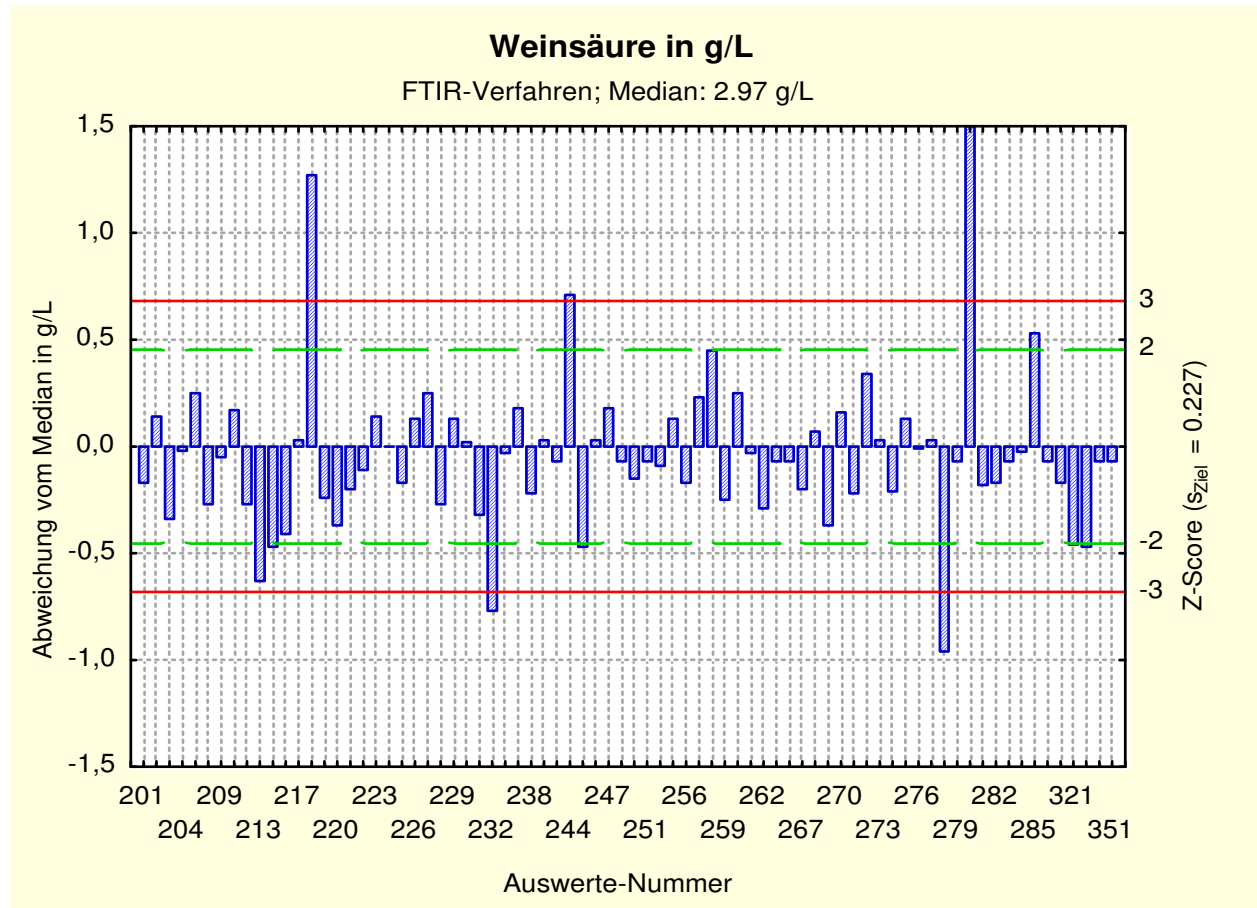
5.10.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	3,049	0,277
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	2,924	0,201
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	11	3,002	0,299
IC	Ionenchromatographie	3	2,894	0,205
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,960	
	herkömmliche Verfahren	30	2,992	0,244
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,901	0,249

5.10.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	30
Minimalwert	2,52
Mittelwert	2,999
Median	2,970
Maximalwert	3,51
Standardabweichung (s_L)	0,242
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,143
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,70
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,07
Quotient (u_M/s_H)	0,31
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,19





5.11 Flüchtige Säure [g/L]

5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,460	0,0900	3,70	3,15	
02	OIV SO2-korr.	0,398	0,0280	1,15	0,98	
03	OIV SO2-korr.	0,354	-0,0160	-0,66	-0,56	
05	Österreich, SO2 korr.	0,420	0,0500	2,06	1,75	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,363	-0,0070	-0,29	-0,25	
07	Halbmikro SO2 korr.	0,432	0,0620	2,55	2,17	
08	OIV o. SO2-korr.	0,420	0,0500	2,06	1,75	
10	OIV SO2-korr.	0,354	-0,0160	-0,66	-0,56	
11	OIV SO2-korr.	0,260	-0,1100	-4,53	-3,85	
12	Halbmikro SO2 korr.	0,328	-0,0420	-1,73	-1,47	
14	Gerhardt SO2 korr.	0,395	0,0250	1,03	0,88	
21	Gerhardt SO2 unber.	0,530	0,1600	6,58	5,60	(**)
23	Halbmikro SO2 unber.	0,430	0,0600	2,47	2,10	
29	Halbmikro SO2 korr.	0,373	0,0030	0,12	0,11	
32	Gerhardt SO2 korr.	0,290	-0,0800	-3,29	-2,80	
39	Halbmikro SO2 unber.	0,504	0,1340	5,51	4,69	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,380	0,0100	0,41	0,35	
41	Gerhardt SO2 korr.	0,400	0,0300	1,23	1,05	
44	Halbmikro SO2 unber.	0,490	0,1200	4,94	4,20	
47	Gerhardt SO2 korr.	0,440	0,0700	2,88	2,45	
52	Halbmikro SO2 korr.	0,324	-0,0460	-1,89	-1,61	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0800	3,29	2,80	
58	Rentschler mod. korr.	0,362	-0,0080	-0,33	-0,28	
60	Büchi SO2 korr.	0,266	-0,1040	-4,28	-3,64	
62	Wädenswil SO2 korr.	0,354	-0,0160	-0,66	-0,56	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,330	-0,0400	-1,65	-1,40	
65	Gerhardt SO2 korr.	0,390	0,0200	0,82	0,70	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,520	0,1500	6,17	5,25	(**)
68	Wädenswil SO2 unber.	0,480	0,1100	4,53	3,85	
70	Halbmikro SO2 unber.	0,410	0,0400	1,65	1,40	
71	Wädenswil SO2 korr.	0,403	0,0331	1,36	1,16	
72	Gerhardt SO2 korr.	0,370	0,0000	0,00	0,00	
79	Halbmikro SO2 korr.	0,310	-0,0600	-2,47	-2,10	
98	Halbmikro SO2 unber.	0,547	0,1770	7,28	6,20	(**)

(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der SO₂-korrigierten Werte ab.

5.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,480	0,1100	4,53	1,23	
202	FTIR	0,540	0,1700	6,99	1,91	
203	FTIR	0,560	0,1900	7,82	2,13	
204	FTIR	0,530	0,1600	6,58	1,80	
205	FTIR	0,510	0,1400	5,76	1,57	
206	FTIR	0,310	-0,0600	-2,47	-0,67	
208	FTIR	0,270	-0,1000	-4,11	-1,12	
209	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
210	FTIR	0,332	-0,0380	-1,56	-0,43	
211	FTIR	0,520	0,1500	6,17	1,68	
215	FTIR	0,490	0,1200	4,94	1,35	
216	FTIR	0,560	0,1900	7,82	2,13	
217	FTIR	0,220	-0,1500	-6,17	-1,68	
218	FTIR	0,160	-0,2100	-8,64	-2,36	
219	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
220	FTIR	0,440	0,0700	2,88	0,79	
221	FTIR	0,310	-0,0600	-2,47	-0,67	
222	FTIR	0,370	0,0000	0,00	0,00	
223	FTIR	0,510	0,1400	5,76	1,57	
225	FTIR	0,460	0,0900	3,70	1,01	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

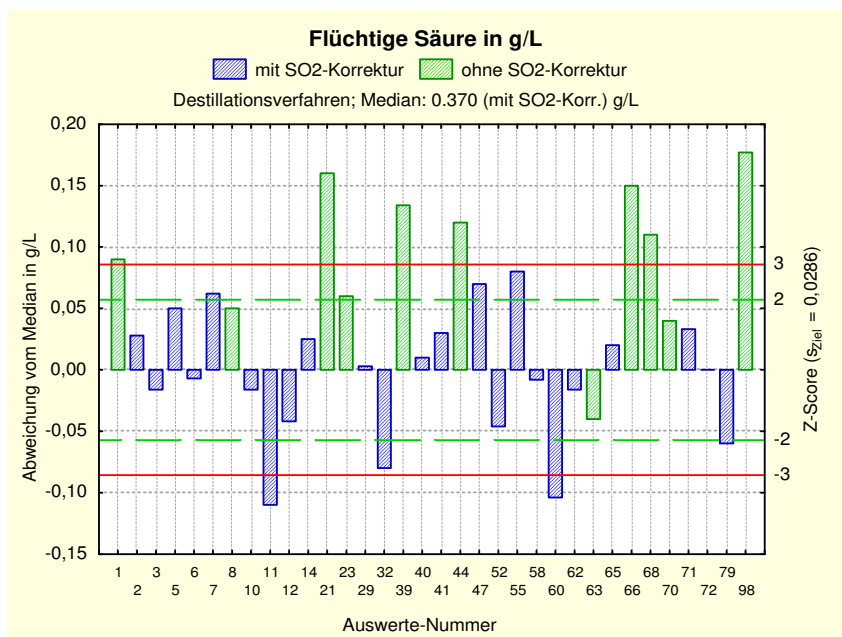
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	0,330	-0,0400	-1,65	-0,45	
227	FTIR	0,714	0,3440	14,15	3,86	
228	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
229	FTIR	0,560	0,1900	7,82	2,13	
230	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
231	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
232	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
234	FTIR	0,480	0,1100	4,53	1,23	
236	FTIR	0,330	-0,0400	-1,65	-0,45	
238	FTIR	0,510	0,1400	5,76	1,57	
239	FTIR	0,510	0,1400	5,76	1,57	
243	FTIR	0,480	0,1100	4,53	1,23	
244	FTIR	0,520	0,1500	6,17	1,68	
245	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
246	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
247	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
248	FTIR	0,470	0,1000	4,11	1,12	
249	FTIR	0,570	0,2000	8,23	2,24	
251	FTIR	0,460	0,0900	3,70	1,01	
252	FTIR	0,040	-0,3300	-13,58	-3,70	
253	FTIR	0,360	-0,0100	-0,41	-0,11	
254	FTIR	0,390	0,0200	0,82	0,22	
256	FTIR	0,460	0,0900	3,70	1,01	
257	FTIR	0,560	0,1900	7,82	2,13	
259	FTIR	0,530	0,1600	6,58	1,80	
260	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
261	FTIR	0,650	0,2800	11,52	3,14	
262	FTIR	0,280	-0,0900	-3,70	-1,01	
263	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
264	FTIR	0,160	-0,2100	-8,64	-2,36	
265	FTIR	0,380	0,0100	0,41	0,11	
266	FTIR	0,340	-0,0300	-1,23	-0,34	
267	FTIR	0,330	-0,0400	-1,65	-0,45	
268	FTIR	0,420	0,0500	2,06	0,56	
269	FTIR	0,370	0,0000	0,00	0,00	
270	FTIR	0,420	0,0500	2,06	0,56	
271	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
272	FTIR	0,780	0,4100	16,87	4,60	
273	FTIR	0,400	0,0300	1,23	0,34	
274	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
275	FTIR	0,360	-0,0100	-0,41	-0,11	
276	FTIR	0,450	0,0800	3,29	0,90	
277	FTIR	0,680	0,3100	12,75	3,48	
278	FTIR	0,400	0,0300	1,23	0,34	
279	FTIR	0,390	0,0200	0,82	0,22	
280	FTIR	0,291	-0,0790	-3,25	-0,89	
281	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
282	FTIR	0,450	0,0800	3,29	0,90	
286	FTIR	0,360	-0,0100	-0,41	-0,11	
320	FTIR	0,470	0,1000	4,11	1,12	
321	FTIR	0,390	0,0200	0,82	0,22	
339	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
346	FTIR	0,630	0,2600	10,70	2,92	
351	FTIR	0,490	0,1200	4,94	1,35	
366	FTIR	0,300	-0,0700	-2,88	-0,79	
371	FTIR	0,470	0,1000	4,11	1,12	

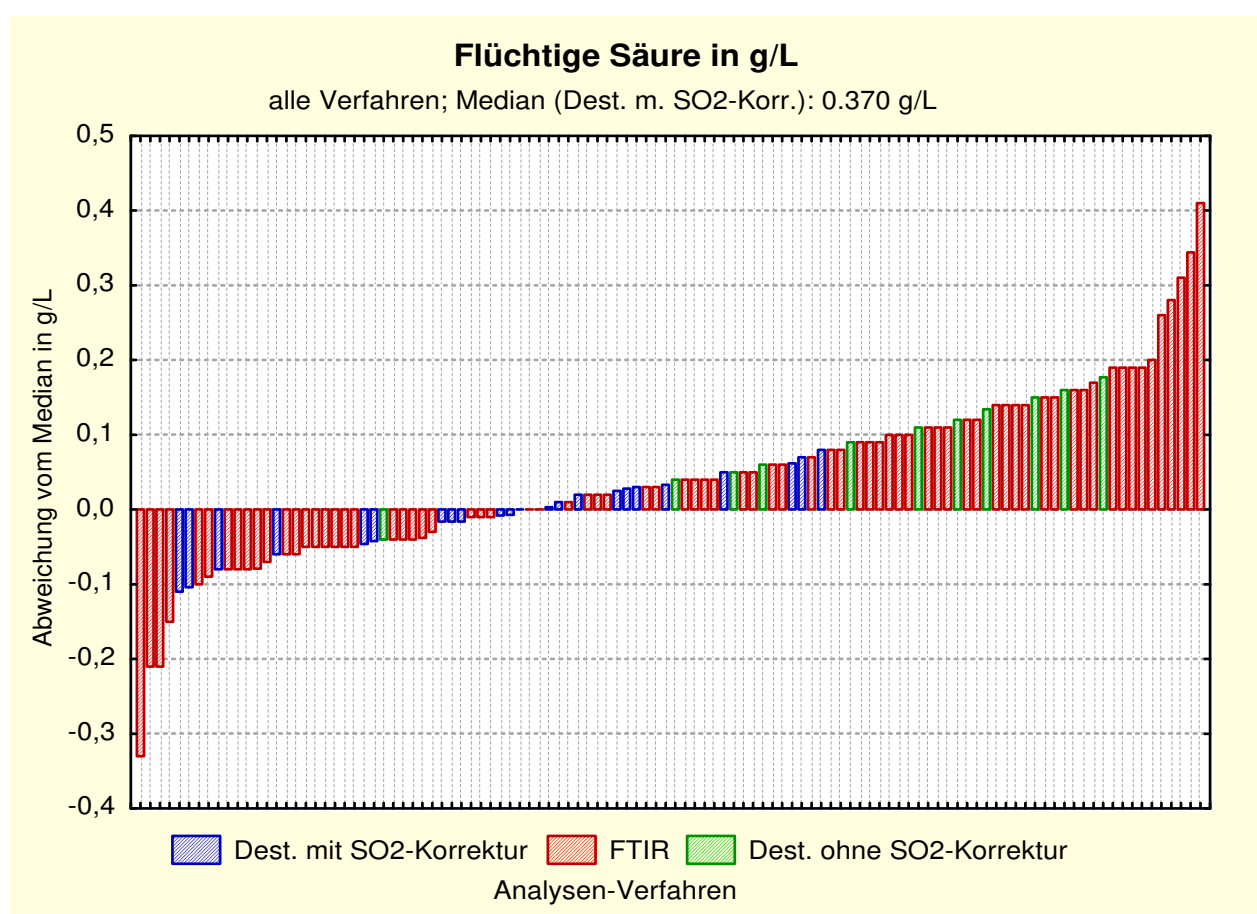
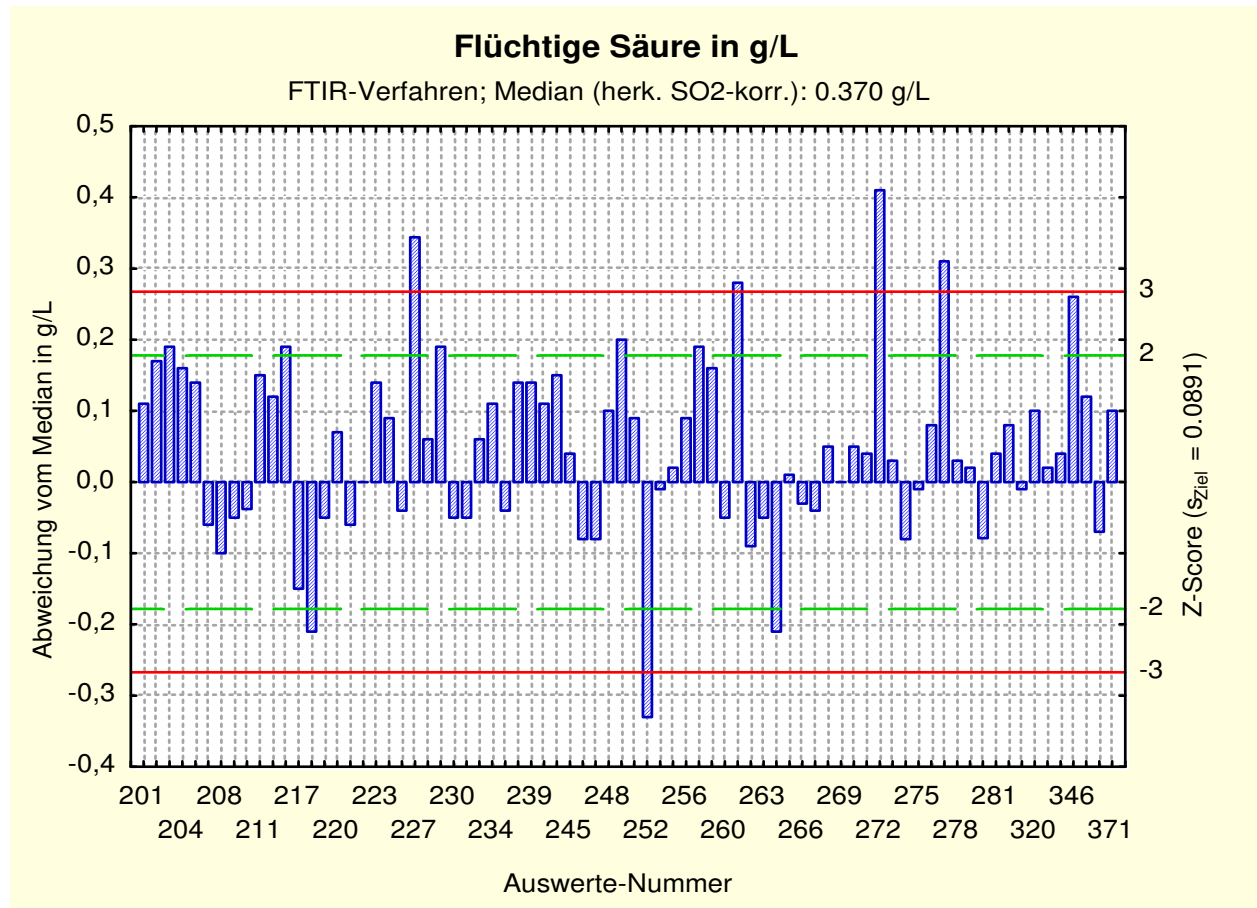
5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	0,260
Mittelwert	0,3659
Median	0,3700
Maximalwert	0,450
Standardabweichung (s _L)	0,052
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,024
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,13
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,81
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,58
Quotient (u _M /s _H)	0,44
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,38
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,12

5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV	8	0,4649	0,0712
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt			
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	5	0,3515	0,0540
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren	1	0,4800	
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt			
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	2	0,3786	0,0394
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt	1	0,5300	
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt			
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	9	0,3899	0,0415
OIV	OIV-MA-AS-313-02	4	0,3444	0,0599
SO2-korr.	einschl. SO ₂ -Korrektur			
o. SO2-korr.	ohne SO ₂ -Korrektur	1	0,4200	
Rentschler mod	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles	1	0,3620	
SO2-korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert			
Österreich, SO2 korr.	Erläuterung siehe Teil 1 Abschnitt 6.18.4	1	0,4200	
Büchi SO2 korr.	Destillationsapparat Büchi, SO ₂ -Einfluss korr.	1	0,2660	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	23	0,3679	0,0533
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	0,4169	0,1139





5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,297	-0,033	-1,50	
06	enzymat. autom.	0,339	0,009	0,41	
07	HPLC	0,338	0,008	0,36	
11	enzymat. autom.	0,340	0,010	0,45	
15	enzymat. autom.	0,380	0,050	2,27	
16	enzymat. autom.	0,340	0,010	0,45	
19	IC	0,480	0,150	6,80	(**)
22	HPLC	0,310	-0,020	-0,91	
24	NMR	0,300	-0,030	-1,36	
27	enzymat. autom.	0,330	0,000	0,00	
28	HPLC	0,335	0,005	0,23	
32	enzymat. autom.	0,450	0,120	5,44	(**)
40	enzymat. autom.	0,330	0,000	0,00	
41	HPLC	0,350	0,020	0,91	
42	enzymat. autom.	0,360	0,030	1,36	
47	enzymat. autom.	0,320	-0,010	-0,45	
50	enzymat. autom.	0,380	0,050	2,27	
52	enzymat. Hand	0,297	-0,033	-1,50	
57	enzymat. autom.	0,330	0,000	0,00	
58	enzymat. autom.	0,342	0,012	0,54	
60	enzymat. autom.	0,190	-0,140	-6,35	(**)
65	enzymat. autom.	0,321	-0,009	-0,41	
70	enzymat. autom.	0,350	0,020	0,91	
72	enzymat. autom.	0,310	-0,020	-0,91	
79	enzymat. Hand	0,275	-0,055	-2,49	
90	HPLC	0,317	-0,013	-0,59	
95	enzymat. autom.	0,310	-0,020	-0,91	
105	enzymat. autom.	0,470	0,140	6,35	(**)
213	FTIR	0,380	0,050	2,27	
224	FTIR	0,370	0,040	1,81	
243	FTIR	0,480	0,150	6,80	(**)
258	FTIR	0,480	0,150	6,80	(**)
262	FTIR	0,300	-0,030	-1,36	
283	FTIR	0,406	0,076	3,45	
284	FTIR	0,542	0,212	9,61	(*)
285	FTIR	0,490	0,160	7,25	(**)

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

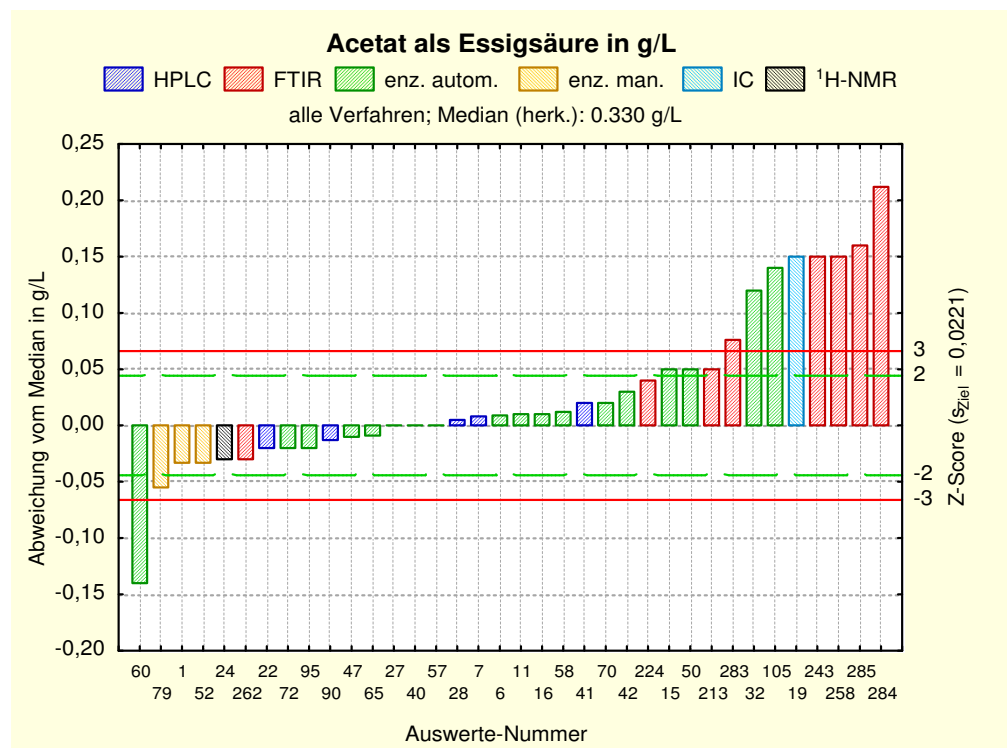
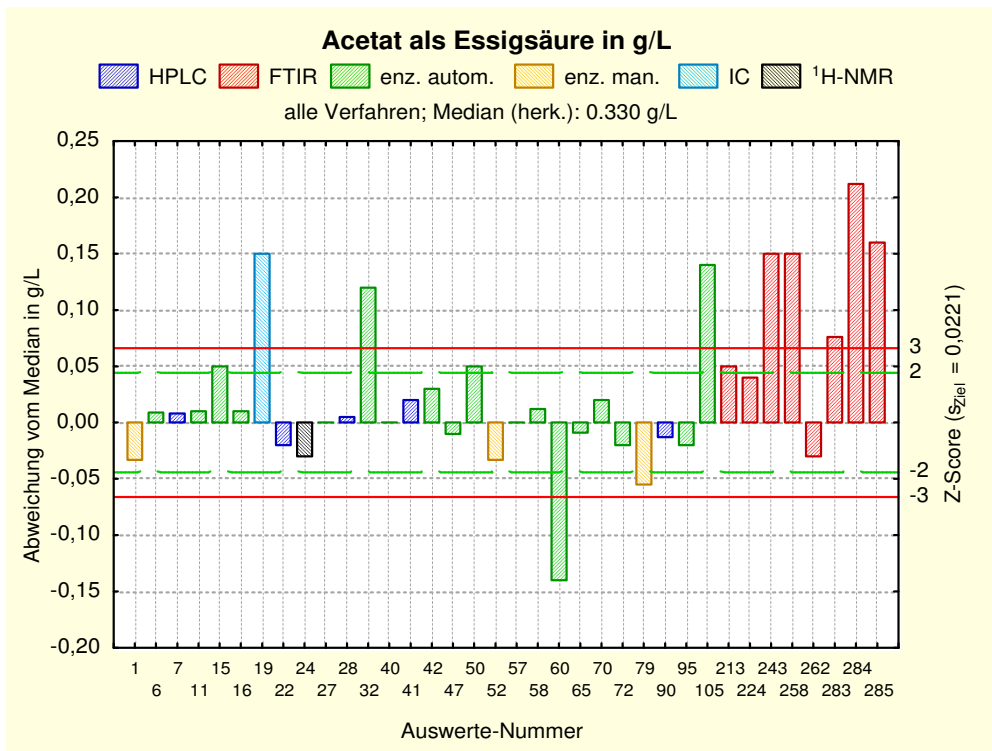
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Wert ab.

5.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	24
Minimalwert	0,190	0,275
Mittelwert	0,339	0,329
Median	0,333	0,330
Maximalwert	0,480	0,380
Standardabweichung (s_L)	0,057	0,025
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011	0,005
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,022	0,022
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,58	1,15
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,49	0,24
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)		

5.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	0,3300	0,0184
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	18	0,3420	0,0322
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	3	0,2898	0,0141
IC	Ionenchromatographie	1	0,4800	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,3000	
	herkömmliche Verfahren	28	0,3335	0,0341
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	8	0,4317	0,0892



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

5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,853	0,043	0,92	1,13	
02	enzymat. Hand	0,793	-0,016	-0,34	-0,42	
06	HPLC	0,740	-0,069	-1,46	-1,79	
07	HPLC	0,865	0,056	1,19	1,46	
08	HPLC	0,815	0,006	0,13	0,16	
11	enzymat. autom.	0,920	0,111	2,35	2,89	
19	IC	1,230	0,421	8,91	10,95	(*)
22	HPLC	1,138	0,329	6,96	8,56	(**)
23	HPLC	0,760	-0,049	-1,04	-1,27	
24	NMR	0,650	-0,159	-3,37	-4,14	
28	HPLC	0,750	-0,059	-1,25	-1,53	
41	HPLC	0,830	0,021	0,44	0,55	
52	HPLC	0,809	0,000	0,00	0,00	
65	enzymat. autom.	0,830	0,021	0,44	0,55	
72	enzymat. autom.	0,730	-0,079	-1,67	-2,05	
90	HPLC	0,720	-0,089	-1,88	-2,31	

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

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

5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,786	0,011	0,25	0,31	
02	enz.(L-) Hand	0,739	-0,036	-0,79	-0,96	
05	enz.(L-), autom.	0,680	-0,095	-2,09	-2,53	
06	enz.(L-), autom.	0,708	-0,067	-1,47	-1,78	
09	enz.(L-), autom.	0,800	0,025	0,55	0,67	
10	enz.(L-) Hand	0,751	-0,024	-0,53	-0,64	
11	enz.(L-), autom.	0,860	0,085	1,87	2,26	
12	enz.(L-), autom.	0,603	-0,172	-3,78	-4,58	
16	enz.(L-), autom.	0,700	-0,075	-1,65	-2,00	
22	enz.(L-), autom.	0,783	0,008	0,18	0,21	
27	enz.(L-), autom.	0,870	0,095	2,09	2,53	
32	enz.(L-), autom.	0,800	0,025	0,55	0,67	
40	enz.(L-), autom.	0,910	0,135	2,96	3,59	
42	enz.(L-), autom.	0,720	-0,055	-1,21	-1,46	
47	enz.(L-), autom.	0,840	0,065	1,43	1,73	
50	enz.(L-), autom.	0,860	0,085	1,87	2,26	
57	enz.(L-), autom.	0,900	0,125	2,74	3,33	
58	enz.(L-), autom.	0,770	-0,005	-0,11	-0,13	
60	enz.(L-) Hand	0,710	-0,065	-1,43	-1,73	
65	enz.(L-), autom.	0,800	0,025	0,55	0,67	
66	enz.(L-) Hand	0,800	0,025	0,55	0,67	
70	enz.(L-), autom.	0,760	-0,015	-0,33	-0,40	
72	enz.(L-), autom.	0,700	-0,075	-1,65	-2,00	
79	enz.(L-) Hand	0,710	-0,065	-1,43	-1,73	
90	enz.(L-), autom.	0,780	0,005	0,11	0,13	
95	enz.(L-), autom.	0,710	-0,065	-1,43	-1,73	

5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,680	-0,132	-2,79	-0,61	
202	FTIR	0,860	0,048	1,01	0,22	
203	FTIR	0,310	-0,502	-10,59	-2,30	
204	FTIR	-0,030	-0,842	-17,77	-3,86	
206	FTIR	0,580	-0,232	-4,89	-1,06	
208	FTIR	0,500	-0,312	-6,58	-1,43	
209	FTIR	0,510	-0,302	-6,37	-1,39	
210	FTIR	0,630	-0,182	-3,84	-0,83	
211	FTIR	0,700	-0,112	-2,36	-0,51	
213	FTIR	0,870	0,058	1,22	0,27	
215	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
216	FTIR	0,670	-0,142	-3,00	-0,65	
217	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
218	FTIR	2,190	1,378	29,07	6,32	(*)
219	FTIR	0,680	-0,132	-2,79	-0,61	
220	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
221	FTIR	0,530	-0,282	-5,95	-1,29	
222	FTIR	0,510	-0,302	-6,37	-1,39	
223	FTIR	0,870	0,058	1,22	0,27	
224	FTIR	0,690	-0,122	-2,57	-0,56	
225	FTIR	0,700	-0,112	-2,36	-0,51	
226	FTIR	0,320	-0,492	-10,38	-2,26	
227	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
228	FTIR	0,480	-0,332	-7,00	-1,52	
229	FTIR	0,510	-0,302	-6,37	-1,39	
231	FTIR	1,120	0,308	6,50	1,41	
232	FTIR	0,700	-0,112	-2,36	-0,51	
234	FTIR	0,650	-0,162	-3,42	-0,74	
236	FTIR	0,910	0,098	2,07	0,45	
238	FTIR	0,800	-0,012	-0,25	-0,06	
239	FTIR	0,500	-0,312	-6,58	-1,43	
243	FTIR	0,800	-0,012	-0,25	-0,06	
244	FTIR	0,010	-0,802	-16,92	-3,68	
245	FTIR	0,500	-0,312	-6,58	-1,43	
246	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
247	FTIR	0,520	-0,292	-6,16	-1,34	
248	FTIR	0,800	-0,012	-0,25	-0,06	
249	FTIR	0,820	0,008	0,17	0,04	
251	FTIR	0,800	-0,012	-0,25	-0,06	
252	FTIR	0,370	-0,442	-9,33	-2,03	
254	FTIR	0,300	-0,512	-10,80	-2,35	
256	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
257	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
258	FTIR	0,530	-0,282	-5,95	-1,29	
259	FTIR	0,710	-0,102	-2,15	-0,47	
260	FTIR	0,470	-0,342	-7,22	-1,57	
261	FTIR	0,860	0,048	1,01	0,22	
262	FTIR	0,220	-0,592	-12,49	-2,72	
263	FTIR	0,700	-0,112	-2,36	-0,51	
264	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
266	FTIR	0,300	-0,512	-10,80	-2,35	
267	FTIR	1,360	0,548	11,56	2,51	
268	FTIR	0,250	-0,562	-11,86	-2,58	
269	FTIR	1,100	0,288	6,08	1,32	
270	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
271	FTIR	0,700	-0,112	-2,36	-0,51	
272	FTIR	1,320	0,508	10,72	2,33	
273	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
274	FTIR	0,800	-0,012	-0,25	-0,06	
275	FTIR	1,100	0,288	6,08	1,32	
276	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
277	FTIR	0,200	-0,612	-12,91	-2,81	
278	FTIR	1,490	0,678	14,30	3,11	
279	FTIR	-0,100	-0,912	-19,24	-4,18	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

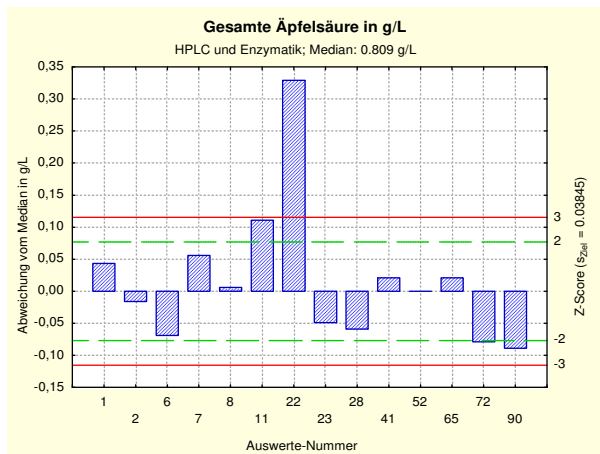
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	0,950	0,138	2,91	0,63	
281	FTIR	0,530	-0,282	-5,95	-1,29	
282	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
283	FTIR	0,580	-0,232	-4,89	-1,06	
285	FTIR	0,760	-0,052	-1,10	-0,24	
286	FTIR	0,200	-0,612	-12,91	-2,81	
320	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
321	FTIR	0,670	-0,142	-3,00	-0,65	
339	FTIR	0,300	-0,512	-10,80	-2,35	
346	FTIR	0,600	-0,212	-4,47	-0,97	
351	FTIR	0,400	-0,412	-8,69	-1,89	
366	FTIR	0,100	-0,712	-15,02	-3,27	

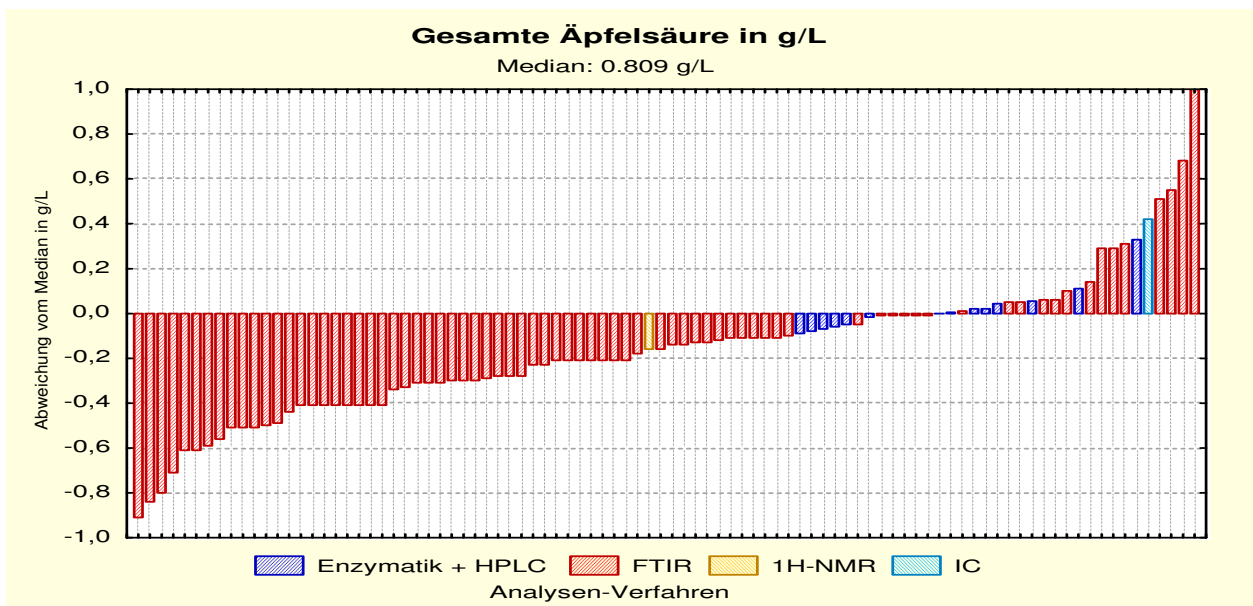
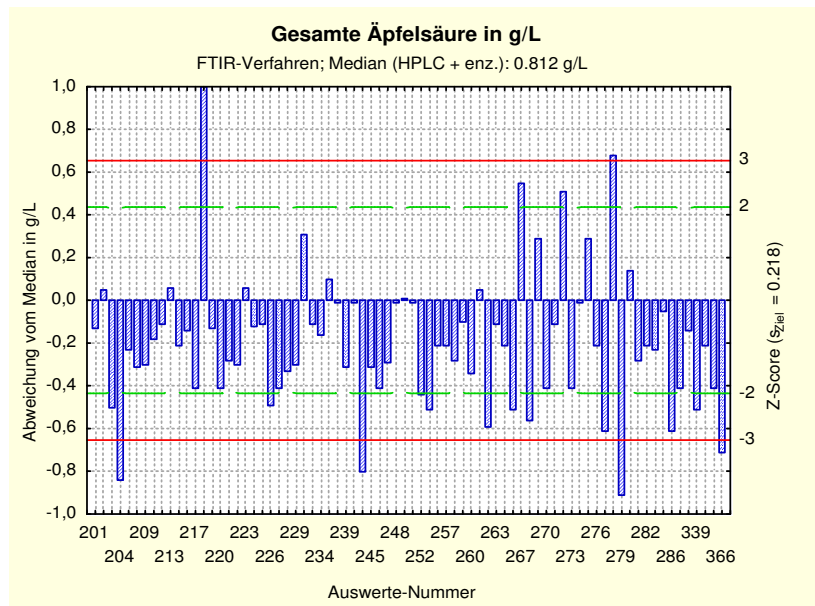
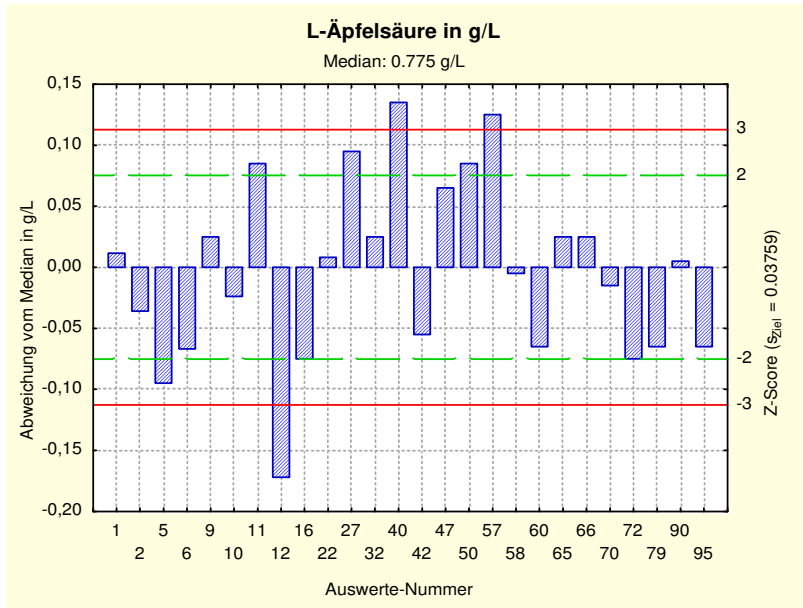
5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	14	13	26
Minimalwert	0,72	0,72	0,60
Mittelwert	0,825	0,801	0,771
Median	0,812	0,809	0,775
Maximalwert	1,14	0,92	0,91
Standardabweichung (s _L)	0,107	0,060	0,074
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,029	0,017	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,047	0,047	0,046
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,039	0,038	0,038
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,218	0,218	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,25	1,26	1,62
Quotient (s _L /s _{exp})	2,77	1,55	1,96
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,49	0,27	
Quotient (u _M /s _H)	0,60	0,35	0,32
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,74	0,43	0,38
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,13	0,08	

5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	0,799	0,0699
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	3	0,827	0,1078
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	2	0,823	0,0477
IC	Ionenchromatographie	1	1,230	
	herkömmliche Verfahren ohne IC: Ges. Äpfelsäure	14	0,810	0,0744
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	0,591	0,2642
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,650	
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	0,780	0,0866
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	6	0,749	0,0429
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	26	0,772	0,0754





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

5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	1,75	0,154	1,83	
02	enzymat. Hand	1,65	0,053	0,63	
05	enzymat. autom.	1,49	-0,110	-1,30	
06	enzymat. autom.	1,62	0,020	0,24	
07	HPLC	1,58	-0,020	-0,24	
09	enzymat. autom.	1,60	0,000	0,00	
10	enzymat. Hand	1,74	0,138	1,64	
11	enzymat. autom.	1,64	0,038	0,45	
12	enzymat. autom.	1,17	-0,432	-5,12	(**)
19	IC	1,68	0,080	0,95	
22	enzymat. autom.	1,63	0,026	0,31	
23	HPLC	1,51	-0,090	-1,07	
24	NMR	1,49	-0,110	-1,30	
28	HPLC	1,60	0,000	0,00	
41	HPLC	1,56	-0,040	-0,47	
52	HPLC	1,51	-0,090	-1,07	
65	enzymat. autom.	1,60	-0,005	-0,06	
66	enzymat. Hand	1,62	0,020	0,24	
72	enzymat. autom.	0,36	-1,240	-14,70	(*)
90	HPLC	1,54	-0,060	-0,71	
95	enzymat. autom.	1,50	-0,100	-1,19	

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

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

5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,43	0,130	1,84	1,72	
02	enz.(L-) Hand	1,33	0,027	0,38	0,36	
05	enz.(L-) autom.	1,24	-0,060	-0,85	-0,79	
06	enz.(L-) autom.	1,31	0,007	0,10	0,09	
09	enz.(L-) autom.	1,28	-0,020	-0,28	-0,26	
10	enz.(L-) Hand	1,39	0,090	1,27	1,19	
11	enz.(L-) autom.	1,35	0,046	0,65	0,61	
12	enz.(L-) autom.	0,95	-0,348	-4,93	-4,61	
16	enz.(L-) autom.	1,30	0,000	0,00	0,00	
22	enz.(L-) autom.	1,33	0,030	0,42	0,40	
27	enz.(L-) autom.	1,45	0,150	2,12	1,98	
32	enz.(L-) autom.	1,30	0,000	0,00	0,00	
40	enz.(L-) autom.	1,41	0,110	1,56	1,46	
47	enz.(L-) autom.	1,42	0,120	1,70	1,59	
50	enz.(L-) autom.	1,19	-0,110	-1,56	-1,46	
58	enz.(L-) autom.	1,29	-0,005	-0,07	-0,07	
60	enz.(L-) autom.	1,26	-0,040	-0,57	-0,53	
65	enz.(L-) autom.	1,30	0,000	0,00	0,00	
66	enz.(L-) Hand	1,30	-0,001	-0,01	-0,01	
70	enz.(L-) autom.	1,32	0,020	0,28	0,26	
72	enz.(L-) autom.	0,11	-1,190	-16,83	-15,74	(*)
79	enz.(L-) Hand	1,28	-0,020	-0,28	-0,26	
90	enz.(L-) autom.	1,41	0,110	1,56	1,46	
95	enz.(L-) autom.	1,23	-0,070	-0,99	-0,93	

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

5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,54	-0,058	-0,68	-0,28	
202	FTIR	1,39	-0,208	-2,46	-0,99	
203	FTIR	1,17	-0,428	-5,08	-2,05	
204	FTIR	1,11	-0,488	-5,79	-2,33	
206	FTIR	2,11	0,512	6,09	2,45	
208	FTIR	1,70	0,102	1,22	0,49	
209	FTIR	1,64	0,042	0,50	0,20	
210	FTIR	1,54	-0,058	-0,68	-0,28	
211	FTIR	1,80	0,202	2,40	0,97	
213	FTIR	1,53	-0,068	-0,80	-0,32	
215	FTIR	1,20	-0,398	-4,72	-1,90	
216	FTIR	0,98	-0,618	-7,33	-2,95	
217	FTIR	0,80	-0,798	-9,47	-3,82	
218	FTIR	1,38	-0,218	-2,58	-1,04	
219	FTIR	1,34	-0,258	-3,06	-1,23	
220	FTIR	1,50	-0,098	-1,16	-0,47	
221	FTIR	1,27	-0,328	-3,89	-1,57	
222	FTIR	1,72	0,122	1,45	0,59	
223	FTIR	1,72	0,122	1,45	0,59	
224	FTIR	1,56	-0,038	-0,45	-0,18	
225	FTIR	1,20	-0,398	-4,72	-1,90	
226	FTIR	1,33	-0,268	-3,18	-1,28	
227	FTIR	1,32	-0,278	-3,30	-1,33	
228	FTIR	1,46	-0,138	-1,63	-0,66	
229	FTIR	1,04	-0,558	-6,62	-2,67	
230	FTIR	1,31	-0,288	-3,41	-1,38	
231	FTIR	1,33	-0,268	-3,18	-1,28	
232	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
234	FTIR	1,17	-0,428	-5,08	-2,05	
236	FTIR	1,62	0,022	0,27	0,11	
238	FTIR	1,24	-0,358	-4,25	-1,71	
239	FTIR	0,90	-0,698	-8,28	-3,34	
243	FTIR	1,20	-0,398	-4,72	-1,90	
244	FTIR	1,52	-0,078	-0,92	-0,37	
245	FTIR	1,30	-0,298	-3,53	-1,42	
246	FTIR	1,60	0,002	0,03	0,01	
247	FTIR	1,30	-0,298	-3,53	-1,42	
248	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
249	FTIR	1,36	-0,238	-2,82	-1,14	
251	FTIR	1,20	-0,398	-4,72	-1,90	
252	FTIR	1,11	-0,488	-5,79	-2,33	
254	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
256	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
257	FTIR	1,10	-0,498	-5,91	-2,38	
258	FTIR	1,41	-0,188	-2,23	-0,90	
259	FTIR	1,29	-0,308	-3,65	-1,47	
260	FTIR	0,80	-0,798	-9,47	-3,82	
261	FTIR	1,49	-0,108	-1,28	-0,51	
262	FTIR	1,35	-0,248	-2,94	-1,18	
263	FTIR	1,60	0,002	0,03	0,01	
264	FTIR	0,90	-0,698	-8,28	-3,34	
266	FTIR	1,60	0,002	0,03	0,01	
267	FTIR	1,94	0,342	4,07	1,64	
268	FTIR	1,62	0,022	0,27	0,11	
269	FTIR	1,60	0,002	0,03	0,01	
270	FTIR	1,33	-0,268	-3,18	-1,28	
271	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
272	FTIR	1,61	0,012	0,15	0,06	
273	FTIR	1,00	-0,5975	-7,09	-2,86	
274	FTIR	0,94	-0,658	-7,81	-3,15	
275	FTIR	1,50	-0,098	-1,16	-0,47	
276	FTIR	1,37	-0,228	-2,70	-1,09	
277	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
278	FTIR	0,85	-0,748	-8,88	-3,58	
279	FTIR	1,00	-0,5975	-7,09	-2,86	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

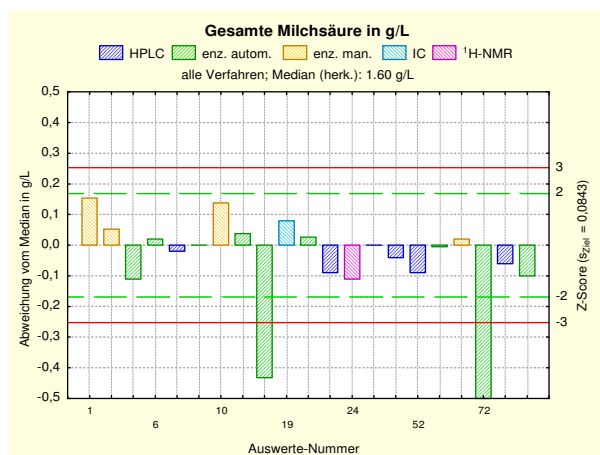
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	1,24	-0,358	-4,25	-1,71	
282	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
283	FTIR	1,27	-0,328	-3,89	-1,57	
284	FTIR	1,72	0,122	1,45	0,59	
285	FTIR	0,93	-0,668	-7,93	-3,19	
286	FTIR	1,10	-0,498	-5,91	-2,38	
320	FTIR	1,30	-0,298	-3,53	-1,42	
321	FTIR	1,63	0,032	0,39	0,16	
339	FTIR	1,50	-0,098	-1,16	-0,47	
346	FTIR	0,80	-0,798	-9,47	-3,82	
351	FTIR	1,40	-0,198	-2,35	-0,94	
366	FTIR	1,10	-0,498	-5,91	-2,38	

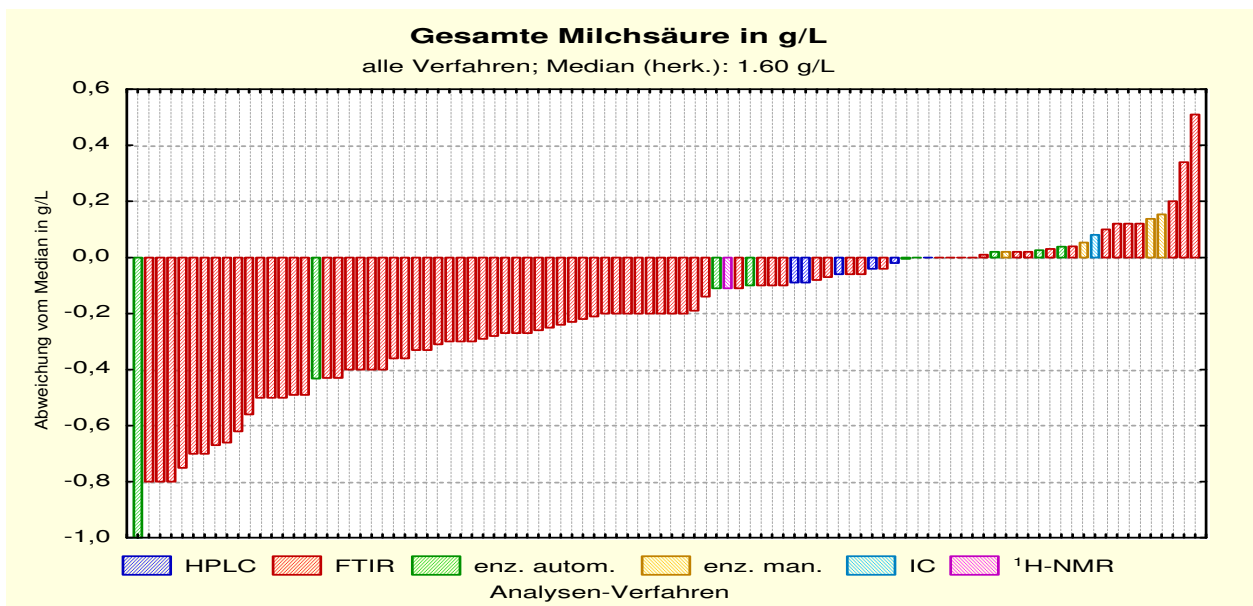
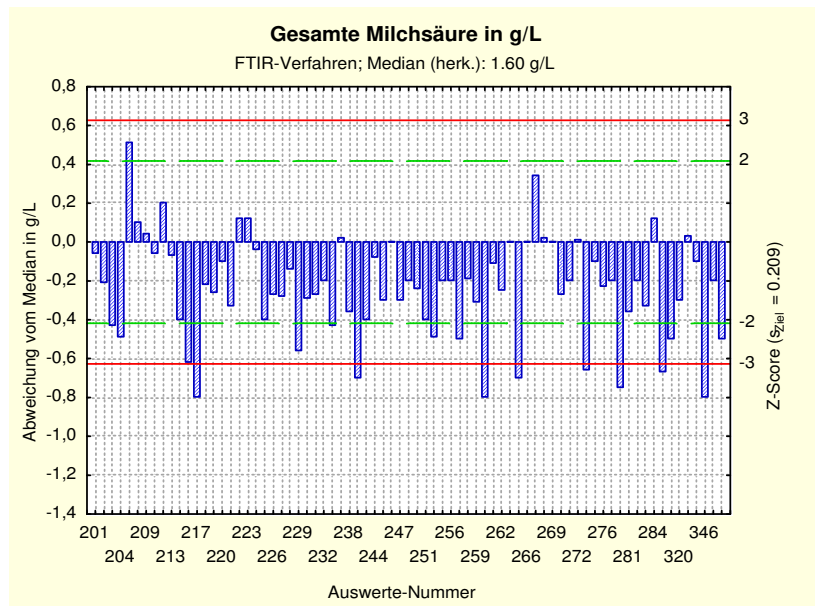
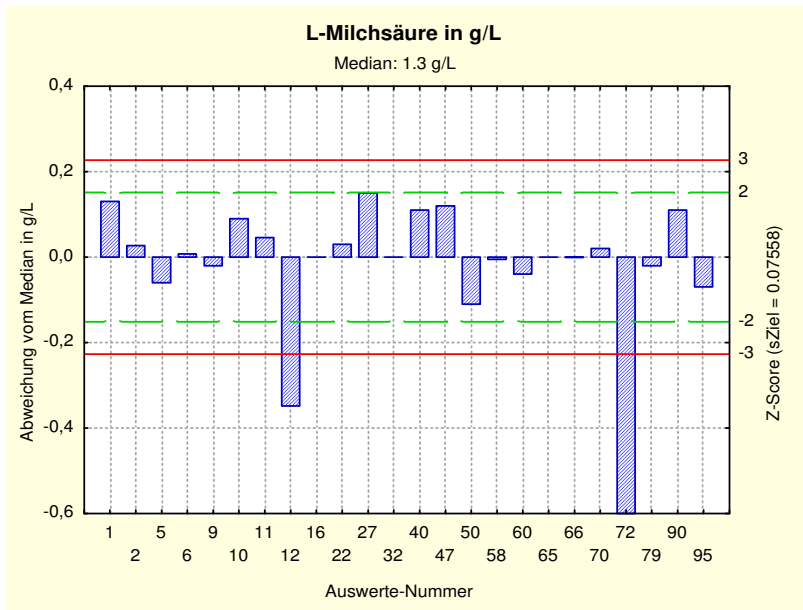
5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse [g/L]:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	20	19	23
Minimalwert	1,17	1,49	0,95
Mittelwert	1,574	1,595	1,307
Median	1,598	1,600	1,300
Maximalwert	1,75	1,75	1,45
Standardabweichung (s _L)	0,122	0,078	0,103
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,027	0,018	0,021
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,084	0,084	0,071
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,076
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,209	0,209	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,45	0,93	1,46
Quotient (s _L /s _{exp})			1,36
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,58	0,37	
Quotient (u _M /s _H)	0,32	0,21	0,30
Quotient (u _M /s _{exp herk.})			0,28
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,13	0,09	

5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	1,550	0,0418
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	9	1,491	0,2137
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	1,691	0,0737
IC	Ionenchromatographie	1	1,680	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	1,490	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	21	1,577	0,0950
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	1,358	0,2570
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	1,300	0,0907
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	1,345	0,0715
	alle Verfahren L-Milchsäure	24	1,310	0,0841





5.15 Reduktone [mg/L]

5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	17,0	-5,00	-2,26	
06	Acetaldehyd/potent.	5,0	-17,00	-7,69	(*)
14	Glyoxal/potentiometr.	20,3	-1,70	-0,77	
15	Glyoxal/potentiometr.	19,0	-3,00	-1,36	
16	Glyoxal/Stärke	27,0	5,00	2,26	
18	Glyoxal/Stärke	39,0	17,00	7,69	(*)
19	Glyoxal/potentiometr.	22,3	0,30	0,14	
21	Glyoxal/Stärke	20,0	-2,00	-0,90	
22	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-10,00	-4,52	
23	Glyoxal/potentiometr.	21,0	-1,00	-0,45	
24	Glyoxal/Stärke	14,0	-8,00	-3,62	
25	Glyoxal/Stärke	27,0	5,00	2,26	
27	Glyoxal/potentiometr.	15,3	-6,69	-3,03	
28	Propionaldehyd/Stärke	22,0	0,00	0,00	
31	Glyoxal/Stärke	10,0	-12,00	-5,43	(*)
32	Glyoxal/Stärke	21,0	-1,00	-0,45	
38	Glyoxal/Stärke	18,0	-4,00	-1,81	
39	Glyoxal/potentiometr.	22,6	0,60	0,27	
40	Glyoxal/potentiometr.	31,0	9,00	4,07	
41	Glyoxal/potentiometr.	18,2	-3,80	-1,72	
44	Glyoxal/Stärke	25,0	3,00	1,36	
46	Glyoxal/potentiometr.	17,7	-4,34	-1,96	
47	Propionaldehyd/Stärke	30,0	8,00	3,62	
48	Glyoxal/Stärke	20,0	-2,00	-0,90	
52	Glyoxal/potentiometr.	25,0	3,00	1,36	
54	Propionaldehyd/Stärke	22,0	0,00	0,00	
56	Glyoxal/Stärke	23,0	1,00	0,45	
58	Glyoxal/MTT	9,1	-12,95	-5,86	(*)
60	Glyoxal/potentiometr.	22,0	0,00	0,00	
62	Glyoxal/potentiometr.	23,0	1,00	0,45	
63	Glyoxal/Stärke	31,0	9,00	4,07	
64	Glyoxal/potentiometr.	50,0	28,00	12,67	(*)
66	Glyoxal/Stärke	28,0	6,00	2,71	
67	Glyoxal/Stärke	35,0	13,00	5,88	(*)
68	Glyoxal/potentiometr.	29,0	7,00	3,17	
71	Glyoxal/potentiometr.	18,0	-4,00	-1,81	
72	Glyoxal/potentiometr.	19,0	-3,00	-1,36	
75	k. A.	40,0	18,00	8,14	(*)
77	Glyoxal/potentiometr.	44,0	22,00	9,95	(*)
78	Glyoxal/potentiometr.	38,0	16,00	7,24	(*)
79	Acetaldehyd/Stärke	39,0	17,00	7,69	(*)
96	Glyoxal/Stärke	24,0	2,00	0,90	
109	Glyoxal/potentiometr.	37,0	15,00	6,79	(*)

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

5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

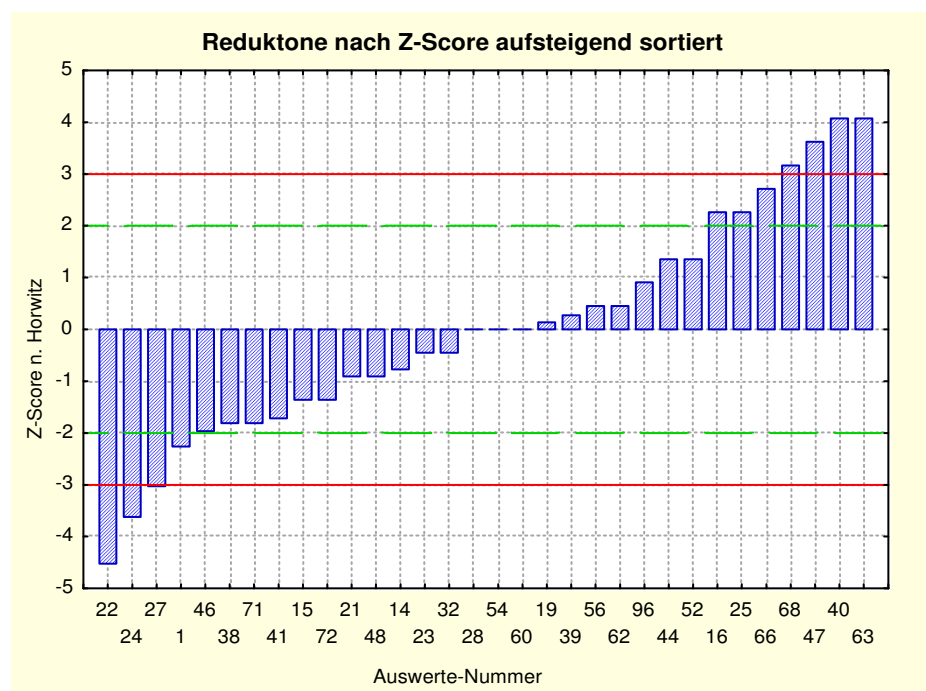
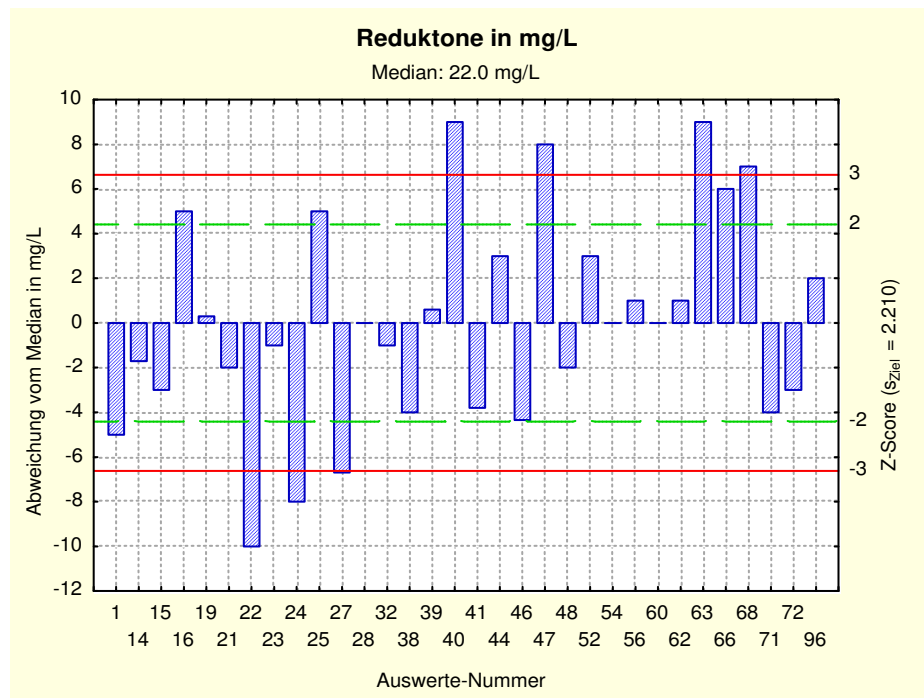
Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	32
Minimalwert	12,0
Mittelwert	22,01
Median	22,00
Maximalwert	31,0
Standardabweichung (sL)	4,804
Standardfehler des Mittelwertes	0,849
Zielstandardabweichung n. Horwitz (sH)	2,210
Zielstandardabweichung, experimentell (sexp)	
Horrat-Wert (sL/sH)	2,17
Quotient (sL/sexp)	
Quotient (u_M/s_H)	0,38
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	

Anmerkung:

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

5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	39,00	
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	5,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	24,62	5,14
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	16	23,61	7,64
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	20	24,32	9,07
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	9,05	
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	40,00	
	alle Verfahren	43	24,06	9,45



5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations-, photometrischen und FTIR-Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	68,0	9,20	1,81	
06	LwK 6.2	58,8	0,00	0,00	
07	LwK 6.2	61,0	2,20	0,43	
10	LwK 6.2	62,7	3,90	0,77	
11	LwK 6.2	56,0	-2,80	-0,55	
12	LwK 6.2	64,6	5,84	1,15	
29	LwK 6.2	62,1	3,30	0,65	
50	LwK 6.3	46,0	-12,80	-2,51	
55	LwK 6.3	46,0	-12,80	-2,51	
57	LwK 6.4	47,0	-11,80	-2,32	
58	LwK 6.4	59,5	0,70	0,14	
65	LwK 6.2	63,0	4,20	0,82	
70	LwK 6.4	42,0	-16,80	-3,30	
91	LwK 6.2 m	68,2	9,36	1,84	
95	LwK 6.2	66,7	7,90	1,55	
104	LwK 6.3	38,0	-20,80	-4,08	
106	LwK 6.2	62,1	3,30	0,65	
107	LwK 6.3	58,8	0,00	0,00	
206	LwK 6.5	54,0	-4,80	-0,94	
207	LwK 6.5	61,0	2,20	0,43	
210	LwK 6.5	59,4	0,60	0,12	
219	LwK 6.5	62,0	3,20	0,63	
226	LwK 6.5	59,0	0,20	0,04	
239	LwK 6.5	55,0	-3,80	-0,75	
253	LwK 6.5	52,0	-6,80	-1,33	
254	LwK 6.5	56,0	-2,80	-0,55	
260	LwK 6.5	68,6	9,80	1,92	
264	LwK 6.5	35,0	-23,80	-4,67	
265	LwK 6.5	55,0	-3,80	-0,75	
270	LwK 6.5	52,0	-6,80	-1,33	
273	LwK 6.5	53,0	-5,80	-1,14	
320	LwK 6.5	62,0	3,20	0,63	
339	LwK 6.5	41,0	-17,80	-3,49	
351	LwK 6.5	64,0	5,20	1,02	
366	LwK 6.5	53,0	-5,80	-1,14	

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

5.16.2 Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	61,5	-3,50	-0,63	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	60,9	-4,10	-0,74	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	60,0	-5,00	-0,90	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	-1,00	-0,18	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	71,0	6,00	1,08	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	52,0	-13,00	-2,34	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	65,0	0,00	0,00	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	50,0	-15,00	-2,70	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	3,00	0,54	
27	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	-3,02	-0,54	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	67,0	2,00	0,36	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	17,0	-48,00	-8,65	(*)
32	LwK 6.1(incl.Red.)	65,0	0,00	0,00	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	-24,00	-4,33	
39	LwK 6.1(incl.Red.)	64,5	-0,50	-0,09	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,5	-9,50	-1,71	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	74,0	9,00	1,62	
46	LwK 6.1 (incl.Red.)	63,1	-1,87	-0,34	
47	LwK 6.1 (incl.Red.)	68,0	3,00	0,54	
48	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	-5,00	-0,90	
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	0,00	0,00	
56	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-7,00	-1,26	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	64,0	-1,00	-0,18	
62	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	-3,00	-0,54	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	63,0	-2,00	-0,36	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	70,0	5,00	0,90	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	73,0	8,00	1,44	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	74,0	9,00	1,62	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	0,00	0,00	
71	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	-16,00	-2,88	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	0,00	0,00	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	1,00	0,18	
79	LwK 6.1 (incl.Red.)	74,0	9,00	1,62	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	67,0	2,00	0,36	
109	Redox incl.	61,0	-4,00	-0,72	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter ergänzt.

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.)	44,5	5,50	1,53	0,99	
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,6	1,60	0,45	0,29	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	2,00	0,56	0,36	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	-2,00	-0,56	-0,36	
18	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	-12,00	-3,34	-2,16	
21	LwK 6.1 (excl.Red.)	51,0	12,00	3,34	2,16	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,0	1,00	0,28	0,18	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	44,0	5,00	1,39	0,90	
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	-3,00	-0,83	-0,54	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	2,00	0,56	0,36	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,7	7,67	2,13	1,38	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	6,00	1,67	1,08	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	7,0	-32,00	-8,90	-5,77	(*)
32	LwK 6.1 (excl.Red.)	44,0	5,00	1,39	0,90	
38	LwK 6.1 (excl.Red.)	23,0	-16,00	-4,45	-2,88	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,9	2,90	0,81	0,52	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-4,00	-1,11	-0,72	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,3	-1,70	-0,47	-0,31	
44	LwK 6.1 (excl.Red.)	49,0	10,00	2,78	1,80	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,5	6,47	1,80	1,17	
47	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,0	-1,00	-0,28	-0,18	
48	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,0	7,00	1,95	1,26	
52	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-4,00	-1,11	-0,72	
54	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	4,00	1,11	0,72	
56	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-4,00	-1,11	-0,72	
60	LwK 6.1 (excl.Red.)	42,0	3,00	0,83	0,54	
62	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	0,00	0,00	0,00	
63	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	-7,00	-1,95	-1,26	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	-19,00	-5,29	-3,42	
66	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	6,00	1,67	1,08	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	-3,00	-0,83	-0,54	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	48,0	9,00	2,50	1,62	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S _H incl. Red.	Hinweis
72	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	-9,00	-2,50	-1,62	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	-14,00	-3,89	-2,52	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	-17,00	-4,73	-3,06	
78	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	-11,00	-3,06	-1,98	
79	LwK 6.1(excl.Red.)	35,0	-4,00	-1,11	-0,72	
109	Redox excl.	24,0	-15,00	-4,17	-2,70	

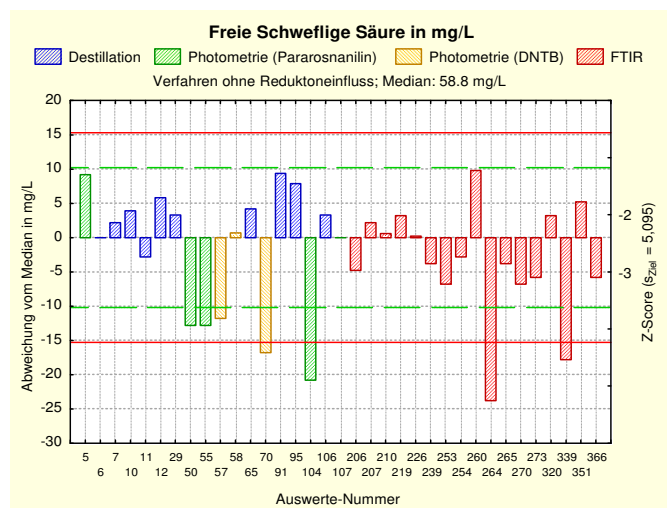
(S_H incl. Red.): Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone

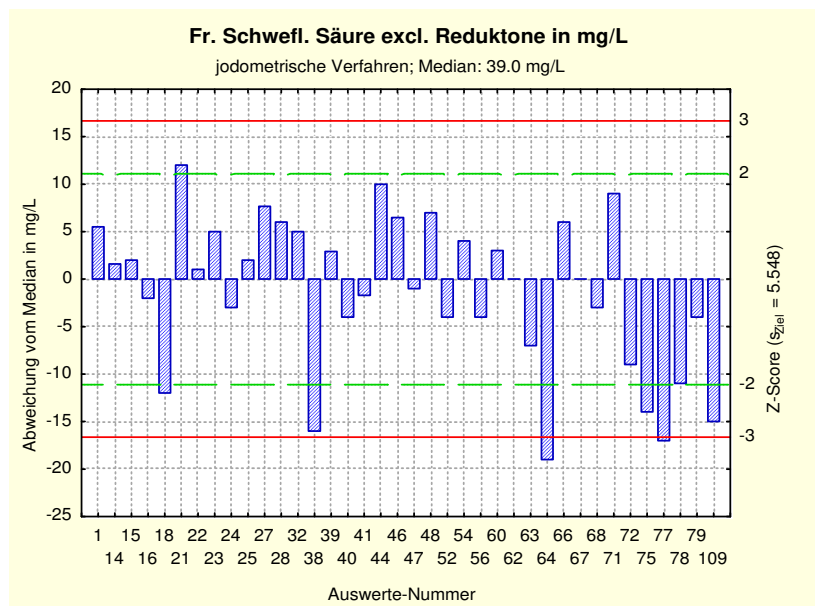
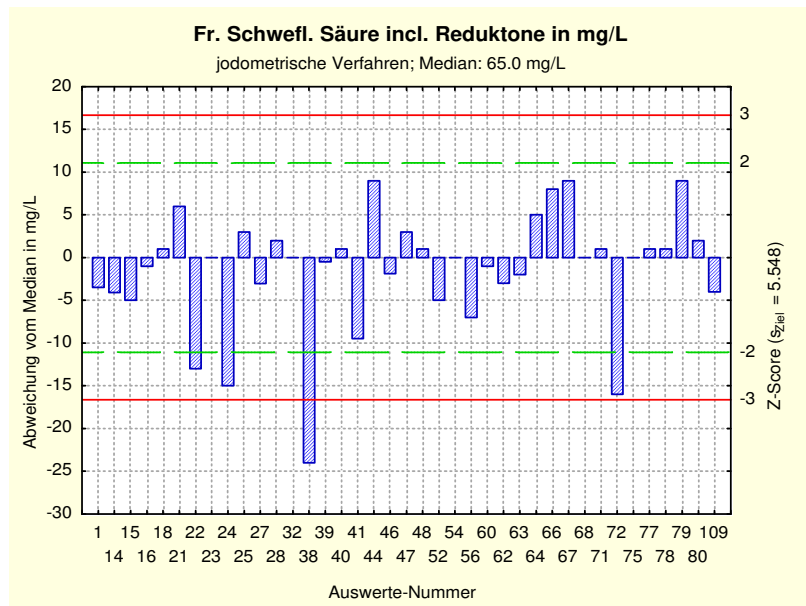
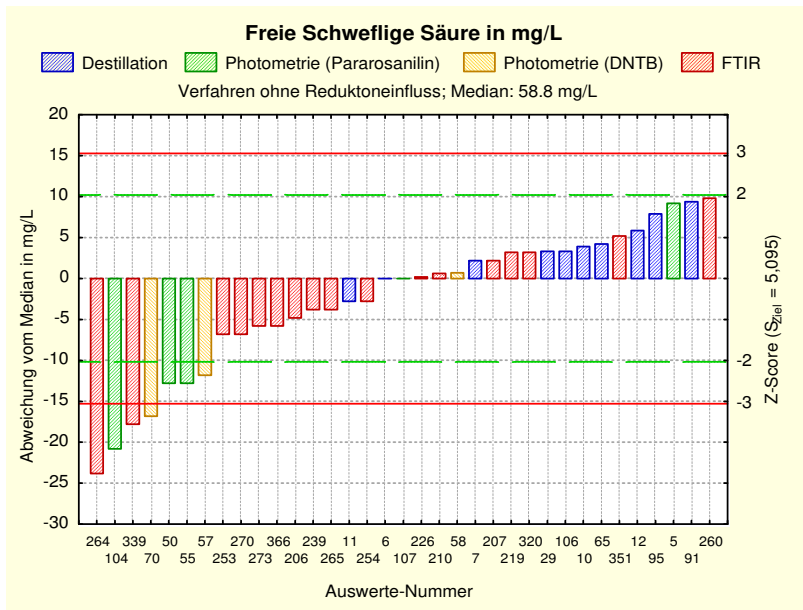
5.16.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	Jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	18	35	39	38
Minimalwert	38,0	35,0	41,0	20,0
Mittelwert	57,25	56,36	63,55	37,67
Median	60,25	58,80	65,00	39,00
Maximalwert	68,2	68,6	74,0	51,0
Standardabweichung (s _L)	9,315	8,679	6,895	8,082
Standardfehler des Mittelwertes	2,196	1,467	1,104	1,311
Zielstandardabweichung n. Horwitz (S _H)	5,202	5,095	5,548	3,595
Zielstandardabweichung, experimentell (S _H incl. Red.)				5,548
Horrat-Wert (s _L /S _H)	1,79	1,70	1,24	2,25
Quotient (s _L /S _H incl. Red.)				1,46
Quotient (U _M /S _H)	0,42	0,29	0,20	0,36
Quotient (U _M / S _{exp} herk.)				0,24

5.16.5 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	39	64,07	5,88
(excl.Red.)	mit Abzug der Reduktone	38	38,05	8,32
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	61,00	
Redox excl.	exclusive Reduktone	1	24	
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	62,06	3,12
LwK 6.2 m	modifiziert: 10 ml Probe, 5ml 15%ige Phosphorsäure,	1	68,16	
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	5	50,52	11,93
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	49,04	9,36
	Destillations- und photometrische Verfahren	18	57,77	9,53
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	13	40,29	6,07
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	35	57,06	8,30





5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

5.17.1 Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	94,0	-13,00	-1,53	-2,43	
02	LwK 7.1	100,0	-7,00	-0,83	-1,31	
04	LwK 7.3	138,6	31,60	3,73	5,90	(**)
05	LwK 7.7	114,0	7,00	0,83	1,31	
06	LwK 7.3	107,0	0,00	0,00	0,00	
07	LwK 7.3	97,0	-10,00	-1,18	-1,87	
09	LwK 7.3	114,9	7,90	0,93	1,47	
10	LwK 7.3	114,8	7,80	0,92	1,46	
11	LwK 7.3	117,0	10,00	1,18	1,87	
12	LwK 7.3	106,1	-0,92	-0,11	-0,17	
14	LwK 7.4.2	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
15	LwK 7.4.2	100,0	-7,00	-0,83	-1,31	
16	LwK 7.4.1	117,0	10,00	1,18	1,87	
18	LwK 7.5.1(incl.	107,0	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 7.4.2	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
22	LwK 7.5.1(excl.	108,0	1,00	0,12	0,19	
23	LwK 7.5.1(incl.	124,0	17,00	2,01	3,17	
24	LwK 7.4.2m	110,0	3,00	0,35	0,56	
25	LwK 7.5.1(incl.	100,0	-7,00	-0,83	-1,31	
27	LwK 7.4.2	110,0	3,00	0,35	0,56	
28	LwK 7.5.1(incl.	108,0	1,00	0,12	0,19	
29	LwK 7.3	123,1	16,10	1,90	3,01	
31	LwK 7.5.1(incl.	104,0	-3,00	-0,35	-0,56	
32	LwK 7.4.1	108,0	1,00	0,12	0,19	
38	LwK 7.5.1(incl.	122,0	15,00	1,77	2,80	
39	LwK 7.4.1	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
40	LwK 7.7	108,0	1,00	0,12	0,19	
41	LwK 7.4.2	104,0	-3,00	-0,35	-0,56	
44	LwK 7.4.2	111,0	4,00	0,47	0,75	
46	LwK 7.5.1(incl.	119,5	12,53	1,48	2,34	
47	LwK 7.4.2	107,0	0,00	0,00	0,00	
48	LwK 7.5.1(incl.	112,0	5,00	0,59	0,93	
50	LwK 7.7	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
52	LwK 7.4.2	102,5	-4,50	-0,53	-0,84	
54	LwK 7.5.2(incl.	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
55	LwK 7.4.1	101,0	-6,00	-0,71	-1,12	
56	LwK 7.4.2	116,0	9,00	1,06	1,68	
57	LwK 7.7	91,0	-16,00	-1,89	-2,99	
58	LwK 7.7	101,0	-6,00	-0,71	-1,12	
60	LwK 7.4.2	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
62	LwK 7.5.2(incl.	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
63	LwK 7.5.1(incl.	102,0	-5,00	-0,59	-0,93	
64	LwK 7.5.1(incl.	108,0	1,00	0,12	0,19	
65	IFU 7	111,0	4,00	0,47	0,75	
66	LwK 7.4.2	110,0	3,00	0,35	0,56	
67	LwK 7.5.3(incl.	118,0	11,00	1,30	2,05	
68	LwK 7.5.1(incl.	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
70	LwK 7.4.2	122,0	15,00	1,77	2,80	
71	LwK 7.5.1(incl.	120,0	13,00	1,53	2,43	
72	LwK 7.5.1(excl.	99,0	-8,00	-0,94	-1,49	
75	LwK 7.5.1(incl.	110,0	3,00	0,35	0,56	
77	LwK 7.5.1(incl.	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
78	LwK 7.5.1(incl.	112,7	5,70	0,67	1,06	
79	LwK 7.4.1	105,5	-1,50	-0,18	-0,28	
80	LwK 7.5.1(incl.	108,0	1,00	0,12	0,19	
91	LwK 7.3 m	116,2	9,16	1,08	1,71	
92	LwK 7.4.2	107,0	0,00	0,00	0,00	
93	LwK 7.5.1(incl.	117,2	10,20	1,20	1,90	
94	LwK 7.5.2(incl.	93,0	-14,00	-1,65	-2,61	
95	LwK 7.3	101,1	-5,90	-0,70	-1,10	

Der mit (**) gekennzeichnete Wert bleibt der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
96	LwK 7.5.1(incl.	116,0	9,00	1,06	1,68	
97	LwK 7.5.1(incl.	117,2	10,19	1,20	1,90	
99	LwK 7.5.1(incl.	110,0	3,00	0,35	0,56	
101	LwK 7.4.2	110,0	3,00	0,35	0,56	
104	LwK 7.6	102,0	-5,00	-0,59	-0,93	
105	LwK 7.7	110,0	3,00	0,35	0,56	
106	LwK 7.3	105,4	-1,60	-0,19	-0,30	
107	LwK 7.6	110,6	3,60	0,42	0,67	
109	Redox incl.	108,0	1,00	0,12	0,19	
206	LwK 7.8	101,0	-6,00	-0,71	-1,12	
207	LwK 7.8	107,0	0,00	0,00	0,00	
208	LwK 7.8	66,0	-41,00	-4,84	-7,65	(**)
209	LwK 7.8	103,9	-3,10	-0,37	-0,58	
210	LwK 7.8	109,5	2,50	0,30	0,47	
219	LwK 7.8	78,0	-29,00	-3,42	-5,41	(**)
226	LwK 7.8	112,0	5,00	0,59	0,93	
239	LwK 7.8	98,0	-9,00	-1,06	-1,68	
253	LwK 7.8	100,0	-7,00	-0,83	-1,31	
254	LwK 7.8	107,0	0,00	0,00	0,00	
260	LwK 7.8	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
264	LwK 7.8	114,0	7,00	0,83	1,31	
265	LwK 7.8	112,0	5,00	0,59	0,93	
270	LwK 7.8	121,0	14,00	1,65	2,61	
273	LwK 7.8	103,0	-4,00	-0,47	-0,75	
320	LwK 7.8	106,0	-1,00	-0,12	-0,19	
339	LwK 7.8	98,0	-9,00	-1,06	-1,68	
351	LwK 7.8	111,0	4,00	0,47	0,75	
366	LwK 7.8	110,0	3,00	0,35	0,56	

Mit (**) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab. Mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie erhaltene Werte (LwK 7.8) wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Ergebnisse herkömmlicher Methoden (Vergleichsstandardabweichung OIV-MA-323-04A).

5.17.2 Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	-3,00	-0,35	-0,56	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	10,00	1,15	1,87	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	14,00	1,61	2,61	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	100,0	-10,00	-1,15	-1,87	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-2,00	-0,23	-0,37	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	-6,00	-0,69	-1,12	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	12,00	1,38	2,24	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,5	9,53	1,10	1,78	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	2,00	0,23	0,37	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	105,0	-5,00	-0,58	-0,93	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	106,0	-4,00	-0,46	-0,75	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,0	-8,00	-0,92	-1,49	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-2,00	-0,23	-0,37	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	118,0	8,00	0,92	1,49	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-4,00	-0,46	-0,75	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	10,00	1,15	1,87	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	8,00	0,92	1,49	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	0,00	0,00	0,00	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-4,00	-0,46	-0,75	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,7	2,70	0,31	0,50	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-2,00	-0,23	-0,37	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,2	7,20	0,83	1,34	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	93,0	-17,00	-1,96	-3,17	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,0	6,00	0,69	1,12	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,2	7,19	0,83	1,34	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	0,00	0,00	0,00	
109	Redox incl.	108,0	-2,00	-0,23	-0,37	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter ergänzt.

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
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	68,0	-16,50	-2,38	-3,08	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	23,50	3,39	4,39	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,0	18,50	2,67	3,45	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	73,0	-11,50	-1,66	-2,15	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,0	1,50	0,22	0,28	
31	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	9,50	1,37	1,77	
38	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	19,50	2,81	3,64	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,9	17,37	2,51	3,24	
48	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,0	7,50	1,08	1,40	
54	LwK 7.5.2(excl. Red.)	83,0	-1,50	-0,22	-0,28	
62	LwK 7.5.2(excl. Red.)	83,0	-1,50	-0,22	-0,28	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	71,0	-13,50	-1,95	-2,52	
64	LwK 7.5.1(excl. Red.)	58,0	-26,50	-3,82	-4,95	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	77,0	-7,50	-1,08	-1,40	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	17,50	2,52	3,27	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	99,0	14,50	2,09	2,71	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-14,50	-2,09	-2,71	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	62,0	-22,50	-3,25	-4,20	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	74,7	-9,80	-1,41	-1,83	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	23,50	3,39	4,39	
93	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,9	12,40	1,79	2,31	
94	LwK 7.5.2(excl. Red.)	66,0	-18,50	-2,67	-3,45	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,0	7,50	1,08	1,40	
97	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,9	17,38	2,51	3,24	
99	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	4,50	0,65	0,84	
109	Redox excl.	71,0	-13,50	-1,95	-2,52	

Anmerkung:

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

5.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		incl. Reduktone	excl. Reduktone
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	34	33	27	26
Minimalwert	94,0	94,0	93,0	58,0
Mittelwert	109,06	108,17	111,02	84,97
Median	107,00	107,00	110,00	84,50
Maximalwert	138,6	123,1	124,0	108,0
Standardabweichung (s_L)	8,494	6,805	7,515	14,775
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,457	1,185	1,446	2,898
Zielstandardabweichung				
- n. Horwitz (s_H)	8,473	8,473	8,675	6,934
- experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,00	0,80	0,87	2,13
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,59	1,27	1,40	2,76
Quotient (u_M/s_H)	0,17	0,14	0,17	0,42
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,27	0,22	0,27	0,54

5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	100,00	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	10	111,53	10,908
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	1	116,16	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	5	107,20	6,557
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	15	107,18	5,563
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	110,00	
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	111,00	
	alle Destillationsverfahren	34	108,32	6,979
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	22	112,18	7,735
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	3	101,64	7,608
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein	1	118,00	
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inklusive Reduktone	1	108,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	27	111,22	7,873
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	21	87,04	17,162
LwK 7.5.2(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	3	77,43	10,931
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	83,00	
Redox excl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	71,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	26	85,06	16,579
LwK 7.6	Pararosanlinmethode	2	106,30	6,896
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	105,16	8,817
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	91,06	6,037

