



**Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz**

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

**und**

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

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2016“**

**Teil 3  
Durchführung und Ergebnisse  
der Untersuchung eines Weißweines FT16P04  
und eines Roséweines FT16P05**

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

Stand: 26.01.2017



**Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>7</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT16P04 und FT16P05	
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	13
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT16P04 und FT16P05</b>	<b>13</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	17
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P04</b>	<b>21</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	21
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	21
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	22
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	23
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	23
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	25
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	25
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	26
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	27
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	27
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	29
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	29
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	29
4.3.3	Angaben zu den Analyseverfahren	30
4.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	31
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	33
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	33
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	34
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	37
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	38
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	38
4.5	Glucose [g/L]	42
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	42
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	42
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	44
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	44
4.6	Fructose [g/L]	46
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	46
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	46
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	48
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	48
4.7	Glycerin [g/L]	50
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	50
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	50
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	51
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	52

4.8	pH-Wert	53
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	53
4.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	53
4.8.3	FTIR-Laborergebnisse	54
4.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	55
4.9	Gesamtsäure [g/L]	57
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	57
4.9.2	FTIR-Laborergebnisse	58
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	59
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	59
4.10	Weinsäure [g/L]	61
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	61
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	61
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	63
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	63
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	65
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	65
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	65
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	67
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	67
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	69
4.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	69
4.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	69
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	70
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	71
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	71
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	71
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	71
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	73
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	73
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	75
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	75
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	75
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	76
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	77
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	77
4.15	Reduktone [mg/L]	80
4.15.1	Laborergebnisse	80
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	80
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	81
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	82
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	82
4.16.2	Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure einschließlich Reduktone	82
4.16.3	Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure ausschließlich Reduktone	83
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	84
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	84
4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	86
4.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	86
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	87
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	88
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	88
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	89

<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P05</b>	<b>91</b>
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	91
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	91
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	92
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	93
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	93
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	95
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	95
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	96
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	97
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	97
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	99
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	99
5.3.2	Angaben zu den Analyseverfahren	99
5.3.3	FTIR-Laborergebnisse	100
5.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	101
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	103
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	103
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	104
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	105
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	107
5.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	108
5.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	108
5.5	Glucose [g/L]	112
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	112
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	112
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	114
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	114
5.6	Fructose [g/L]	116
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	116
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	116
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	118
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	118
5.7	Glycerin [g/L]	120
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	120
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	120
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	120
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	121
5.8	pH-Wert	123
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	123
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	123
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	124
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	125
5.9	Gesamtsäure [g/L]	127
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	127
5.9.2	Angaben zu den Analyseverfahren	127
5.9.3	FTIR-Laborergebnisse	128
5.9.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	129
5.10	Weinsäure [g/L]	131
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	131
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	131
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	133
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	133

5.11	Flüchtige Säure [g/L]	135
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	135
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	135
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	137
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	137
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	139
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	139
5.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	139
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	140
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	141
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	141
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	141
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	141
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	143
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	143
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	145
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	145
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	145
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	146
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	147
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	147
5.15	Reduktone [mg/L]	149
5.15.1	Laborergebnisse	149
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	149
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	150
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	151
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	151
5.16.2	Laborergebnisse, jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	151
5.16.3	Laborergebnisse, jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	152
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	153
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	155
5.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	155
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	156
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	157
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	157
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	158

## **1 Einleitung**

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

Der vorliegende Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT16P04 und FT16P05, nachdem in Teil 1 die für alle Prüfmaterialien gemeinsamen Aspekte und die Ergebnisse für das Prüfmaterial FT16P01 sowie in Teil 2 die Ergebnisse für die Prüfmaterialien FT16P02 und FT16P03 behandelt wurden. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 oder Teil 2 der Berichte behandelt wurden. Daher wird bei Bedarf auf diese Teile verwiesen.

## **2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung**

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT16P04 und FT16P05 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfmaterialien dargestellt.

### **2.1 Untersuchungsmaterial**

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

Als Prüfgut FT16P04 wurde aus dem Rheingau ein Verschnitt verschiedener weißer Rebsorten aus dem Jahrgang 2015 bezogen. Das Prüfgut wurde auf einen im unteren halbtrockenen Bereich liegenden Zuckergehalt eingestellt und auf 301 Flaschen à 0,33 L abgefüllt. Während der Füllung wurden, wie zum Prüfgut FT16P01 dargestellt 18 Proben gezogen.

Als Vertreter ausländischer Weine wurde ein aus Kalifornien stammender lieblicher Zinfandel Rosé des Jahrgangs 2014 als lose Ware bezogen und unverändert auf 298 Flaschen à 0,33 L als Prüfgut FT16P05 abgefüllt. Auch aus dieser Partie wurden während der Füllung wie zum Prüfgut FT16P01 dargestellt insgesamt 18 Proben für die Homogenitätsprüfung gezogen.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde für beide Prüfgüter durchgeführt.

### 2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT16P04 und FT16P05

Zur Homogenitätsprüfung wurden aus den jeweils 18 während der Füllung entnommen Proben jeweils 12 Flaschen ausgelost. Aus diesen wurden jeweils mehrere Serien zu je zwei Messproben für die Untersuchungen unter Wiederholbedingungen eingesetzt, wobei einheitlich für alle Serien der Messproben eines Prüfgutes zwei Zufallsfolgen für die Messwiederholungen verwendet wurden. Alle Untersuchungen wurden an rechnergesteuerten Systemen mit automatischer Probenzuführung durchgeführt. Dies begünstigt geringe Streuungen der Messwerte zwischen den Wiederholungen. Bei beiden Prüfgütern wurden die mit Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR-Verfahren) erhaltenen Messwerte für Gesamte Milchsäure in die Tabellen nicht aufgenommen, weil die Gehalte unterhalb der Anwendbarkeitsgrenze dieses Verfahrens liegen.

Bei dem Prüfgut **FT16P04** wurden aus einer Serie von Messproben die Relative Dichte mit elektronischer Densitometrie, der Vorhandene Alkohol mit Nahinfrarotspektroskopie, sowie diese und die Parameter Gesamtsäure, pH-Wert, Glucose, Fructose, Gesamtzucker, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtige Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie ermittelt. Eine weitere Serie von Messproben diente zur jodometrischen Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure sowie des Gehaltes an Reduktionen. Die Messergebnisse sind in der Tabelle 1 und der Tabelle 2 dokumentiert.

**Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P04**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte		Vorhandener Alkohol g/L		Glucose g/L	Fructose g/L	Gesamtzucker g/l	pH-Wert
		dens.	FTIR	NIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR
1	16	0,99539	0,99539	89,45	89,778	3,813	3,953	7,370	3,163
2	3	0,99541	0,99536	89,60	89,825	3,550	3,929	7,258	3,150
3	15	0,99549	0,99536	89,68	89,755	3,943	3,816	7,121	3,164
4	5	0,99550	0,99538	89,76	89,814	3,588	4,000	7,194	3,155
5	9	0,99546	0,99537	89,68	89,813	3,645	3,882	6,995	3,154
6	1	0,99545	0,99538	89,68	89,938	3,809	4,131	7,246	3,156
7	13	0,99539	0,99541	89,60	89,915	3,899	3,938	7,137	3,161
8	18	0,99543	0,99541	89,60	89,838	3,786	4,037	7,385	3,156
9	4	0,99546	0,99540	89,68	89,887	3,615	3,909	7,206	3,160
10	7	0,99546	0,99536	89,60	89,861	3,814	4,010	7,363	3,156
11	12	0,99547	0,99543	89,60	90,096	3,513	4,003	7,376	3,155
12	14	0,99545	0,99543	89,52	89,697	3,704	3,980	7,235	3,153
13	16	0,99542	0,99540	89,60	89,939	3,637	3,948	7,345	3,149
14	13	0,99507	0,99538	89,60	89,910	3,595	3,865	7,140	3,150
15	14	0,99538	0,99542	89,60	89,975	3,759	4,060	7,390	3,154
16	9	0,99545	0,99536	89,60	89,870	3,742	4,003	7,228	3,158
17	15	0,99545	0,99537	89,60	89,883	3,555	3,955	7,173	3,156
18	7	0,99549	0,99534	89,60	89,855	3,734	4,048	7,319	3,156
19	1	0,99546	0,99537	89,60	89,842	3,854	3,944	7,233	3,164
20	12	0,99546	0,99537	89,60	89,781	3,771	4,023	7,158	3,157
21	4	0,99545	0,99540	89,52	89,678	3,636	3,881	7,113	3,143
22	5	0,99542	0,99542	89,68	89,987	3,939	4,030	7,347	3,162
23	18	0,99543	0,99539	89,68	89,980	3,601	3,978	7,175	3,154
24	3	0,99543	0,99534	89,68	89,836	3,544	4,004	7,198	3,153

Die Messergebnisse wurden zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft, wobei ein einzelnes Messergebnis bei den densitometrischen Messungen der Relativen Dichte auffällig war, dessen Wiederholungswert sich aber unauffällig in die Gesamtschar der Messergebnisse eingeeordnet. Die weiteren Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge bzw. Probennummer ergaben



rechnerisch bei den FTIR-Messwerten für Gesamtsäure und Äpfelsäure wenig ausgeprägte, nur schwach signifikante Korrelationen zum Messverlauf, jedoch zeigen die weiteren varianz-analytischen Prüfungen, dass sich dies nicht nachteilig auf die Homogenitätsprüfung auswirkte.

**Tabelle 2: Weitere Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P04**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Gesamt-Säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Flüchtige Säure	Reduktone	Freie SO <sub>2</sub>	Gesamte SO <sub>2</sub>
		g/L FTIR	g/L FTIR	g/L FTIR	g/L FTIR1	mg/L jodometr.	mg/L jodometr.	mg/L jodometr.
1	16	6,44	2,450	3,175	0,406	5,7	54,7	128,1
2	3	6,46	2,473	3,173	0,400	6,1	54,2	129,9
3	15	6,45	2,484	3,124	0,405	5,7	54,7	130,5
4	5	6,44	2,485	3,199	0,392	6,3	55,2	132,7
5	9	6,44	2,491	3,150	0,392	6,8	55,2	131,9
6	1	6,47	2,517	3,129	0,404	5,6	53,7	129,2
7	13	6,46	2,415	3,187	0,393	6,3	55,2	131,9
8	18	6,46	2,479	3,185	0,387	5,9	54,7	130,5
9	4	6,45	2,461	3,259	0,378	5,7	54,7	132,0
10	7	6,47	2,466	3,144	0,398	6,3	55,2	131,9
11	12	6,48	2,442	3,217	0,377	6,3	55,2	131,9
12	14	6,47	2,490	3,222	0,383	6,3	55,2	131,9
13	16	6,47	2,475	3,244	0,370	6,8	54,7	130,5
14	13	6,48	2,465	3,235	0,372	6,1	55,2	131,9
15	14	6,47	2,465	3,175	0,377	6,3	54,7	128,9
16	9	6,48	2,478	3,221	0,383	6,3	55,7	131,7
17	15	6,48	2,455	3,205	0,387	6,3	55,7	132,5
18	7	6,47	2,478	3,193	0,387	6,3	54,7	130,5
19	1	6,47	2,432	3,168	0,401	6,3	54,2	129,9
20	12	6,47	2,455	3,180	0,395	6,3	55,2	131,9
21	4	6,45	2,472	3,178	0,369	6,1	55,2	132,7
22	5	6,45	2,445	3,122	0,396	6,3	55,7	131,7
23	18	6,48	2,442	3,204	0,382	6,3	54,2	130,7
24	3	6,47	2,458	3,185	0,388	6,3	54,2	130,7

**Tabelle 3: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT15P04**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für S <sub>Pr</sub>
					Fehler (s <sub>r</sub> )	Proben (s <sub>Pr</sub> )	Ziel (s <sub>z</sub> )	s <sub>r</sub> /s <sub>z</sub>	s <sub>Pr</sub> /s <sub>z</sub>	
Rel. Dichte (dens.) ohne Lfd. Nr. 14	0,995428	24	1,7959	0,1644	0,000070	0,000044	0,000132	<b>0,531</b>	<b>0,335</b>	0,000084
Rel. Dichte FTIR	0,995385	24	3,3846	<b>0,0233</b>	0,000018	0,000020	0,000132	0,137	0,149	0,000056
Vorh. Alkohol NIR	89,617	24	1,2270	0,3639	0,0622	0,0210	0,535	0,116	0,039	0,2223
Vorh. Alkohol FTIR	89,865	24	0,3096	0,9692	0,116		0,535	0,218		0,2402
Glucose FTIR	3,710	24	0,5393	0,8420	0,147		0,143	<b>1,028</b>		0,1479
Fructose FTIR	3,972	24	1,6075	0,2134	0,0624	0,0340	0,150	0,415	0,229	0,0835
Gesamtzucker FTIR	7,238	24	1,5414	0,2341	0,0938	0,0488	0,238	0,393	0,205	0,1292
pH-Wert FTIR	3,156	24	0,4579	0,8968	0,0058		0,0476	0,123		0,0198
Gesamtsäure FTIR	6,464	24	0,9273	0,5463	0,0137		0,107	0,128		0,0448
Weinsäure FTIR	2,466	24	0,4524	0,9002	0,0255		0,122	0,209		0,0543
Äpfelsäure FTIR	3,186	24	0,6118	0,7879	0,0404		0,099	0,409		0,0545
Flücht. Säure FTIR	0,3884	24	1,0321	0,4757	0,0110	0,0014	0,029	0,385	0,049	0,0153
Reduktone mg/l	6,196	24	0,5914	0,8034	0,336		0,753	0,446		0,4340
Freie SO <sub>2</sub> mg/l	54,887	24	<b>3,9917</b>	<b>0,0125</b>	0,339	0,414	4,806	0,070	0,086	1,9536
Gesamte SO <sub>2</sub>	131,083	24	2,1859	0,0974	0,988	0,761	5,357	0,184	0,142	2,3361

N = Anzahl der Messwerte

Die Ergebnisse der varianzanalytischen Prüfungen sind in der Tabelle 3 zusammengefasst. Für die Aussagekraft nicht signifikanter Ergebnisse der Varianzanalyse ist der Quotient  $s_r/s_{Ziel}$  maßgeblich. Er überschritt den höchstzulässigen Wert 0,5 – eher formal numerisch – nur, wenn alle densitometrischen Messergebnisse der Relativen Dichte berücksichtigt wurden, sowie wesentlich für den Parameter Glucose. Die Messergebnisse für diesen Parameter tragen somit zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität nicht bei. Für alle anderen geprüften Parameter sind die Ergebnisse der Varianzanalyse aussagekräftig und belegen ohne weitere Prü-

fungen eine ausreichende Homogenität mit Ausnahme des Parameters Freie Schweflige Säure. Die weiteren Prüfungen anhand des Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Proben  $s_{Pr}$  und der Zielstandardabweichung ( $s_{Ziel}$ ), der einen Betrag von 0,3 nicht überschreiten soll, sowie der Vergleich von  $s_{Pr}$  mit dem nach Fearn und Thompson berechneten höchstzulässigen Betrag für diese Standardabweichung ergibt, dass auch für diesen Parameter eine ausreichende Homogenität vorliegt, da weder der zulässige Höchstwert des Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  noch der Maximalwert für  $s_{Pr}$  überschritten werden. Insgesamt ergibt sich damit für das **Prüfgut FT16P04** eine für die Laborvergleichsuntersuchung **ausreichende Homogenität**.

Zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes **FT16P05** wurden aus den 12 ausgelosten Proben vier Serien von Doppelproben hergestellt. An einer Serie wurden mittels elektronischer Densitometrie die Relative Dichte und mittels Nahinfrarotspektroskopie der Vorhandene Alkohol bestimmt. An der zweite Serie der Doppelproben wurden der pH-Wert potentiometrisch und der Gehalt an Gesamtsäure acidimetrisch bestimmt, während die dritte Serie zur Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure diente. An der vierten Serie wurden mit dem FTIR-Verfahren die bereits obengenannten Parameter sowie zusätzlich Gesamtextrakt und Glycerin bestimmt. Die Messergebnisse sind auf die Tabelle 4 und die Tabelle 5 aufgeteilt.

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P05, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte		Vorh. Alkohol		Gesamtextrakt		pH-Wert		Gesamtsäure	
		dens.	FTIR	NIR g/L	FTIR g/L	dens/NIR g/L	FTIR g/L	pot.	FTIR	acid. g/L	FTIR g/L
1	13	1,00434	1,00457	84,08	85,27	48,10	47,6	3,15	3,33	5,93	5,61
2	16	1,00436	1,00463	84,08	85,34	48,10	47,68	3,18	3,33	5,91	5,59
3	12	1,00437	1,00462	84,00	85,38	48,20	47,73	3,17	3,33	5,90	5,60
4	3	1,00436	1,00463	84,08	85,45	48,10	47,75	3,20	3,32	5,93	5,60
5	1	1,00426	1,00452	84,31	85,89	48,00	47,57	3,21	3,33	5,88	5,60
6	15	1,00438	1,00468	84,00	85,35	48,20	47,73	3,22	3,32	5,90	5,59
7	8	1,00441	1,00467	84,00	85,43	48,30	47,82	3,22	3,32	5,86	5,61
8	4	1,00439	1,00465	84,00	85,69	48,20	47,78	3,23	3,32	5,89	5,61
9	5	1,00439	1,00461	83,92	85,6	48,20	47,70	3,21	3,32	5,89	5,57
10	11	1,00438	1,00469	84,00	85,6	48,20	47,71	3,24	3,31	5,89	5,60
11	2	1,00439	1,00464	84,00	85,73	48,20	47,75	3,24	3,32	5,87	5,60
12	7	1,00442	1,00466	83,92	85,48	48,30	47,79	3,25	3,32	5,85	5,61
13	12	1,00437	1,00449	84,00	85,09	48,10	47,53	3,14	3,33	5,84	5,64
14	13	1,00437	1,00457	84,00	85,41	48,20	47,66	3,17	3,32	5,88	5,63
15	1	1,00427	1,00447	84,31	85,69	48,00	47,55	3,20	3,33	5,86	5,63
16	8	1,00433	1,00458	84,08	85,34	48,10	47,70	3,19	3,32	5,87	5,65
17	11	1,00436	1,00464	84,08	85,43	48,10	47,74	3,21	3,32	5,88	5,65
18	2	1,00437	1,00463	84,08	85,39	48,20	47,78	3,21	3,33	5,87	5,64
19	15	1,00434	1,00458	84,08	85,42	48,10	47,64	3,22	3,32	5,88	5,63
20	3	1,00435	1,00461	84,08	85,58	48,10	47,72	3,21	3,32	5,90	5,65
21	4	1,00437	1,00467	84,08	85,56	48,20	47,78	3,23	3,32	5,89	5,64
22	16	1,00434	1,00457	84,08	85,45	48,10	47,63	3,23	3,32	5,87	5,64
23	5	1,00436	1,00467	84,08	85,66	48,20	47,86	3,24	3,32	5,88	5,63
24	7	1,00436	1,00463	84,08	85,47	48,20	47,74	3,23	3,32	5,86	5,65

**Tabelle 5: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P05, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR und Jodometrie**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Vergärbare Zucker (r) g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Glycerin g/L	Weinsäure g/L	Milchsäure g/L	Flüchtige Säure g/L	Freie SO <sub>2</sub> mg/L	Gebundene SO <sub>2</sub> mg/L	Gesamte SO <sub>2</sub> mg/L
1	13	27,30	6,10	20,56	4,76	2,09	2,37	0,628	41,15	113,54	154,69
2	16	27,52	6,38	20,57	4,72	2,02	2,37	0,624	41,15	114,58	155,73
3	12	27,56	6,29	20,59	4,67	2,06	2,36	0,618	41,15	115,63	156,78
4	3	27,27	6,18	20,53	4,81	2,08	2,28	0,625	41,15	113,54	154,69
5	1	27,38	6,22	20,38	4,69	2,06	2,28	0,617	40,63	114,58	155,21
6	15	27,60	6,29	20,63	4,77	2,07	2,33	0,621	41,15	114,58	155,73
7	8	27,56	6,17	20,64	4,81	2,02	2,31	0,635	40,63	114,58	155,21
8	4	27,61	6,14	20,51	4,73	2,03	2,30	0,628	40,63	115,63	156,26
9	5	27,25	6,19	20,54	4,87	2,07	2,28	0,646	40,63	115,63	156,26
10	11	27,51	6,00	20,65	4,76	2,03	2,32	0,622	40,63	112,50	153,13
11	2	27,56	6,16	20,57	4,72	2,04	2,32	0,619	40,10	114,58	154,68
12	7	27,48	6,07	20,64	4,67	2,04	2,34	0,629	40,10	114,58	154,68
13	12	27,05	6,09	20,49	4,77	2,24	2,28	0,618	41,15	114,58	155,73
14	13	27,27	6,23	20,56	4,70	2,16	2,30	0,600	41,67	112,5	154,17
15	1	26,87	6,08	20,38	4,87	2,18	2,25	0,606	41,15	113,54	154,69
16	8	27,09	6,23	20,45	4,75	2,16	2,30	0,606	40,63	114,58	155,21
17	11	27,44	6,16	20,58	4,73	2,14	2,31	0,605	41,15	113,54	154,69
18	2	27,24	6,16	20,61	4,78	2,16	2,28	0,607	41,15	112,50	153,65
19	15	27,09	6,01	20,55	4,76	2,14	2,28	0,620	40,63	112,50	153,13
20	3	27,37	6,18	20,42	4,73	2,15	2,27	0,607	41,15	113,54	154,69
21	4	27,31	6,12	20,62	4,83	2,13	2,31	0,602	41,15	115,63	156,78
22	16	26,97	6,05	20,46	4,73	2,12	2,29	0,612	41,15	113,54	154,69
23	5	27,36	6,26	20,49	4,77	2,10	2,25	0,605	40,63	113,54	154,17
24	7	27,32	6,11	20,50	4,75	2,16	2,29	0,609	40,63	114,58	155,21

Bereits die graphische Prüfung der Messergebnisse zeigte mehrere Besonderheiten, die auch die Ergebnisse der anschließenden Varianzanalyse prägten. Bei der Relativen Dichte, dem Vorhandenen Alkohol und in Fortpflanzung auch dem Gesamtextrakt weist die graphische Prüfung sowohl für die Messergebnisse mit Densitometrie bzw. Nahinfrarotspektroskopie (NIR) als auch mit dem FTIR-Verfahren auffällige Abweichungen für die zu Beginn der Füllung entnommene Probe 1 auf. Weiterhin zeigen die potentiometrischen Messungen der pH-Werte innerhalb der beiden Wiederholungserien jeweils einen Anstieg der Messwerte um etwa 0,1 während bei den FTIR-Messergebnissen für Weinsäure ein systematischer Unterschied von etwa 0,1 g/L zwischen den Messwerten der beiden Teilerien zu beobachten ist. Infolge dieser Störungen bei den Messungen tragen die Messergebnisse beider Parameter unabhängig von den statistischen Testergebnissen ohne eine Korrektur der systematischen Effekte nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei. Auf eine Korrektur der systematischen Einflüsse wurde in Anbetracht der Messergebnisse für die weiteren Parameter und die geringen Streuungen zwischen den Proben in den jeweiligen Teilerien verzichtet.

**Tabelle 6: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT16P05**

	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)	1,004360	24	3,2727	0,0264	0,000025	0,000027	0,000132	0,191	0,203	0,000058
- ohne Pr. Nr. 1	1,004369	22	0,4530	0,8885	0,000026		0,000132	0,198		0,000059
Dichte FTIR	1,005	24	2,3970	0,0743	0,000045	0,000038	0,000132	0,342	0,286	0,000068
- ohne Pr. Nr. 1	1,004622	22	1,1419	0,4130	0,000046	0,000012	0,000132	0,348	0,093	0,000069
Vorh. Alkohol NIR (N)	84,059	24	3,7252	0,0163	0,0611	0,0713	0,535	0,114	0,133	0,2220
- ohne Pr. Nr. 1	84,036	22	0,3857	0,9277	0,0638		0,535	0,119		0,2257
Vorh. Alkohol FTIR	85,487	24	3,1437	0,0304	0,121	0,125	0,535	0,226	0,234	0,2421
- ohne Pr. Nr. 1	85,460	22	2,1646	0,1106	0,119	0,091	0,535	0,222	0,170	0,2455
Gesamtextrakt (d/N)	48,154	24	2,2929	0,0848	0,0612	0,0492	0,594	0,103	0,083	0,2450
- ohne Pr. Nr. 1	48,168	23	1,0444	0,4686	0,0640	0,0095	0,594	0,108	0,016	0,2488
Gesamtextrakt FTIR	47,706	24	2,5334	0,0626	0,0645	0,0565	0,594	0,109	0,095	0,2457
pH-Wert, pot.	3,208	24	4,1818	0,0104	0,0183	0,0230	0,0476	0,384	0,484	0,0255
pH-Wert FTIR	3,322	24	2,4545	0,0691	0,0041	0,0035	0,0476	0,086	0,073	0,0195
Gesamtsäure acidim.	5,883	24	1,4583	0,2631	0,0202	0,0097	0,107	0,189	0,090	0,0468
Gesamtsäure FTIR	5,620	24	0,1686	0,9970	0,0298		0,107	0,278		0,0510
Vergärbare Zucker (R)	27,333	24	0,2831	0,9775	0,254		0,781	0,325		0,3919
Glucose	6,161	24	0,3282	0,9626	0,112		0,209	0,534		0,1333
Fructose	20,538	24	1,6212	0,2094	0,0699	0,0390	0,597	0,117	0,065	0,2483
Glycerin	4,756	24	0,5664	0,8222	0,0602		0,213	0,283		0,1020
Weinsäure	2,102	24	0,1702	0,9969	0,0772		0,106	0,726		0,0833
Äpfelsäure	2,303	24	0,9918	0,5020	0,0332		0,0764	0,435		0,0434
Flüchtige Säure	0,617	24	0,1415	0,9986	0,0150		0,0286	0,525		0,0180
Freie SO <sub>2</sub>	40,889	24	1,5223	0,2405	0,338	0,173	3,742	0,090	0,046	1,5338
Gebundene SO <sub>2</sub>	114,105	24	1,7321	0,1795	0,877	0,530	8,949	0,098	0,059	3,6813
Gesamte SO <sub>2</sub>	154,994	24	1,6227	0,2089	0,864	0,482	5,357	0,161	0,090	2,2935

Die abschließende Varianzanalyse, deren Ergebnisse in Tabelle 6 zusammengefasst sind, zeigt für die Parameter Relative Dichte und Vorhandener Alkohol signifikante Unterschiede zwischen den Proben nur auf, solange die abweichenden Messergebnisse der Probe 1 bei den Berechnungen nicht ausgeschlossen werden. Letztlich verbleibt nur für die potentiometrischen Messergebnisse des pH-Wertes ein signifikanter Befund, der auf den bereits aufgezeigten Mangel der Messergebnisse zurückzuführen ist. Der für die Aussagekraft einer nicht signifikanten Varianzanalyse maßgebliche Quotient  $s_r/s_{Ziel}$  überschreitet den einzuhaltenden Betrag 0,5 formal bei den FTIR-Messergebnissen der Parameter Glucose und Flüchtige Säure. Bei dem vorlie-

genden Gehalt ist diese Beobachtung bei dem Parameter Glucose für das angewendete Bestimmungsverfahren nicht untypisch. Bei dem Parameter Flüchtige Säure liegt, wie bei dem Parameter Weinsäure, für den ein deutlich erhöhter Wert des Quotienten  $s_r/s_{Ziel}$  beobachtet wird, ein für diesen Effekt maßgeblicher – allerdings weniger ausgeprägter – systematischer Unterschied der Messergebnisse zwischen den beiden Teilerien vor. Somit zeigen die nicht signifikanten Ergebnisse der Varianzanalyse – mit Ausnahme des Parameters Weinsäure – gültig Homogenität an. Die weiteren Kriterien, ein Quotient  $s_{Pr}/s_{Ziel} < 0,3$  und der maximal tolerierbare Wert für  $s_{Pr}$  sind daher hier nicht relevant, zumal die Messergebnisse für die potentiometrische Bestimmung des pH-Wertes bereits aus den oben aufgeführten Gründen nicht zur Entscheidung über die Homogenität beitragen. Somit ist das Prüfgut **FT16P05** für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung ausreichend homogen.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

Die Informationen zur Verteilung des Untersuchungsmaterials an die Laboratorien, die zur Bearbeitung gegebenen Erläuterungen hinsichtlich der Durchführung der Untersuchungen, Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung können Teil 1 des Berichtes, speziell für die Behandlung der FTIR-Messwerte geltende Ergänzungen dem Abschnitt 2.2 in Teil 2 des Berichtes entnommen werden. Hinsichtlich der Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Grundlagen für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse unter Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 der Berichte verwiesen.

## 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT16P04 und FT16P05

### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT16P04 wird durch die in Tabelle 7 und für das Prüfgut FT16P05 durch die in Tabelle 8 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter beschrieben. Hinsichtlich der über die Legende hinausgehenden Erläuterungen zu den Tabellen und der prinzipiellen Interpretation der Daten wird auf Teil 1 der Berichte verwiesen.

Nach den Daten in Tabelle 7 fanden sich unter den Laborergebnissen der herkömmlichen Methoden für das Prüfgut **FT16P04** bei den 25 Parameterdatengruppen nur vereinzelt Laborergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abwichen. Trifft dies nur für ein Laborergebnis zu, zeigt die Erfahrung, dass häufig Übertragungsfehler vorliegen dürften. Aus einem anderen Grund trat typischerweise eine Häufung derartiger Laborergebnisse bei dem Parameter Reduktone mit drei Ausschlüssen und damit rund 10 % der Laborergebnisse auf, wobei als Ursache analytische Probleme anzunehmen sind.

**Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT16P04**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz	Zielstdabw exp. herk.	Zielstdabw exp. FTIR	Quotienten				
						$s_H$	$s_{exp}$	$s_{\bar{u}}$	$s_L/s_H$	$s_L/s_{exp}$	$s_L/s_{\bar{u}}$	$u_M/s_{Ziel}$	$u_M/s_{\bar{u}}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	58	55	0,995269	0,995300	0,000156		0,000132	0,000190		1,18	0,82	0,16	0,11
Vorhandener Alkohol (g/L)	31	31	89,212	89,300	0,554	2,569	0,535000	0,886	0,22	1,04	0,63	0,19	0,11
Gesamtextrakt (g/L)	48	48	26,77	26,75	0,606	0,923	0,594000	0,594	0,66	1,02	1,02	0,15	0,15
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch +HPLC	38	38	8,546	8,580	0,292	0,351	0,274560	0,584	0,83	1,06	0,50	0,17	0,08
- reduktometrisch	13	13	8,793	8,600	0,640	0,352	0,275100	0,584	1,82	2,33	1,10	0,65	0,30
Glucose (g/L)	43	43	3,810	3,810	0,133	0,176	0,145770	0,408	0,76	0,92	0,33	0,14	0,05
Fructose (g/L)	42	42	4,755	4,725	0,180	0,212	0,170475	0,33	0,85	1,05	0,54	0,16	0,08
Glycerin (g/L)	25	25	5,155	5,110	0,296	0,226		0,348	1,31		0,85	0,26	0,17
pH-Wert	48	46	3,229	3,235	0,0580		0,047600	0,0493		1,22	1,18	0,18	0,17
Gesamtsäure (g/L)	55	55	6,407	6,400	0,157	0,274	0,107143	0,145	0,57	1,46	1,08	0,20	0,15
Weinsäure (g/L)	32	31	2,636	2,620	0,238	0,128		0,227	1,86		1,05	0,33	0,19
Flüchtige Säure (g/L)	23 (1)	20	0,364	0,375	0,0683	0,0246	0,0286	0,0891	2,78	2,39	0,77	0,53	0,17
Acetat als Essigsäure (g/L)	28	26	0,279	0,284	0,0373	0,0194			1,92			0,38	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	16	15	2,851	2,820	0,157	0,136	0,0895	0,218	1,15	1,76	0,72	0,45	0,19
L-Äpfelsäure (g/L)	27	26	2,811	2,790	0,187	0,135	0,0888		1,38	2,11		0,41	
Gesamte Milchsäure (g/L)	19 (1)	17	0,207	0,209	0,0243	0,0150		0,209	1,63		0,12	0,39	0,03
L-Milchsäure (g/L)	23	23	0,119	0,110	0,0261	0,0087	0,0225		3,00	1,16		0,24	
Reduktone (mg/L)	26 (3)	26	5,13	5,00	1,58	0,628			2,52			0,49	
Freie Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillation + Photometrie	19	19	42,11	42,00	4,54	3,83			1,19			0,27	
- wie vorstehend + FTIR	36	36	41,78	41,15	5,13	3,76			1,36			0,23	
- jodometr. incl. Reduktone	45	45	43,57	42,00	5,67	3,83			1,48			0,22	
- jodometr. excl. Reduktone	27	27	38,11	37,00	5,79	3,44	3,83		1,68	1,51		0,29	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillationsverfahren	33	32	113,61	112,50	8,25	8,84	5,36		0,93	1,54		0,27	
- jodometr. incl. Reduktone	33 (1)	33	113,96	114,00	6,32	8,94	5,36		0,71	1,18		0,21	
- jodometr. excl. Reduktone	22	22	108,38	108,35	5,62	8,56	5,36		0,66	1,05		0,22	

**Erläuterungen zur Tabelle 7 und zur Tabelle 8:****Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Ergebniswerte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. herk. ( $s_{exp}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (in der Regel OIV-Methoden)**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{\bar{u}}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient ( $s_L/s_H$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten**Quotient ( $s_L/s_{\bar{u}}$ )** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

**Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Roséweinprüfgut FT16P05**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw n. Horwitz	Zielstdabw exp. herk.	Zielstdabw exp. FTIR	Quotienten				
						S <sub>H</sub>	S <sub>exp</sub>	S <sub>Ü</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>exp</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>Ü</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ziel</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ü</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	57	55	1,00435	1,00434	0,000143		0,000132	0,000190		1,08	0,75	0,15	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	31	31	83,465	83,600	0,674	2,429	0,535	0,886	0,28	1,26	0,76	0,23	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	46 (1)	46	48,04	47,95	0,416	1,515	0,594	0,594	0,27	0,70	0,70	0,10	0,10
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch + HPLC	36	36	26,70	26,79	0,614	0,924	0,766	0,766	0,67	0,80	0,80	0,13	0,13
- reduktometrisch	13	13	26,81	26,70	1,207	0,921	0,764	0,764	1,31	1,58	1,58	0,44	0,44
Glucose (g/L)	42	41	6,144	6,150	0,246	0,265	0,209	0,408	0,93	1,18	0,60	0,18	0,09
Fructose (g/L)	41	40	20,60	20,55	0,554	0,737	0,598	0,598	0,75	0,93	0,93	0,15	0,15
Glycerin (g/L)	25	24	5,033	4,992	0,248	0,222		0,348	1,12		0,71	0,23	0,15
pH-Wert	47	44	3,234	3,235	0,0529		0,0476	0,049		1,11	1,07	0,17	0,16
Gesamtsäure (g/L)	51	50	5,651	5,635	0,0997	0,246	0,107	0,145	0,41	0,93	0,69	0,13	0,10
Weinsäure (g/L)													
- alle Verfahren	31	29	1,913	1,900	0,197	0,0976		0,227	2,02		0,33	0,38	0,16
- nur HPLC + IC	13	12	1,879	1,880	0,0738	0,0967		0,227	0,76		0,87	0,22	0,09
Flüchtige Säure (g/L)	22 (1)	22	0,3418	0,3466	0,0569	0,0230	0,0286	0,0891	2,47	1,99	0,64	0,42	0,14
Acetat als Essigsäure (g/L)	24	21	0,2508	0,2500	0,0248	0,0174			1,42			0,31	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	13	13	2,189	2,190	0,126	0,110	0,0735	0,218	1,15	1,72	0,58	0,48	0,16
L-Äpfelsäure (g/L)	24	24	2,136	2,125	0,150	0,107	0,0719		1,40	2,09		0,43	
Gesamte Milchsäure (g/L)	14 (4)	14	0,1977	0,2000	0,0254	0,0144		0,209	1,76		0,12	0,47	0,03
L-Milchsäure (g/L)	18 (1)	18	0,0897	0,0880	0,0158	0,0072	0,0215		2,20	0,73		0,17	
Reduktone (mg/L)	29 (6)	29	5,763	6,000	1,525	0,733			2,08			0,39	
Freie Schweflige Säure													
- Destillation+Photometrie	16	16	32,89	32,10	4,46	3,05			1,46			0,37	
- wie vorstehend +FTIR	33	33	35,74	36,00	5,35	3,36			1,59			0,28	
- incl. Reduktone	46	46	33,26	32,00	4,58	3,04			1,51			0,22	
- excl. Reduktone	33	33	27,60	26,00	4,16	2,55	3,04		1,63	1,37		0,24	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	32	31	137,00	137,00	7,25	10,45	5,36		0,69	1,35		0,24	
- Destillationsverfahren													
- jodometr. incl. Reduktone	33	33	135,50	134,00	8,32	10,26	5,36		0,81	1,55		0,27	
- jodometr. excl. Reduktone	24	24	128,95	128,00	6,74	9,87	5,36		0,68	1,26		0,26	

**Weitere Erläuterungen zu Tabelle 7 und Tabelle 8:**

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

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

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

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

Wegen eines Z-Score im absoluten Betrag über 5 wurden bei sieben Datengruppen bis zu zwei Laborergebnisse ausgeschlossen. Nur bei den Parametern Relative Dichte und Flüchtige Säure (SO<sub>2</sub> korrigiert) kam es aus diesem Grund zu einem Ausschluss von drei Laborergebnissen. Die höchstzulässige Ausschlussquote von 22 % wurde nicht erreicht. Der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der maßgeblichen Zielstandardabweichung ( $s_L/s_{Ziel}$ ) lag bei 17 Datengruppen unter 1,5 und damit im voll befriedigenden Bereich. Bei vier aus der Tabelle 7 ersichtlichen Parameterdatengruppen lag der Wert dieses Quotienten über 1,5 aber unter 2,0 und war damit mäßig erhöht. Mit Ausnahme des Parameters Weinsäure ist damit bereits eine eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes verbunden, d.h. der Quotient  $u_M/s_{Ziel}$  ist auf eine Stelle gerundet größer als 0,3. Dies ist bei der Bewertung der Z-Score zu Lasten der Labors zu beachten. Der Höchstwert 2,0 des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wurde bei den Laborergebnissen für **vergärbare Zucker (reduktometrisch), Flüchtige Säure, L-Äpfelsäure und Reduktonen** überschritten. Für die Bewertung der Gültigkeit der Z-Score hat dies bei den Ergebnissen der reduktometrischen Zuckerbestimmungen keine Folgen, weil diese Ergebnisse auf der Grundlage des Bezugswertes aus den mittels enzymatischer Bestimmung oder durch HPLC ermittelten Laborergebnissen erfolgt. Für die anderen Parameter können jedoch aus diesem Grund **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Mit Ausnahme der L-Äpfelsäure beträgt der Quotient  $u_M/s_{Ziel}$  zugleich rund 0,5 und zeigt damit eine unzureichende Sicherheit des Bezugswertes an, d.h. auch zufriedenstellende Z-Score sind bei diesen Parametern nicht als Beleg guter Laborleistung bewertbar. Im Übrigen werden die Ergebnisse aller Parameter mit unbefriedigendem Gesamtergebnis alle Prüfgüter übergreifend im Abschnitt 4 des ersten Teiles der Berichte diskutiert, worauf hier verwiesen wird. Für die hier **nicht genannten Parameter** wurden **gültige Z-Score** erhalten.

Auch bei dem Prüfgut **FT16P05** lagen nur wenige, um mehr als 50 % vom Median abweichende, Laborergebnisse vor, die bei allen statistischen Berechnungen unberücksichtigt bleiben aber durch Z-Score bewertet werden. Erhöhte Ausschlüsse aus diesem Grund ergaben sich bei den Parametern **Gesamte Milchsäure** und **Reduktone**. Während diese Beobachtung beim letztgenannten Parameter regelmäßig zu machen ist, dürfte bei dem erstgenannten Parameter ursächlich sein, dass der Gehalt offensichtlich im Bereich der Bestimmungsgrenze, insbesondere des überwiegend eingesetzten hochleistungsflüssigkeitschromatographischen Verfahrens liegt, obwohl nur ein Teilnehmer ausdrücklich mitgeteilt hat, dass sein Ergebnis unterhalb der Bestimmungsgrenze lag. Unter Berücksichtigung dieses Umstandes sind auch die erhöhten Werte der Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  und  $u_M/s_{Ziel}$  mit der Folge eingeschränkter Zuverlässigkeit des Bezugswertes nicht ungewöhnlich. Bei 8 von 26 Datengruppen wurden ein bis zwei Laborergebnisse mit einem Z-Scorebetrag über 5 und nur bei den Parametern **pH-Wert** und **Acetat** wurden jeweils drei Laborergebnisse aus diesem Grund bei der Ermittlung der statistischen Daten der Tabelle 8 über den Gesamterfolg der Laborvergleichsuntersuchung ausgeschlossen. Der höchstzulässige Anteil von 22,2 % ausgeschlossenen Laborergebnissen wird eingehalten.

Mäßig erhöhte Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  zwischen 1,5 und 2,0 finden sich neben der Gesamten Milchsäure bei weiteren fünf Parameterdatengruppen der Tabelle 8 ohne dass in den Fällen gering-



fällig erhöhter Quotienten die Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Bewertung der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden eingeschränkt ist. Bei deutlich erhöhten Werten und gleichzeitig geringer Anzahl an Laborergebnissen ist die Zuverlässigkeit der Bezugswerte jedoch regelmäßig eingeschränkt und z.B. für Gesamte Äpfelsäure nicht mehr gegeben. Der Höchstwert 2,0 für den Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wird bei dem Parameter **Weinsäure** erreicht und bei **L-Äpfelsäure** und **Reduktonen** eindeutig überschritten, sodass für diese beiden **keine gültigen Z-Score** erhalten werden, weil zugleich auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes deutlich eingeschränkt ist. Dieser Befund ist vor allem bei dem Parameter L-Äpfelsäure bei einem Gehalt von rund 2 g/L, der gut bestimmbar sein muss, problematisch und führt zu der Frage, ob die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens zu streng ist oder ob die angewendeten, insbesondere automatisierten Modifikationen es an Vergleichbarkeit fehlen lassen.

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

### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 4.4 begründet, wurden auch für die Proben FT16P04 und FT16P05 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unterzogen aber keine auf dieser Grundlage berechneten Z-Score ausgewiesen. Hierbei werden die mit robusten statistischen Verfahren ermittelten, beschreibenden statistischen Kennzahlen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT16P04 in der Tabelle 9 und für das Prüfgut FT16P05 in der Tabelle 10 enthalten.

Beide Prüfgüter weisen produkttypisch Gehalte an **Gesamter Milchsäure** unter der Bestimmungsgrenze (Untergrenze des Anwendungsbereichs) des FTIR-Verfahrens auf, weil kein Abbau der Äpfelsäure stattgefunden hat. Analog zu der im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung begründeten Vorgehensweise werden als Hinweis auf das **Unterschreiten der Bestimmungsgrenze** die statistischen Daten zu dem Parameter Gesamte Milchsäure in der Tabelle 9 und der Tabelle 10 in grauer Schriftfarbe dargestellt sowie in den Datentabellen der Abschnitte 4.14.1 und 5.14.1 sowie in Laborergebnismitteilungen für diesen Parameter **keine Z-Score** ausgewiesen. Bei den anderen Parametern wird bei den Prüfgütern die Untergrenze des Anwendungsbereiches der Methode nicht erreicht.

Insgesamt bestätigen sich die im Abschnitt 5.1 des Teiles 1 und im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 dieses Berichtes angesprochenen Probleme und Schlussfolgerungen hinsichtlich der mangelnden Übereinstimmung der FTIR-Messergebnisse, die hier daher nicht wiederholt werden. Insbesondere ist bei vielen Parametern keine Ermittlung gültiger Z-Score allein auf der Grundlage der FTIR-Messergebnisse möglich.

**Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißwein- Prüfgut FT16P04**

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	84	0,99543	0,995455	0,000226		0,000146		1,55	0,17
Vorhandener Alkohol (g/L)	88	89,349	89,350	0,935	2,570	0,739	0,36	1,27	0,13
Gesamtextrakt (g/L)	53	27,201	27,300	0,605	0,939	0,415	0,64	1,46	0,20
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	85	8,368	8,300	0,620	0,341	0,354	1,81	1,75	0,19
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	85	8,429	8,500	0,574	0,348	0,354	1,65	1,62	0,18
Glucose (g/L)	84	3,592	3,575	0,469	0,167	0,288	2,81	1,63	0,18
Fructose (g/L)	84	4,820	4,820	0,475	0,215	0,222	2,21	2,14	0,23
Glycerin (g/L)	71	5,198	5,200	0,392	0,230	0,265	1,71	1,48	0,18
pH-Wert	83	3,267	3,260	0,0719		0,0188		3,83	0,42
Gesamtsäure (g/L)	87	6,366	6,360	0,190	0,272	0,0816	0,70	2,33	0,25
Weinsäure (g/L)	78	2,390	2,390	0,274	0,119	0,132	2,31	2,08	0,24
Flüchtige Säure (g/L)	78	0,3783	0,3750	0,0853	0,0246	0,0427	3,47	2,00	0,23
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	80	2,825	2,900	0,343	0,140	0,0975	2,45	3,52	0,39
Gesamte Milchsäure (g/L)	67	0,2030	0,2000	0,1440	0,0144	0,0805	9,99	1,79	0,22
Freie Schweflige Säure (mg/L)	17	40,94	40,00	5,220	3,673		1,42		0,34
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	111,54	110,00	11,849	8,675	5,357	1,37	2,21	0,51

**Tabelle 10: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roséwein-Prüfgut FT16P05**

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	83	1,00459	1,00460	0,000264		0,000146		1,81	0,20
Vorhandener Alkohol (g/L)	87	83,461	83,600	1,038	2,429	0,739	0,43	1,41	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	53	47,931	47,900	0,716	1,514	0,415	0,47	1,72	0,24
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	84	26,969	27,000	1,045	0,930	0,354	1,12	2,95	0,32
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	84	26,545	26,600	0,806	0,918	0,354	0,88	2,28	0,25
Glucose (g/L)	83	6,205	6,220	0,468	0,267	0,288	1,75	1,62	0,18
Fructose (g/L)	83	20,326	20,400	0,751	0,733	0,222	1,02	3,38	0,37
Glycerin (g/L)	70	5,186	5,115	0,574	0,226	0,265	2,54	2,17	0,26
pH-Wert	83	3,316	3,320	0,0936		0,0188		4,98	0,55
Gesamtsäure (g/L)	86	5,684	5,695	0,179	0,248	0,0816	0,72	2,20	0,24
Weinsäure (g/L)	78	2,282	2,300	0,291	0,115	0,132	2,54	2,21	0,25
Flüchtige Säure (g/L)	77	0,3867	0,3800	0,0833	0,0249	0,0427	3,35	1,95	0,22
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	79	2,223	2,250	0,322	0,113	0,0975	2,86	3,31	0,37
Gesamte Milchsäure (g/L)	43	0,0255	0,0800	0,2844	0,0066	0,0805	42,97	3,53	0,54
Freie Schweflige Säure (mg/L)	17	38,17	38,00	4,283	3,517		1,22		0,30
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	135,57	135,00	14,640	10,323	5,357	1,42	2,73	0,63

**Erläuterungen zu Tabelle 9 und Tabelle 10:****Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Werte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{FTIR}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten

(Vergleichsstandardabweichung aus der 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**Markierungen** wie in den Erläuterungen zu Tabelle 7 und Tabelle 8 beschrieben

Abschließend werden in der Tabelle 11 für das Prüfgut FT16P04 und in der Tabelle 12 für das Prüfgut FT16P05 die Abweichungen der Mediane der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und des FTIR-Verfahrens sowie die ihnen entsprechenden Z-Score-Werte auf der Basis der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen zusammengestellt. Wie stets für den Parameter Gesamtextrakt wird bei diesem Vergleich an deren Stelle die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden verwendet, weil deren Betrag größer ist als der Betrag der Übereinstimmungsstandardabweichung und sie auch für die Bewertung der Laborergebnisse verwendet wird.

**Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse das Prüfgut FT16P04**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel- StdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99545	0,99530	0,000155	0,000190	0,82
Vorhandener Alkohol (g/L)	89,350	89,300	0,050	0,886	0,06
Gesamtextrakt (g/L)	27,300	26,750	0,550	0,594	0,93
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	8,300	8,580	-0,280	0,584	-0,48
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	8,300	8,600	-0,300	0,584	-0,51
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	8,500	8,580	-0,080	0,584	-0,14
Glucose (g/L)	3,575	3,810	-0,235	0,408	-0,58
Fructose (g/L)	4,820	4,725	0,095	0,330	0,29
Glycerin (g/L)	5,200	5,110	0,090	0,348	0,26
pH-Wert	3,260	3,240	0,020	0,049	0,41
Gesamtsäure (g/L)	6,360	6,400	-0,040	0,145	-0,28
Weinsäure (g/L)	2,390	2,620	-0,230	0,227	-1,01
Flüchtige Säure (g/L)	0,375	0,375	0,000	0,089	0,00
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	3,065	2,820	0,245	0,218	1,12
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,200	0,209	-0,009	0,209	-0,04
Freie Schweflige Säure (mg/L)	40,00	42,00	-2,00	3,83	-0,52
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	110,00	112,50	-2,50	5,36	-0,47

Die erhaltenen Z-Score zeigen an, in welchem Ausmaß die "mittleren" Ergebnisse beider Gruppen verschieden sind bzw. inwieweit sich bei den Ergebnissen des FTIR-Verfahrens Matrixeffekte auf die im Vergleich zu den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsmethoden erhaltenen Z-Score auswirken. Entsprechen die systematischen Matrixeffekte einem absoluten Z-Scorebetrag unter 1 so sind sie für die Praxis und die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse nicht relevant. Diese Bedingung ist beim Prüfgut **FT16P04** im Wesentlichen der Fall, wenn

auch der im Absolutbetrag knapp über eins liegende Wert bei dem Parameter Gesamte Äpfelsäure einen mäßig erhöhten Wert zeigt.

Bei dem Prüfgut **FT16P05** liegt dieser Z-Score für vier Parameter über 1,0 davon für drei Parameter sogar über 1,5 und zeigt damit erhebliche Differenzen an. Insbesondere erhöhte positive Z-Score der Laborergebnisse weisen daher bei diesem Prüfgut und diesen Parametern nicht auf laborbedingte Mängel der Arbeitsbedingungen hin. Vielmehr sind, wie bereits bei der Besprechung der systematischen Abweichungen zwischen herkömmlichen und FTIR-Ergebnissen im Abschnitt 5.2 in Teil 1 des Gesamtberichtes besprochen, spezielle Matrixeffekte anzunehmen. Die auffällige Abweichung bei Freier Schwefliger Säure ist nicht durch Ethylacetat bedingt, da die Untersuchungen mit  $^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie keinen bestimmbareren Gehalt an diesem Stoff ergeben haben.

**Tabelle 12: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse das Prüfgut FT16P05**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z-Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00460	1,00436	0,000245	0,000190	1,29
Vorhandener Alkohol (g/L)	83,600	83,600	0,000	0,886	0,00
Gesamtextrakt (g/L)	47,900	47,950	-0,050	0,594	-0,08
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	27,000	26,785	0,215	0,766	0,28
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	27,000	26,700	0,300	0,764	0,39
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	26,600	26,785	-0,185	0,766	-0,24
Glucose (g/L)	6,220	6,150	0,070	0,408	0,17
Fructose (g/L)	20,400	20,545	-0,145	0,598	-0,24
Glycerin (g/L)	5,115	4,992	0,123	0,348	0,35
pH-Wert	3,320	3,240	0,080	0,049	1,62
Gesamtsäure (g/L)	5,695	5,635	0,060	0,145	0,41
Weinsäure (g/L)	2,300	1,900	0,400	0,227	1,76
Flüchtige Säure (g/L)	0,380	0,347	0,033	0,089	0,37
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	2,250	2,190	0,060	0,218	0,28
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,080	0,200	-0,120	0,209	-0,57
Freie Schweflige Säure (mg/L)	38,00	32,10	5,90	3,36	1,76
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	135,00	137,00	-2,00	5,36	-0,37

Weitere Details zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse wurden im Abschnitt 5, insbesondere 5.2 des ersten Teiles und im Abschnitt 3.2 des zweiten Teiles der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung angesprochen. Ferner wurde auf erhebliche Matrixeffekte in dem Kurzbericht hingewiesen, der den Ergebnismitteilungen für die Teilnehmer beigefügt war.

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P04

### 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	0,99520	-0,000100	-0,76	
02	LwK 8.1	0,99521	-0,000090	-0,68	
04	LwK 8.4	0,99515	-0,000150	-1,14	
05	LwK 8.4	0,99514	-0,000160	-1,21	
06	LwK 8.4	0,99558	0,000280	2,12	
07	LwK 8.4	0,99530	0,000000	0,00	
08	LwK 8.4	0,99519	-0,000110	-0,83	
09	LwK 8.1	0,99540	0,000100	0,76	
10	LwK 8.1	0,99512	-0,000180	-1,36	
11	LwK 8.1	0,99500	-0,000300	-2,27	
12	LwK 8.4	0,99523	-0,000075	-0,57	
14	LwK 8.4	0,99539	0,000090	0,68	
15	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
16	LwK 8.4	0,99540	0,000100	0,76	
18	LwK 8.4	0,99500	-0,000300	-2,27	
20	LwK 8.4	0,99565	0,000350	2,65	
21	LwK 8.4	0,99531	0,000010	0,08	
22	LwK 8.4	0,99541	0,000110	0,83	
23	LwK 8.4	0,99530	0,000000	0,00	
24	LwK 8.4	0,99483	-0,000470	-3,56	
25	LwK 8.4	0,99535	0,000050	0,38	
27	LwK 8.4	0,99544	0,000140	1,06	
28	LwK 8.4	0,99510	-0,000200	-1,52	
29	LwK 8.4	0,99542	0,000120	0,91	
32	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
36	LwK 8.4	0,99533	0,000030	0,23	
38	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
40	LwK 8.4	0,99540	0,000100	0,76	
41	LwK 8.4	0,99532	0,000020	0,15	
42	LwK 8.4	0,99521	-0,000090	-0,68	
44	LwK 8.4	0,99526	-0,000040	-0,30	
45	LwK 8.4	0,99503	-0,000270	-2,05	
46	LwK 8.4	0,99551	0,000210	1,59	
47	LwK 8.4	0,99540	0,000100	0,76	
48	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
49	LwK 8.4	0,99525	-0,000050	-0,38	
50	LwK 8.4	0,99539	0,000090	0,68	
52	LwK 8.4	0,99531	0,000010	0,08	
53	LwK 8.4	0,99530	0,000000	0,00	
54	LwK 8.4	0,99543	0,000129	0,98	
55	LwK 8.4	0,99540	0,000100	0,76	
57	LwK 8.4	0,99538	0,000080	0,61	
58	LwK 8.4	0,99515	-0,000150	-1,14	
61	LwK 8.4	0,99515	-0,000150	-1,14	
62	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
63	LwK 8.4	0,99530	0,000000	0,00	
65	LwK 8.4	0,99538	0,000080	0,61	
66	LwK 8.4	0,99540	0,000100	0,76	
67	LwK 8.4	0,99510	-0,000200	-1,52	
70	LwK 8.4	0,99521	-0,000090	-0,68	
71	LwK 8.1	0,99530	0,000000	0,00	
72	LwK 8.4	0,99539	0,000090	0,68	
78	LwK 8.4	0,99490	-0,000400	-3,03	
79	LwK 8.4	0,99598	0,000680	5,15	(**)
80	LwK 8.4	0,99300	-0,002300	-17,42	(**)
86	LwK 8.4	0,99380	-0,001500	-11,36	(**)
95	LwK 8.4	0,99520	-0,000100	-0,76	
99	LwK 8.4	0,99530	0,000000	0,00	

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

## 4.1.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
202	FTIR	0,99545	0,000150	0,79	
203	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
204	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
205	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
206	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
207	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
208	FTIR	0,99510	-0,000200	-1,05	
209	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
210	FTIR	0,99553	0,000230	1,21	
211	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
212	FTIR	0,99510	-0,000200	-1,05	
213	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
215	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
216	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
217	FTIR	0,99500	-0,000300	-1,58	
218	FTIR	0,99500	-0,000300	-1,58	
219	FTIR	0,99526	-0,000040	-0,21	
220	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
221	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
222	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
223	FTIR	0,99569	0,000390	2,05	
224	FTIR	0,99497	-0,000330	-1,74	
225	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
226	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
227	FTIR	0,99553	0,000230	1,21	
228	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
229	FTIR	0,99566	0,000360	1,89	
230	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
231	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
232	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
234	FTIR	0,99560	0,000300	1,58	
236	FTIR	0,99537	0,000070	0,37	
238	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
239	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
242	FTIR	0,99536	0,000060	0,32	
243	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
244	FTIR	0,99523	-0,000070	-0,37	
245	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
246	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
247	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
248	FTIR	0,99525	-0,000050	-0,26	
249	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
251	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
252	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
253	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
254	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
256	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
257	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
258	FTIR	0,99512	-0,000180	-0,95	
259	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
260	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
261	FTIR	0,99546	0,000160	0,84	
262	FTIR	0,99533	0,000030	0,16	
263	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
264	FTIR	0,99580	0,000500	2,63	
265	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
266	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
267	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
268	FTIR	0,99570	0,000400	2,11	
269	FTIR	0,99567	0,000370	1,95	
270	FTIR	0,99554	0,000240	1,26	
271	FTIR	0,99555	0,000250	1,32	
272	FTIR	0,99567	0,000370	1,95	
273	FTIR	0,99580	0,000500	2,63	
274	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	0,99510	-0,000200	-1,05	
276	FTIR	0,99549	0,000190	1,00	
277	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
278	FTIR	0,99584	0,000543	2,86	
279	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
281	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
282	FTIR	0,99540	0,000100	0,53	
283	FTIR	0,99519	-0,000110	-0,58	
284	FTIR	0,99613	0,000835	4,39	
285	FTIR	0,99430	-0,001000	-5,26	(**)
286	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
320	FTIR	0,99580	0,000500	2,63	
321	FTIR	0,99520	-0,000100	-0,53	
339	FTIR	0,99550	0,000200	1,05	
346	FTIR	0,99580	0,000500	2,63	
351	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
366	FTIR	0,99530	0,000000	0,00	
371	FTIR	0,99560	0,000300	1,58	

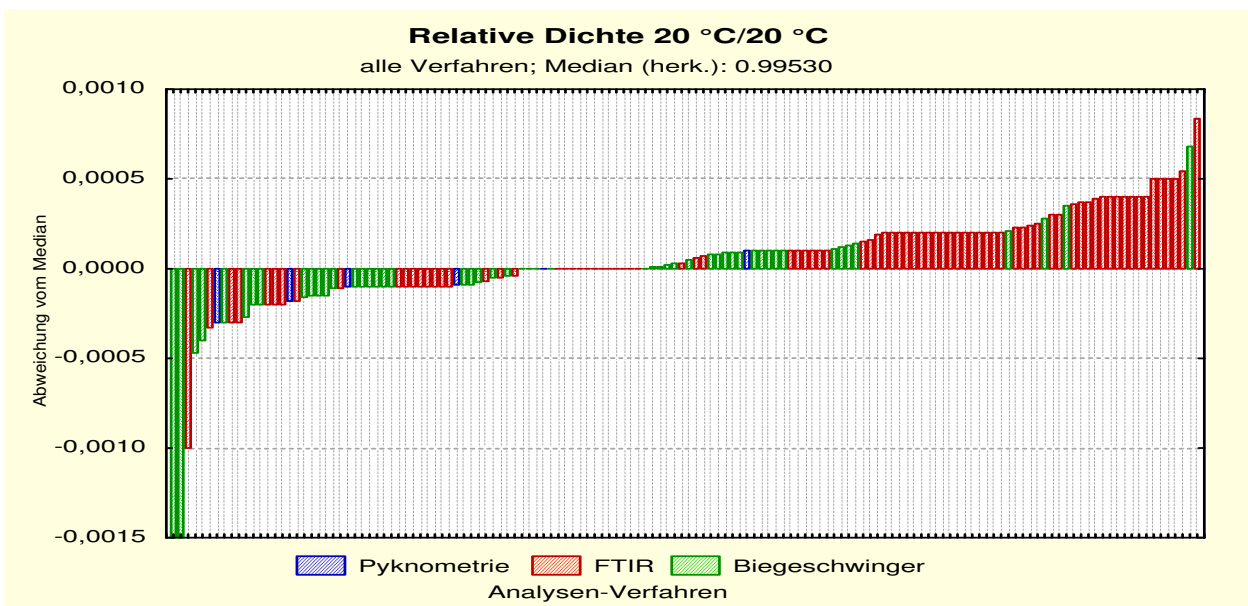
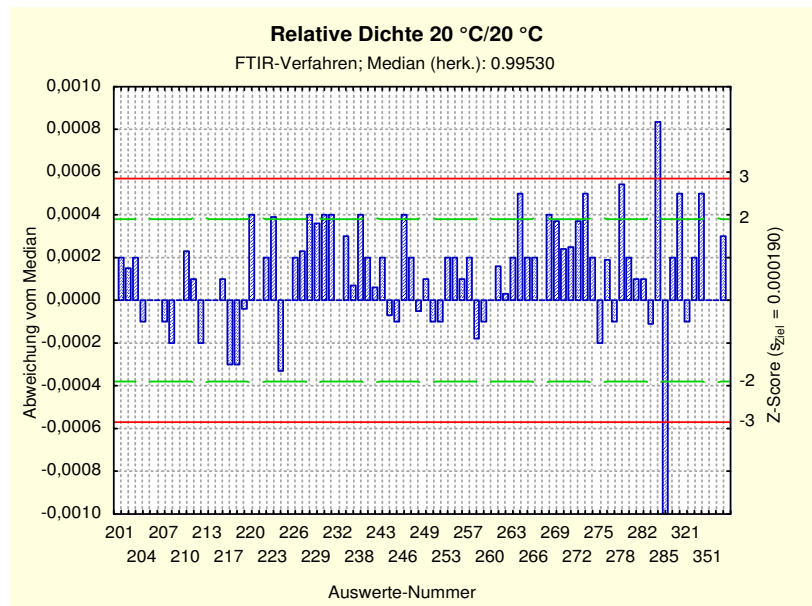
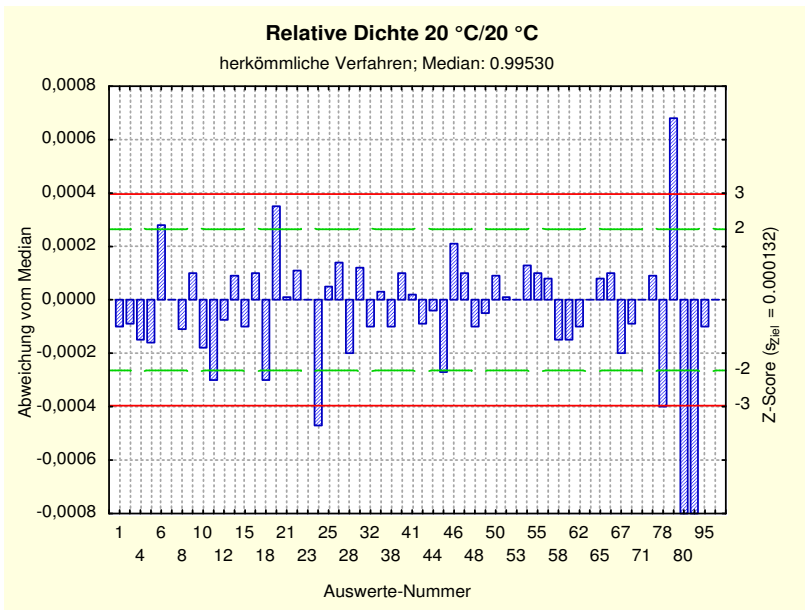
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

**4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	58	55
Minimalwert	0,99300	0,99483
Mittelwert	0,995217	0,995269
Median	0,995300	0,995300
Maximalwert	0,99598	0,99565
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,000397	0,000156
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000052	0,000021
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	3,01	1,18
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	2,09	0,82
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,39	0,16
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,27	0,11

**4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	6	0,99521	0,000156
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	52	0,99528	0,000157
	herkömmliche Verfahren	58	0,99527	0,000157
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	0,99543	0,000226





## 4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 4.2.1 Herkömmliche Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	88,65	-0,650	-0,25	-1,21	
02	LwK 2.1	90,30	1,000	0,39	1,87	
04	LwK 2.9	90,16	0,860	0,33	1,61	
05	LwK 2.9	89,03	-0,274	-0,11	-0,51	
06	LwK 2.4	89,20	-0,100	-0,04	-0,19	
07	LwK 2.4	89,00	-0,300	-0,12	-0,56	
08	LwK 2.4	88,93	-0,370	-0,14	-0,69	
09	LwK 2.4	89,18	-0,120	-0,05	-0,22	
10	LwK 2.4	89,34	0,040	0,02	0,07	
11	LwK 2.1	89,90	0,600	0,23	1,12	
12	LwK 2.1	89,74	0,440	0,17	0,82	
14	LwK 2.1	88,70	-0,600	-0,23	-1,12	
15	LwK 2.9	89,80	0,500	0,19	0,93	
16	LwK 2.1	89,80	0,500	0,19	0,93	
18	LwK 2.9	90,30	1,000	0,39	1,87	
19	LwK 2.7	89,06	-0,240	-0,09	-0,45	
20	LwK 2.9	89,20	-0,100	-0,04	-0,19	
21	LwK 2.7	89,56	0,260	0,10	0,49	
22	LwK 2.4	89,00	-0,300	-0,12	-0,56	
23	LwK 2.7	89,03	-0,270	-0,11	-0,50	
24	LwK 2.9	89,90	0,600	0,23	1,12	
25	LwK 2.5	90,40	1,100	0,43	2,06	
27	LwK 2.1	88,92	-0,380	-0,15	-0,71	
28	LwK 2.4	89,70	0,400	0,16	0,75	
29	LwK 2.5	87,90	-1,400	-0,54	-2,62	
32	LwK 2.1	89,70	0,400	0,16	0,75	
40	LwK 2.9	90,10	0,800	0,31	1,50	
41	LwK 2.4	89,60	0,300	0,12	0,56	
42	LwK 2.4	89,30	0,000	0,00	0,00	
44	LwK 2.4	89,30	0,000	0,00	0,00	
45	LwK 2.9	88,93	-0,370	-0,14	-0,69	
46	LwK 2.9	89,45	0,150	0,06	0,28	
47	LwK 2.1	89,30	0,000	0,00	0,00	
48	LwK 2.5	89,20	-0,100	-0,04	-0,19	
49	LwK 2.1	89,80	0,500	0,19	0,93	
50	LwK 2.4	90,00	0,700	0,27	1,31	
52	LwK 2.9	90,20	0,900	0,35	1,68	
53	LwK 2.9	89,40	0,100	0,04	0,19	
54	LwK 2.9	90,34	1,040	0,40	1,94	
55	LwK 2.9	87,90	-1,400	-0,54	-2,62	
57	LwK 2.1	89,35	0,050	0,02	0,09	
58	LwK 2.9	90,06	0,760	0,30	1,42	
61	LwK 2.9	90,00	0,700	0,27	1,31	
62	LwK 2.1	88,50	-0,800	-0,31	-1,50	
63	LwK 2.7	89,90	0,600	0,23	1,12	
65	LwK 2.1	88,50	-0,800	-0,31	-1,50	
66	LwK 2.5	88,70	-0,600	-0,23	-1,12	
70	LwK 2.4	88,70	-0,600	-0,23	-1,12	
71	LwK 2.4	88,50	-0,800	-0,31	-1,50	
72	LwK 2.9	89,68	0,380	0,15	0,71	
75	LwK 2.3	89,00	-0,300	-0,12	-0,56	
78	LwK 2.1	89,03	-0,270	-0,11	-0,50	
79	LwK 2.9	87,95	-1,350	-0,53	-2,52	
86	LwK 2.4	87,63	-1,665	-0,65	-3,11	
91	LwK 2.1	89,11	-0,195	-0,08	-0,36	
92	LwK 2.9	89,10	-0,200	-0,08	-0,37	
93	LwK 2.5	89,00	-0,300	-0,12	-0,56	
94	LwK 2.9	89,90	0,600	0,23	1,12	
97	LwK 2.5	88,91	-0,390	-0,15	-0,73	
99	LwK 2.9	89,20	-0,100	-0,04	-0,19	
103	LwK 2.1	89,50	0,200	0,08	0,37	
104	LwK 2.9	89,60	0,300	0,12	0,56	
107	LwK 2.4	89,40	0,100	0,04	0,19	
108	LwK 2.1	88,50	-0,800	-0,31	-1,50	

## 4.2.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	89,14	-0,160	-0,06	-0,18	
202	LwK 2.8	89,80	0,500	0,19	0,56	
203	LwK 2.8	89,00	-0,300	-0,12	-0,34	
204	LwK 2.8	89,40	0,100	0,04	0,11	
205	LwK 2.8	88,87	-0,432	-0,17	-0,49	
206	LwK 2.8	91,26	1,960	0,76	2,21	
207	LwK 2.8	89,60	0,300	0,12	0,34	
208	LwK 2.8	88,20	-1,100	-0,43	-1,24	
209	LwK 2.8	90,91	1,610	0,63	1,82	
210	LwK 2.8	89,72	0,420	0,16	0,47	
211	LwK 2.8	88,20	-1,100	-0,43	-1,24	
212	LwK 2.8	89,68	0,380	0,15	0,43	
213	LwK 2.8	90,20	0,900	0,35	1,02	
215	LwK 2.8	89,70	0,400	0,16	0,45	
216	LwK 2.8	89,20	-0,100	-0,04	-0,11	
217	LwK 2.8	90,50	1,200	0,47	1,35	
218	LwK 2.8	91,10	1,800	0,70	2,03	
219	LwK 2.8	89,60	0,300	0,12	0,34	
220	LwK 2.8	90,80	1,500	0,58	1,69	
221	LwK 2.8	88,30	-1,000	-0,39	-1,13	
222	LwK 2.8	87,62	-1,680	-0,65	-1,90	
223	LwK 2.8	89,48	0,180	0,07	0,20	
224	LwK 2.8	90,40	1,100	0,43	1,24	
225	LwK 2.8	89,20	-0,100	-0,04	-0,11	
226	LwK 2.8	90,59	1,290	0,50	1,46	
227	LwK 2.8	89,78	0,480	0,19	0,54	
228	LwK 2.8	88,21	-1,090	-0,42	-1,23	
229	LwK 2.8	89,40	0,100	0,04	0,11	
230	LwK 2.8	89,00	-0,300	-0,12	-0,34	
231	LwK 2.8	86,81	-2,490	-0,97	-2,81	
232	LwK 2.8	89,60	0,300	0,12	0,34	
234	LwK 2.8	89,10	-0,200	-0,08	-0,23	
236	LwK 2.8	88,20	-1,100	-0,43	-1,24	
238	LwK 2.8	89,90	0,600	0,23	0,68	
239	LwK 2.8	88,80	-0,500	-0,19	-0,56	
242	LwK 2.8	90,10	0,800	0,31	0,90	
243	LwK 2.8	89,00	-0,300	-0,12	-0,34	
244	LwK 2.8	90,16	0,860	0,33	0,97	
245	LwK 2.8	88,80	-0,500	-0,19	-0,56	
246	LwK 2.8	90,60	1,300	0,51	1,47	
247	LwK 2.8	89,08	-0,220	-0,09	-0,25	
248	LwK 2.8	89,05	-0,250	-0,10	-0,28	
249	LwK 2.8	88,92	-0,380	-0,15	-0,43	
250	LwK 2.8	89,08	-0,220	-0,09	-0,25	
251	LwK 2.8	88,30	-1,000	-0,39	-1,13	
252	LwK 2.8	89,01	-0,290	-0,11	-0,33	
253	LwK 2.8	89,90	0,600	0,23	0,68	
254	LwK 2.8	90,00	0,700	0,27	0,79	
256	LwK 2.8	90,80	1,500	0,58	1,69	
257	LwK 2.8	88,50	-0,800	-0,31	-0,90	
258	LwK 2.8	90,30	1,000	0,39	1,13	
259	LwK 2.8	88,60	-0,700	-0,27	-0,79	
260	LwK 2.8	89,70	0,400	0,16	0,45	
261	LwK 2.8	89,21	-0,090	-0,04	-0,10	
262	LwK 2.8	87,71	-1,590	-0,62	-1,79	
263	LwK 2.8	89,40	0,100	0,04	0,11	
264	LwK 2.8	89,60	0,300	0,12	0,34	
265	LwK 2.8	90,50	1,200	0,47	1,35	
266	LwK 2.8	87,50	-1,800	-0,70	-2,03	
267	LwK 2.8	89,41	0,110	0,04	0,12	
268	LwK 2.8	89,30	0,000	0,00	0,00	
269	LwK 2.8	90,20	0,900	0,35	1,02	
270	LwK 2.8	89,50	0,200	0,08	0,23	
271	LwK 2.8	89,45	0,150	0,06	0,17	
272	LwK 2.8	88,69	-0,610	-0,24	-0,69	
273	LwK 2.8	87,01	-2,290	-0,89	-2,58	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

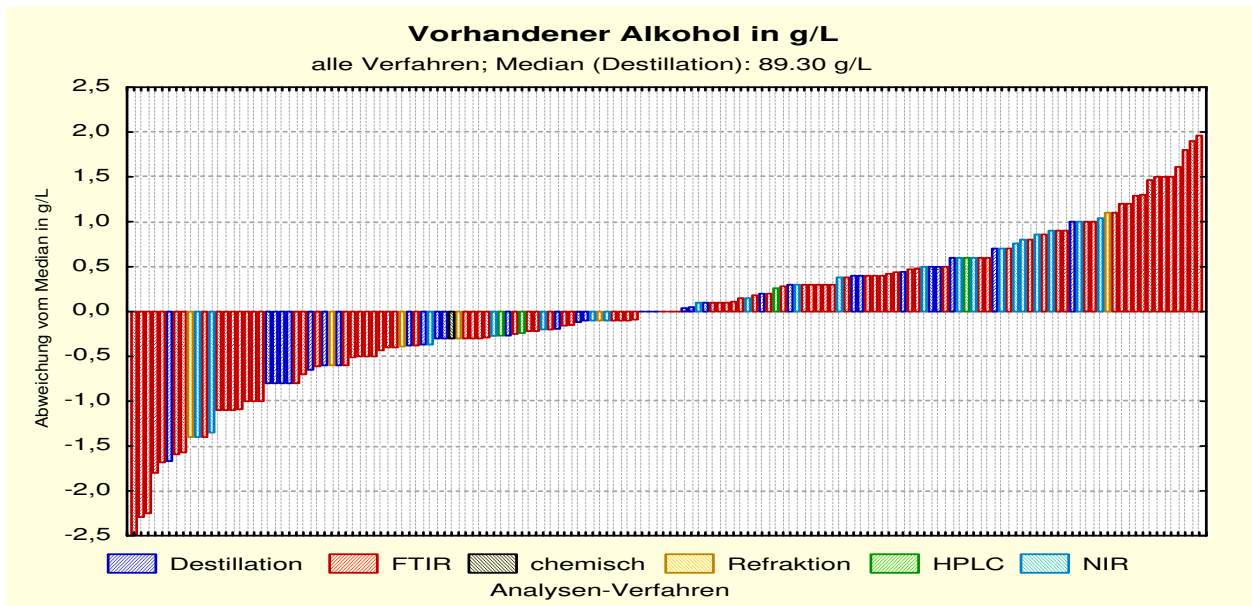
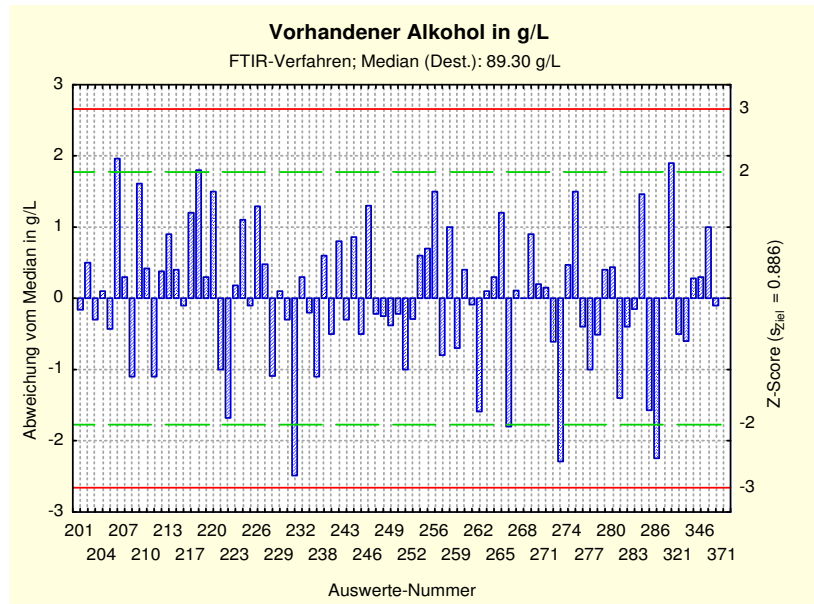
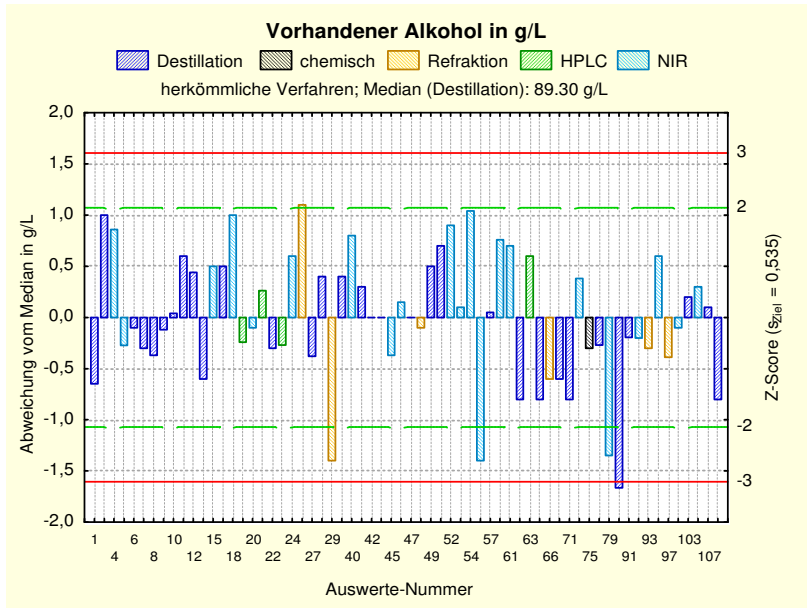
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 2.8	89,77	0,470	0,18	0,53	
275	LwK 2.8	90,80	1,500	0,58	1,69	
276	LwK 2.8	88,90	-0,400	-0,16	-0,45	
277	LwK 2.8	88,30	-1,000	-0,39	-1,13	
278	LwK 2.8	88,79	-0,510	-0,20	-0,58	
279	LwK 2.8	89,70	0,400	0,16	0,45	
280	LwK 2.8	89,74	0,437	0,17	0,49	
281	LwK 2.8	87,90	-1,400	-0,54	-1,58	
282	LwK 2.8	88,90	-0,400	-0,16	-0,45	
283	LwK 2.8	89,15	-0,150	-0,06	-0,17	
284	LwK 2.8	90,76	1,463	0,57	1,65	
285	LwK 2.8	87,73	-1,570	-0,61	-1,77	
286	LwK 2.8	87,05	-2,247	-0,87	-2,54	
313	LwK 2.8	89,30	0,000	0,00	0,00	
320	LwK 2.8	91,20	1,900	0,74	2,14	
321	LwK 2.8	88,80	-0,500	-0,19	-0,56	
339	LwK 2.8	88,70	-0,600	-0,23	-0,68	
345	LwK 2.8	89,58	0,280	0,11	0,32	
346	LwK 2.8	89,60	0,300	0,12	0,34	
351	LwK 2.8	90,30	1,000	0,39	1,13	
366	LwK 2.8	89,20	-0,100	-0,04	-0,11	
371	LwK 2.8	89,30	0,000	0,00	0,00	

**4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	31
Minimalwert	87,63
Mittelwert	89,212
Median	89,300
Maximalwert	90,30
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,554
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,099
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,569
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ FTIR}$ )	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,22
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,04
Quotient ( $s_L/s_{exp\ FTIR}$ )	0,63
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,04
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,19
Quotient ( $u_M/s_{exp\ FTIR}$ )	0,11

**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	16	89,295	0,615
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	15	89,166	0,444
	Destillationsverfahren	31	89,229	0,542
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	89,000	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	6	89,016	0,856
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, z.B. n. Heidger	4	89,387	0,475
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	89,349	0,935
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	21	89,608	0,597



### 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	25,30	-1,45	-1,57	-2,44	
02	Biegeschwinger	26,10	-0,65	-0,70	-1,09	
04	LwK 3.3	26,70	-0,05	-0,05	-0,08	
06	LwK 3.3	27,40	0,65	0,70	1,09	
07	LwK 3.3	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
08	LwK 3.3	26,00	-0,75	-0,81	-1,26	
09	LwK 3.1	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
10	LwK 3.1	26,20	-0,55	-0,60	-0,93	
11	LwK 3.2	26,10	-0,65	-0,70	-1,09	
12	LwK 3.3	26,80	0,05	0,05	0,08	
14	LwK 3.3	26,70	-0,05	-0,05	-0,08	
15	LwK 3.3	27,40	0,65	0,70	1,09	
16	LwK 3.3	27,10	0,35	0,38	0,59	
18	LwK 3.3	26,40	-0,35	-0,38	-0,59	
20	LwK 3.3	27,80	1,05	1,14	1,77	
21	LwK 3.3	26,80	0,05	0,05	0,08	
22	LwK 3.3	26,90	0,15	0,16	0,25	
23	LwK 3.3	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
24	LwK 3.3	25,60	-1,15	-1,25	-1,94	
25	LwK 3.3	27,10	0,35	0,38	0,59	
27	LwK 3.2	26,90	0,15	0,16	0,25	
28	LwK 3.3	27,81	1,06	1,15	1,78	
29	LwK 3.3	26,50	-0,25	-0,27	-0,42	
32	LwK 3.2	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
40	LwK 3.3	27,20	0,45	0,49	0,76	
41	LwK 3.3	26,90	0,15	0,16	0,25	
44	LwK 3.3	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
45	LwK 3.2	25,90	-0,85	-0,92	-1,43	
46	LwK 3.3	27,40	0,65	0,70	1,09	
47	LwK 3.2	26,20	-0,55	-0,60	-0,93	
49	LwK 3.3	26,80	0,05	0,05	0,08	
50	LwK 3.3	27,20	0,45	0,49	0,76	
52	LwK 3.3	27,00	0,25	0,27	0,42	
53	LwK 3.3	26,70	-0,05	-0,05	-0,08	
54	LwK 3.3	27,40	0,65	0,70	1,09	
55	LwK 3.3	26,40	-0,35	-0,38	-0,59	
58	LwK 3.3	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
61	LwK 3.3	27,00	0,25	0,27	0,42	
62	LwK 3.2	26,00	-0,75	-0,81	-1,26	
63	LwK 3.3	27,60	0,85	0,92	1,43	
65	LwK 3.2	26,10	-0,65	-0,70	-1,09	
70	LwK 3.3	26,20	-0,55	-0,60	-0,93	
71	LwK 3.3	26,30	-0,45	-0,49	-0,76	
79	LwK 3.3	28,10	1,35	1,46	2,27	
95	LwK 3.2	26,30	-0,45	-0,49	-0,76	
97	LwK 3.3	26,90	0,15	0,16	0,25	
99	LwK 3.3	26,80	0,05	0,05	0,08	
108	LwK 3.3	28,10	1,35	1,46	2,27	

#### 4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	25,80	-0,95	-1,03	-1,60	
202	FTIR	27,19	0,44	0,48	0,74	
203	FTIR	27,20	0,45	0,49	0,76	
204	FTIR	27,70	0,95	1,03	1,60	
206	FTIR	28,74	1,99	2,16	3,35	
209	FTIR	27,14	0,39	0,42	0,66	
210	FTIR	27,20	0,45	0,49	0,76	
211	FTIR	26,40	-0,35	-0,38	-0,59	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	27,20	0,45	0,49	0,76	
217	FTIR	26,58	-0,17	-0,18	-0,29	
218	FTIR	26,20	-0,55	-0,60	-0,93	
219	FTIR	26,30	-0,45	-0,49	-0,76	
221	FTIR	26,10	-0,65	-0,70	-1,09	
223	FTIR	29,80	3,05	3,31	5,13	(**)
225	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
227	FTIR	27,43	0,68	0,74	1,14	
228	LwK 3.3	27,24	0,49	0,53	0,82	
229	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
230	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
231	FTIR	26,97	0,22	0,24	0,37	
232	FTIR	26,70	-0,05	-0,05	-0,08	
234	FTIR	27,75	1,00	1,08	1,68	
238	FTIR	27,30	0,55	0,60	0,93	
239	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
242	FTIR	27,40	0,65	0,70	1,09	
244	FTIR	26,80	0,05	0,05	0,08	
248	FTIR	27,10	0,35	0,38	0,59	
249	FTIR	27,30	0,55	0,60	0,93	
251	FTIR	27,00	0,25	0,27	0,42	
253	FTIR	27,30	0,55	0,60	0,93	
254	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
256	FTIR	27,60	0,85	0,92	1,43	
257	FTIR	27,50	0,75	0,81	1,26	
260	FTIR	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
261	FTIR	27,18	0,43	0,47	0,72	
264	FTIR	27,40	0,65	0,70	1,09	
265	FTIR	26,40	-0,35	-0,38	-0,59	
266	FTIR	27,70	0,95	1,03	1,60	
268	FTIR	26,20	-0,55	-0,60	-0,93	
269	FTIR	27,70	0,95	1,03	1,60	
270	FTIR	26,50	-0,25	-0,27	-0,42	
271	FTIR	27,60	0,85	0,92	1,43	
272	FTIR	27,70	0,95	1,03	1,60	
273	FTIR	27,30	0,55	0,60	0,93	
274	FTIR	27,84	1,09	1,18	1,84	
275	FTIR	25,80	-0,95	-1,03	-1,60	
276	FTIR	27,20	0,45	0,49	0,76	
279	FTIR	27,65	0,90	0,98	1,52	
281	FTIR	27,80	1,05	1,14	1,77	
282	FTIR	37,00	10,25	11,11	17,26	(**)
283	FTIR	26,70	-0,05	-0,05	-0,08	
321	FTIR	26,60	-0,15	-0,16	-0,25	
339	FTIR	27,60	0,85	0,92	1,43	
366	FTIR	27,80	1,05	1,14	1,77	

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

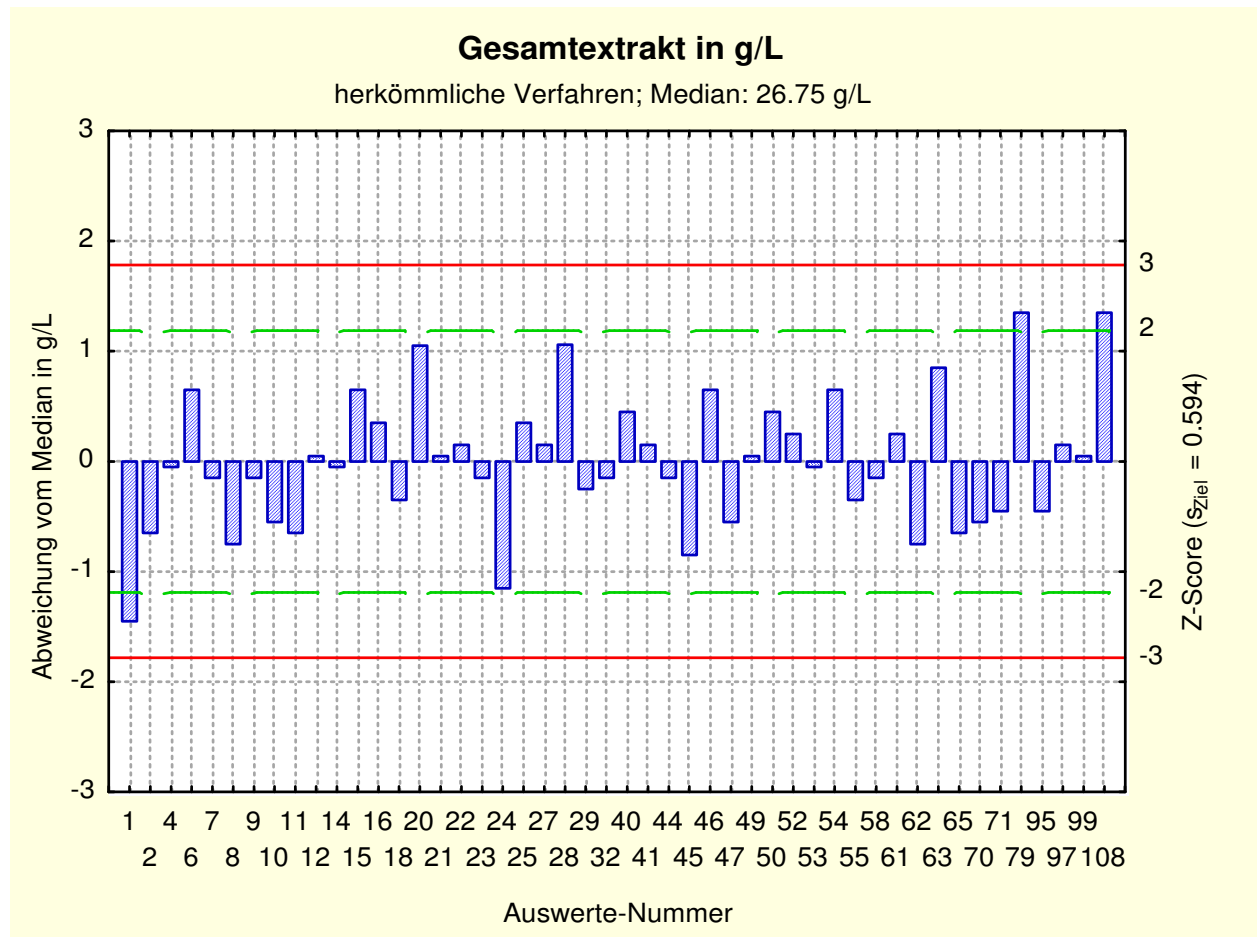
**4.3.3 Angaben zu den Analyseverfahren**

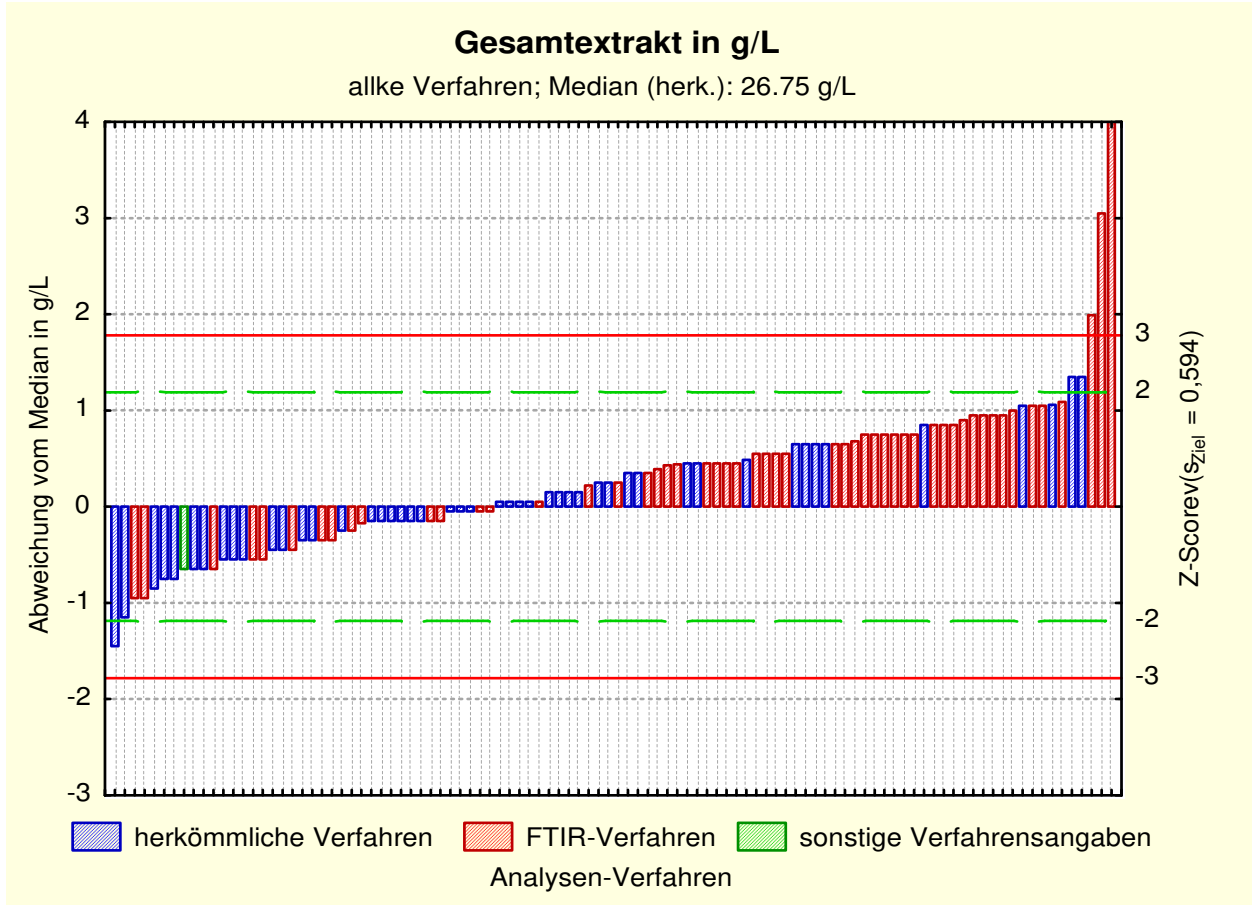
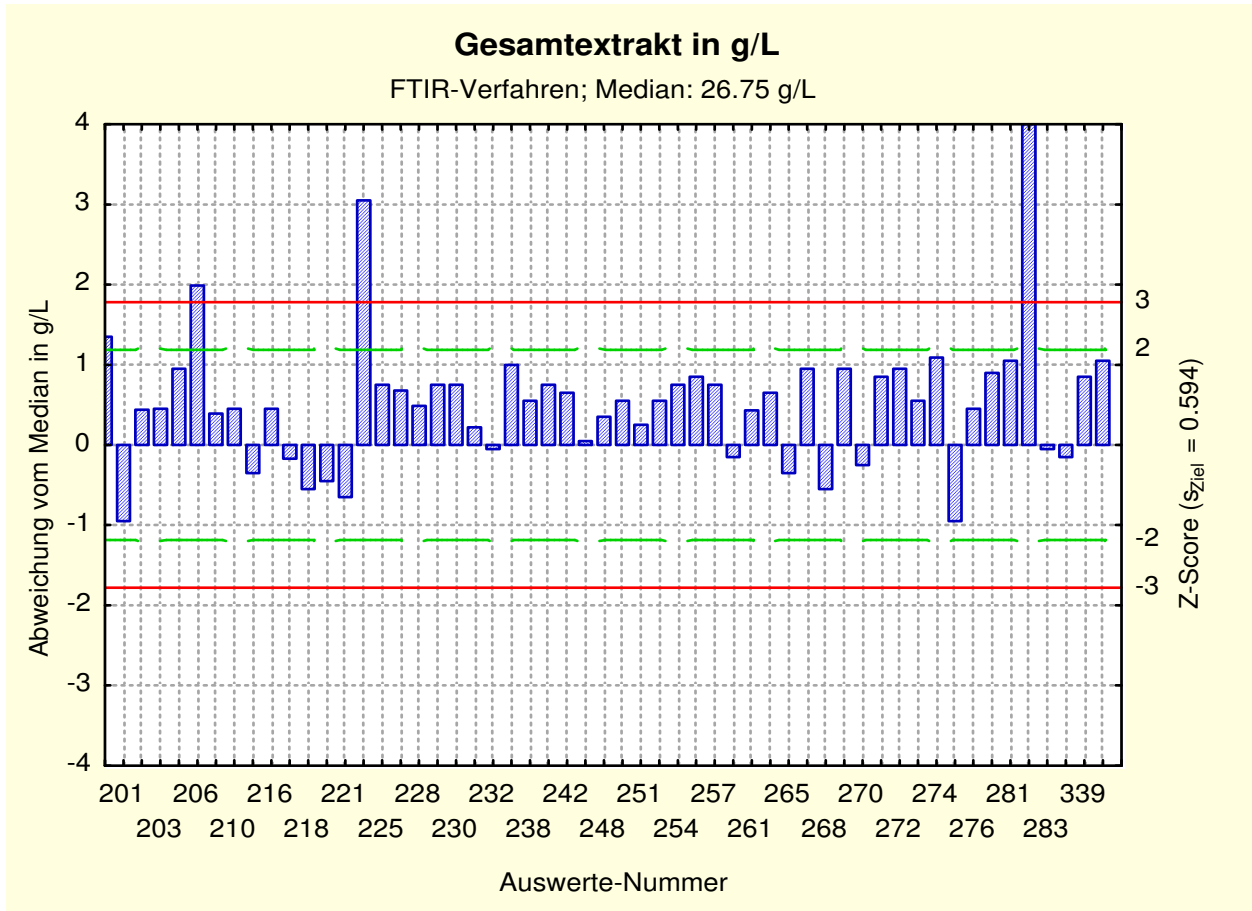
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	26,400	0,321
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	9	26,164	0,395
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	37 48	26,929 26,760	0,518 0,590
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	53	27,201	0,605
Biegeschwinger	ungenauere Verfahrensangabe; eigentliches Vorgehen ist nicht erkennbar	1	26,100	

**4.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	48
Minimalwert	25,3
Mittelwert	26,77
Median	26,75
Maximalwert	28,1
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,606
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,087
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,923
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,66
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,02
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(1,07)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,09
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,15
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,15)

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse 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	9,15	0,570	1,62	2,08	
04	LwK 4.7	8,62	0,040	0,11	0,15	
06	LwK 4.5	8,42	-0,160	-0,46	-0,58	
07	LwK 4.5	8,50	-0,080	-0,23	-0,29	
08	LwK 4.5	8,70	0,120	0,34	0,44	
09	LwK 4.7	8,54	-0,040	-0,11	-0,15	
10	LwK 4.5	8,56	-0,020	-0,06	-0,07	
11	LwK 4.5	8,11	-0,470	-1,34	-1,71	
12	LwK 4.5	8,23	-0,353	-1,01	-1,29	
14	LwK 4.7	8,77	0,190	0,54	0,69	
15	LwK 4.5	8,50	-0,080	-0,23	-0,29	
16	LwK 4.5	8,60	0,020	0,06	0,07	
18	LwK 4.8	8,80	0,220	0,63	0,80	
19	LwK 4.7	8,94	0,360	1,03	1,31	
20	LwK 4.4	8,40	-0,180	-0,51	-0,66	
21	LwK 4.7	8,80	0,220	0,63	0,80	
22	LwK 4.5	8,65	0,070	0,20	0,25	
23	LwK 4.7	8,63	0,050	0,14	0,18	
24	NMR	8,98	0,400	1,14	1,46	
25	LwK 4.4	8,60	0,020	0,06	0,07	
27	LwK 4.5	8,66	0,080	0,23	0,29	
28	LwK 4.7	9,10	0,520	1,48	1,89	
29	LwK 4.4	8,90	0,320	0,91	1,17	
32	LwK 4.5	8,90	0,320	0,91	1,17	
40	LwK 4.5	8,70	0,120	0,34	0,44	
41	LwK 4.7	8,07	-0,510	-1,45	-1,86	
42	LwK 4.5	8,26	-0,320	-0,91	-1,17	
44	LwK 4.7	8,65	0,072	0,21	0,26	
45	LwK 4.4	9,77	1,190	3,39	4,33	
46	LwK 4.5	8,65	0,070	0,20	0,25	
47	LwK 4.5	8,45	-0,130	-0,37	-0,47	
49	LwK 4.5	8,77	0,190	0,54	0,69	
50	LwK 4.5	8,56	-0,020	-0,06	-0,07	
52	LwK 4.7	8,60	0,020	0,06	0,07	
53	LwK 4.4	8,10	-0,480	-1,37	-1,75	
54	LwK 4.5	8,56	-0,020	-0,06	-0,07	
55	LwK 4.5	8,50	-0,080	-0,23	-0,29	
57	LwK 4.5	8,50	-0,080	-0,23	-0,29	
58	LwK 4.5	8,38	-0,200	-0,57	-0,73	
61	LwK 4.7	8,20	-0,380	-1,08	-1,38	
62	LwK 4.4	9,53	0,950	2,70	3,46	
63	LwK 4.7	8,70	0,120	0,34	0,44	
65	LwK 4.5	7,80	-0,780	-2,22	-2,84	
66	LwK 4.4	8,40	-0,180	-0,51	-0,66	
70	LwK 4.1	8,36	-0,220	-0,63	-0,80	
71	LwK 4.4	8,40	-0,180	-0,51	-0,66	
72	LwK 4.5	8,39	-0,190	-0,54	-0,69	
78	LwK 4.4	9,35	0,770	2,19	2,80	
79	LwK 4.4	9,40	0,820	2,33	2,99	
81	LwK 4.4	9,40	0,820	2,33	2,99	
86	LwK 4.4	7,70	-0,880	-2,51	-3,21	
95	LwK 4.5	7,85	-0,730	-2,08	-2,66	
97	LwK 4.7	8,76	0,180	0,51	0,66	

**4.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	8,34	-0,240	-0,68	-0,41	
203	LwK 4.8	8,46	-0,120	-0,34	-0,21	
204	LwK 4.8	8,21	-0,370	-1,05	-0,63	
206	LwK 4.8	9,82	1,240	3,53	2,12	
207	LwK 4.8	8,80	0,220	0,63	0,38	
208	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
209	LwK 4.8	8,14	-0,440	-1,25	-0,75	
210	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
211	LwK 4.8	9,70	1,120	3,19	1,92	
212	LwK 4.8	7,75	-0,830	-2,36	-1,42	
213	LwK 4.8	8,25	-0,330	-0,94	-0,57	
215	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
216	LwK 4.8	8,39	-0,190	-0,54	-0,33	
217	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
218	LwK 4.8	8,77	0,190	0,54	0,33	
219	LwK 4.8	8,11	-0,470	-1,34	-0,80	
220	LwK 4.8	9,50	0,920	2,62	1,58	
221	LwK 4.8	7,47	-1,110	-3,16	-1,90	
222	LwK 4.8	8,06	-0,520	-1,48	-0,89	
223	LwK 4.8	9,59	1,010	2,88	1,73	
224	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
225	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
226	LwK 4.8	9,17	0,590	1,68	1,01	
227	LwK 4.8	8,27	-0,310	-0,88	-0,53	
228	LwK 4.8	7,80	-0,780	-2,22	-1,34	
229	LwK 4.8	8,97	0,390	1,11	0,67	
230	LwK 4.8	8,49	-0,090	-0,26	-0,15	
231	LwK 4.8	6,99	-1,590	-4,53	-2,72	
232	LwK 4.8	7,90	-0,680	-1,94	-1,16	
234	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
236	LwK 4.8	7,63	-0,950	-2,70	-1,63	
238	LwK 4.8	7,98	-0,600	-1,71	-1,03	
239	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
242	LwK 4.8	9,33	0,750	2,14	1,28	
243	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
244	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
245	LwK 4.8	8,90	0,320	0,91	0,55	
246	LwK 4.8	6,90	-1,680	-4,78	-2,88	
247	LwK 4.8	8,77	0,190	0,54	0,33	
248	LwK 4.8	8,20	-0,380	-1,08	-0,65	
249	LwK 4.8	8,23	-0,350	-1,00	-0,60	
250	LwK 4.8	7,69	-0,890	-2,53	-1,52	
251	LwK 4.8	9,40	0,820	2,33	1,40	
252	LwK 4.8	7,91	-0,670	-1,91	-1,15	
253	LwK 4.8	8,16	-0,420	-1,20	-0,72	
254	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
256	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
257	LwK 4.8	8,70	0,120	0,34	0,21	
258	LwK 4.8	7,90	-0,680	-1,94	-1,16	
259	LwK 4.8	8,18	-0,400	-1,14	-0,68	
260	LwK 4.8	8,42	-0,160	-0,46	-0,27	
261	LwK 4.8	8,28	-0,300	-0,85	-0,51	
262	LwK 4.8	9,34	0,760	2,16	1,30	
263	LwK 4.8	8,50	-0,080	-0,23	-0,14	
264	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
265	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
266	LwK 4.8	7,30	-1,280	-3,64	-2,19	
267	LwK 4.8	5,70	-2,880	-8,20	-4,93	
268	LwK 4.8	8,34	-0,240	-0,68	-0,41	
269	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
270	LwK 4.8	7,64	-0,940	-2,68	-1,61	
271	LwK 4.8	8,15	-0,430	-1,22	-0,74	
272	LwK 4.8	8,56	-0,020	-0,06	-0,03	
273	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	8,93	0,350	1,00	0,60	
275	LwK 4.8	8,70	0,120	0,34	0,21	
276	LwK 4.8	8,77	0,190	0,54	0,33	
277	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
278	LwK 4.8	8,02	-0,560	-1,59	-0,96	
279	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
280	LwK 4.8	8,96	0,380	1,08	0,65	
281	LwK 4.8	8,41	-0,170	-0,48	-0,29	
282	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
283	LwK 4.8	7,90	-0,680	-1,94	-1,16	
284	LwK 4.8	7,80	-0,780	-2,22	-1,34	
285	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
286	LwK 4.8	8,10	-0,480	-1,37	-0,82	
320	LwK 4.8	9,80	1,220	3,47	2,09	
321	LwK 4.8	9,18	0,600	1,71	1,03	
339	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
346	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
351	LwK 4.8	8,10	-0,480	-1,37	-0,82	
366	LwK 4.8	8,10	-0,480	-1,37	-0,82	
371	LwK 4.8	7,80	-0,780	-2,22	-1,34	

**4.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
20	LwK 4.4	8,40	-0,200	-0,57	-0,73	
25	LwK 4.4	8,60	0,000	0,00	0,00	
29	LwK 4.4	8,90	0,300	0,85	1,09	
45	LwK 4.4	9,77	1,170	3,32	4,25	
53	LwK 4.4	8,10	-0,500	-1,42	-1,82	
62	LwK 4.4	9,53	0,930	2,64	3,38	
66	LwK 4.4	8,40	-0,200	-0,57	-0,73	
70	LwK 4.1	8,36	-0,240	-0,68	-0,87	
71	LwK 4.4	8,40	-0,200	-0,57	-0,73	
78	LwK 4.4	9,35	0,750	2,13	2,73	
79	LwK 4.4	9,40	0,800	2,27	2,91	
81	LwK 4.4	9,40	0,800	2,27	2,91	
86	LwK 4.4	7,70	-0,900	-2,56	-3,27	

**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	8,34	-0,260	-0,74	-0,45	
203	LwK 4.8	8,46	-0,140	-0,40	-0,24	
204	LwK 4.8	8,21	-0,390	-1,11	-0,67	
206	LwK 4.8	9,82	1,220	3,47	2,09	
207	LwK 4.8	8,80	0,200	0,57	0,34	
208	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
209	LwK 4.8	8,14	-0,460	-1,31	-0,79	
210	LwK 4.8	9,00	0,400	1,14	0,68	
211	LwK 4.8	9,70	1,100	3,13	1,88	
212	LwK 4.8	7,75	-0,850	-2,42	-1,46	
213	LwK 4.8	8,25	-0,350	-0,99	-0,60	
215	LwK 4.8	8,00	-0,600	-1,71	-1,03	
216	LwK 4.8	8,39	-0,210	-0,60	-0,36	
217	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
218	LwK 4.8	8,77	0,170	0,48	0,29	
219	LwK 4.8	8,11	-0,490	-1,39	-0,84	
220	LwK 4.8	9,50	0,900	2,56	1,54	
221	LwK 4.8	7,47	-1,130	-3,21	-1,93	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	LwK 4.8	8,06	-0,540	-1,53	-0,92	
223	LwK 4.8	9,59	0,990	2,81	1,70	
224	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
225	LwK 4.8	9,00	0,400	1,14	0,68	
226	LwK 4.8	9,17	0,570	1,62	0,98	
227	LwK 4.8	8,27	-0,330	-0,94	-0,57	
228	LwK 4.8	7,80	-0,800	-2,27	-1,37	
229	LwK 4.8	8,97	0,370	1,05	0,63	
230	LwK 4.8	8,49	-0,110	-0,31	-0,19	
231	LwK 4.8	6,99	-1,610	-4,58	-2,76	
232	LwK 4.8	7,90	-0,700	-1,99	-1,20	
234	LwK 4.8	7,40	-1,200	-3,41	-2,05	
236	LwK 4.8	7,63	-0,970	-2,76	-1,66	
238	LwK 4.8	7,98	-0,620	-1,76	-1,06	
239	LwK 4.8	8,30	-0,300	-0,85	-0,51	
242	LwK 4.8	9,33	0,730	2,07	1,25	
243	LwK 4.8	8,30	-0,300	-0,85	-0,51	
244	LwK 4.8	8,30	-0,300	-0,85	-0,51	
245	LwK 4.8	8,90	0,300	0,85	0,51	
246	LwK 4.8	6,90	-1,700	-4,83	-2,91	
247	LwK 4.8	8,77	0,170	0,48	0,29	
248	LwK 4.8	8,20	-0,400	-1,14	-0,68	
249	LwK 4.8	8,23	-0,370	-1,05	-0,63	
250	LwK 4.8	7,69	-0,910	-2,59	-1,56	
251	LwK 4.8	9,40	0,800	2,27	1,37	
252	LwK 4.8	7,91	-0,690	-1,96	-1,18	
253	LwK 4.8	8,16	-0,440	-1,25	-0,75	
254	LwK 4.8	8,00	-0,600	-1,71	-1,03	
256	LwK 4.8	9,00	0,400	1,14	0,68	
257	LwK 4.8	8,70	0,100	0,28	0,17	
258	LwK 4.8	7,90	-0,700	-1,99	-1,20	
259	LwK 4.8	8,18	-0,420	-1,19	-0,72	
260	LwK 4.8	8,42	-0,180	-0,51	-0,31	
261	LwK 4.8	8,28	-0,320	-0,91	-0,55	
262	LwK 4.8	9,34	0,740	2,10	1,27	
263	LwK 4.8	8,50	-0,100	-0,28	-0,17	
264	LwK 4.8	9,00	0,400	1,14	0,68	
265	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
266	LwK 4.8	7,30	-1,300	-3,69	-2,23	
267	LwK 4.8	5,70	-2,900	-8,24	-4,97	
268	LwK 4.8	8,34	-0,260	-0,74	-0,45	
269	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
270	LwK 4.8	7,64	-0,960	-2,73	-1,64	
271	LwK 4.8	8,15	-0,450	-1,28	-0,77	
272	LwK 4.8	8,56	-0,040	-0,11	-0,07	
273	LwK 4.8	7,40	-1,200	-3,41	-2,05	
274	LwK 4.8	8,93	0,330	0,94	0,57	
275	LwK 4.8	8,70	0,100	0,28	0,17	
276	LwK 4.8	8,77	0,170	0,48	0,29	
277	LwK 4.8	8,00	-0,600	-1,71	-1,03	
278	LwK 4.8	8,02	-0,580	-1,65	-0,99	
279	LwK 4.8	9,00	0,400	1,14	0,68	
280	LwK 4.8	8,96	0,360	1,02	0,62	
281	LwK 4.8	8,41	-0,190	-0,54	-0,33	
282	LwK 4.8	8,60	0,000	0,00	0,00	
283	LwK 4.8	7,90	-0,700	-1,99	-1,20	
284	LwK 4.8	7,80	-0,800	-2,27	-1,37	
285	LwK 4.8	7,40	-1,200	-3,41	-2,05	
286	LwK 4.8	8,10	-0,500	-1,42	-0,86	
320	LwK 4.8	9,80	1,200	3,41	2,05	
321	LwK 4.8	9,18	0,580	1,65	0,99	
339	LwK 4.8	8,30	-0,300	-0,85	-0,51	
346	LwK 4.8	8,00	-0,600	-1,71	-1,03	
351	LwK 4.8	8,10	-0,500	-1,42	-0,86	
366	LwK 4.8	8,10	-0,500	-1,42	-0,86	
371	LwK 4.8	7,80	-0,800	-2,27	-1,37	

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

(Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	8,02	-0,560	-1,59	-0,96	
202	LwK 4.8	8,34	-0,240	-0,68	-0,41	
203	LwK 4.8	9,08	0,500	1,42	0,86	
204	LwK 4.8	7,88	-0,700	-1,99	-1,20	
205	LwK 4.8	8,13	-0,450	-1,28	-0,77	
206	LwK 4.8	9,82	1,240	3,53	2,12	
207	LwK 4.8	8,50	-0,080	-0,23	-0,14	
208	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
209	LwK 4.8	8,14	-0,440	-1,25	-0,75	
210	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
211	LwK 4.8	8,50	-0,080	-0,23	-0,14	
212	LwK 4.8	7,75	-0,830	-2,36	-1,42	
213	LwK 4.8	7,99	-0,590	-1,68	-1,01	
215	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
216	LwK 4.8	8,39	-0,190	-0,54	-0,33	
217	LwK 4.8	6,77	-1,810	-5,15	-3,10	
218	LwK 4.8	13,87	5,290	15,06	9,06	(*)
219	LwK 4.8	7,76	-0,820	-2,33	-1,40	
220	LwK 4.8	9,10	0,520	1,48	0,89	
221	LwK 4.8	8,16	-0,420	-1,20	-0,72	
222	LwK 4.8	8,70	0,120	0,34	0,21	
223	LwK 4.8	8,67	0,090	0,26	0,15	
224	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
225	LwK 4.8	8,80	0,220	0,63	0,38	
226	LwK 4.8	8,53	-0,050	-0,14	-0,09	
227	LwK 4.8	8,97	0,390	1,11	0,67	
228	LwK 4.8	8,27	-0,310	-0,88	-0,53	
229	LwK 4.8	8,47	-0,110	-0,31	-0,19	
230	LwK 4.8	8,22	-0,360	-1,03	-0,62	
231	LwK 4.8	8,51	-0,070	-0,20	-0,12	
232	LwK 4.8	7,80	-0,780	-2,22	-1,34	
234	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
236	LwK 4.8	8,95	0,370	1,05	0,63	
238	LwK 4.8	8,63	0,050	0,14	0,09	
239	LwK 4.8	9,70	1,120	3,19	1,92	
242	LwK 4.8	8,12	-0,460	-1,31	-0,79	
243	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
244	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
245	LwK 4.8	8,98	0,400	1,14	0,68	
246	LwK 4.8	8,70	0,120	0,34	0,21	
247	LwK 4.8	9,50	0,920	2,62	1,58	
248	LwK 4.8	8,20	-0,380	-1,08	-0,65	
249	LwK 4.8	9,52	0,940	2,68	1,61	
251	LwK 4.8	9,40	0,820	2,33	1,40	
252	LwK 4.8	8,78	0,200	0,57	0,34	
253	LwK 4.8	8,16	-0,420	-1,20	-0,72	
254	LwK 4.8	8,85	0,270	0,77	0,46	
256	LwK 4.8	8,20	-0,380	-1,08	-0,65	
257	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
258	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
259	LwK 4.8	8,29	-0,290	-0,83	-0,50	
260	LwK 4.8	8,61	0,030	0,09	0,05	
261	LwK 4.8	8,33	-0,250	-0,71	-0,43	
262	LwK 4.8	7,96	-0,620	-1,77	-1,06	
263	LwK 4.8	8,30	-0,280	-0,80	-0,48	
264	LwK 4.8	8,90	0,320	0,91	0,55	
265	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	
266	LwK 4.8	8,80	0,220	0,63	0,38	
267	LwK 4.8	8,18	-0,400	-1,14	-0,68	
268	LwK 4.8	7,85	-0,730	-2,08	-1,25	
269	LwK 4.8	7,20	-1,380	-3,93	-2,36	
270	LwK 4.8	7,95	-0,630	-1,79	-1,08	
271	LwK 4.8	8,60	0,020	0,06	0,03	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der enzymatisch oder mit HPLC bestimmten Werte ab.

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

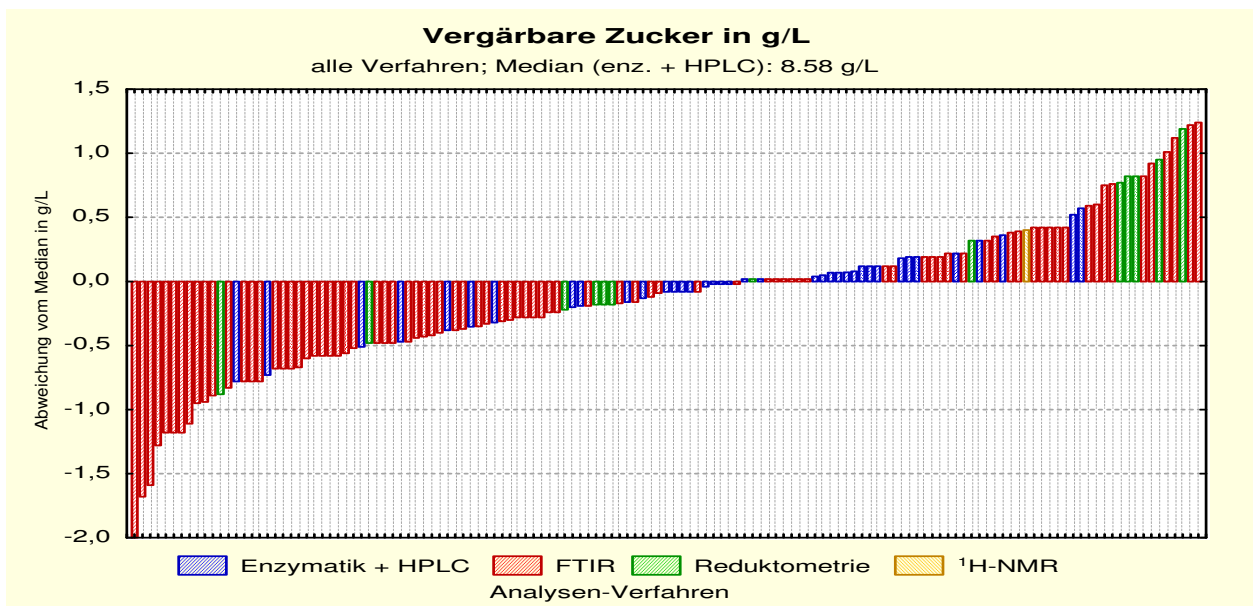
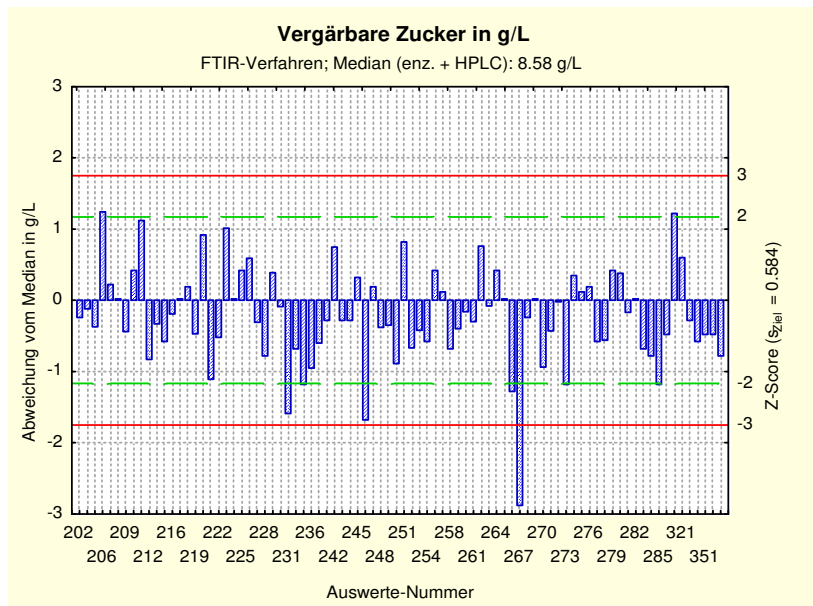
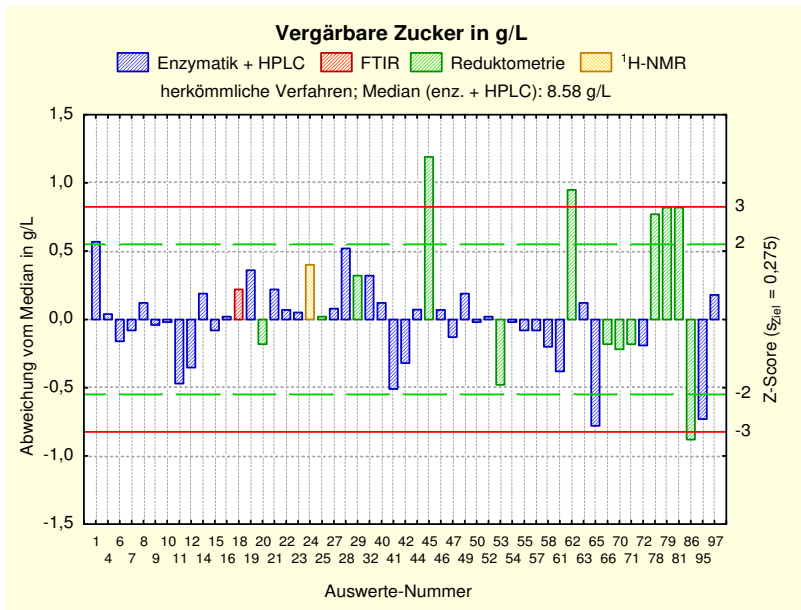
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
274	LwK 4.8	7,30	-1,280	-3,64	-2,19	
275	LwK 4.8	8,00	-0,580	-1,65	-0,99	
276	LwK 4.8	8,81	0,230	0,65	0,39	
277	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
279	LwK 4.8	9,50	0,920	2,62	1,58	
281	LwK 4.8	8,62	0,040	0,11	0,07	
282	LwK 4.8	7,90	-0,680	-1,94	-1,16	
283	LwK 4.8	8,72	0,140	0,40	0,24	
284	LwK 4.8	7,80	-0,780	-2,22	-1,34	
285	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
286	LwK 4.8	8,08	-0,500	-1,42	-0,86	
313	LwK 4.8	6,92	-1,660	-4,73	-2,84	
320	LwK 4.8	9,00	0,420	1,20	0,72	
321	LwK 4.8	7,96	-0,620	-1,77	-1,06	
339	LwK 4.8	8,80	0,220	0,63	0,38	
345	LwK 4.8	8,87	0,290	0,83	0,50	
346	LwK 4.8	7,40	-1,180	-3,36	-2,02	
351	LwK 4.8	9,60	1,020	2,90	1,75	
366	LwK 4.8	8,50	-0,080	-0,23	-0,14	
371	LwK 4.8	8,15	-0,430	-1,22	-0,74	

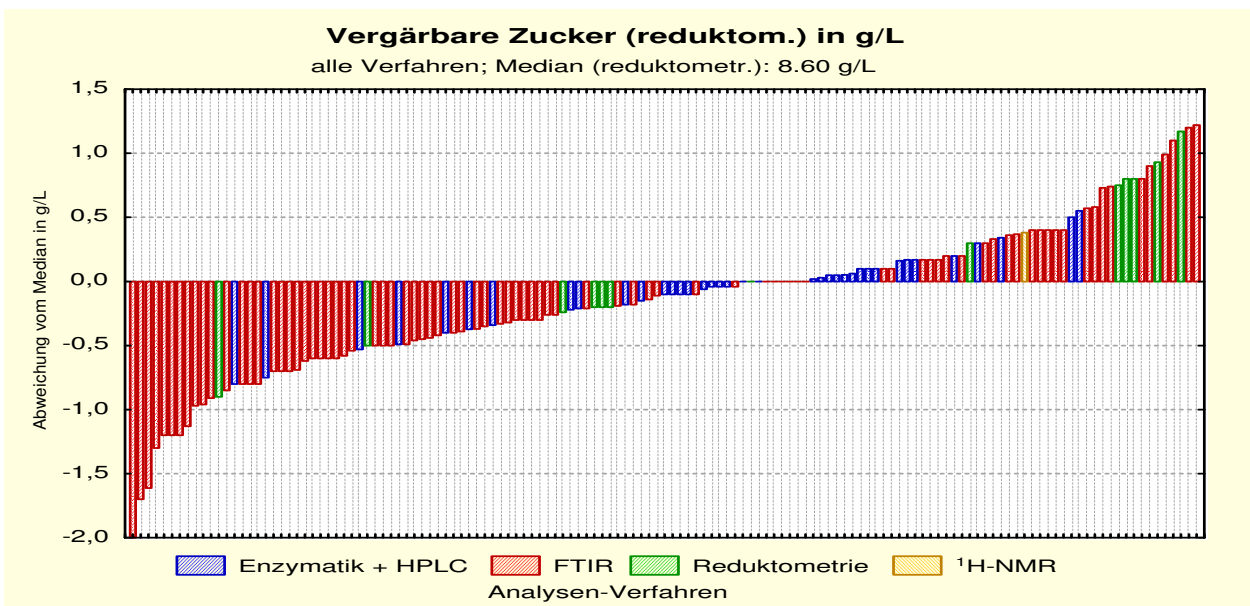
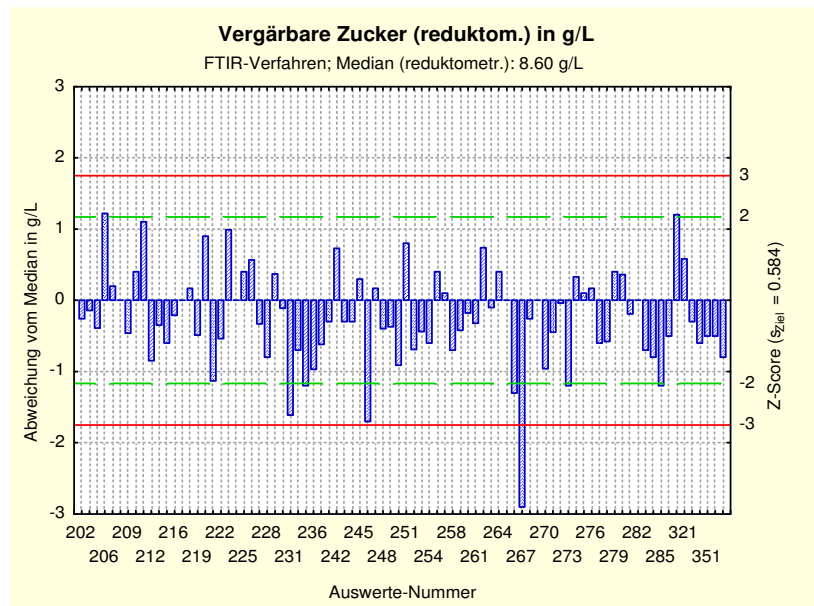
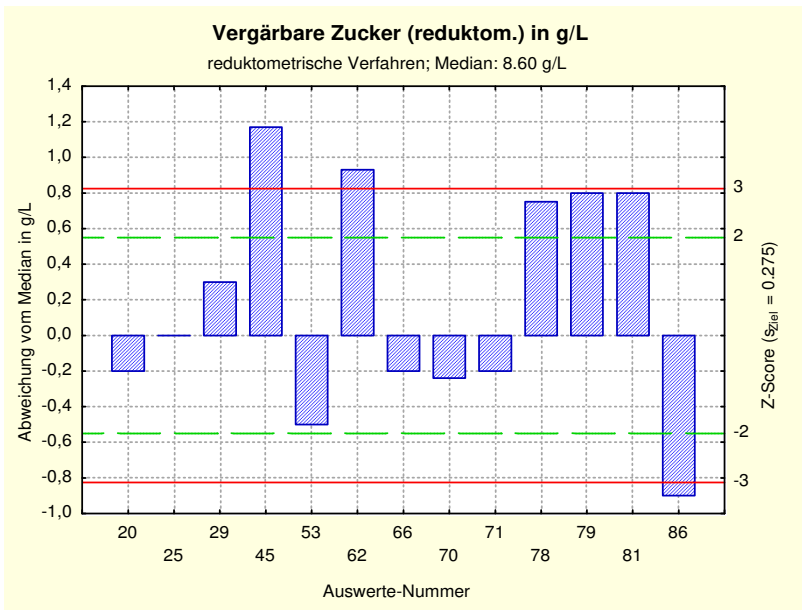
**4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten	reduktometrisch alle Daten
Gültige Werte	38	13
Minimalwert	7,80	7,70
Mittelwert	8,546	8,793
Median	8,580	8,600
Maximalwert	9,15	9,77
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,292	0,640
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,047	0,178
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,351	0,352
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,275	0,275
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,584	0,584
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,83	1,82
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,06	2,33
Quotient ( $s_L/\bar{U}\ FTIR$ )	0,50	1,10
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,13	0,50
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,17	0,65
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,08	0,30

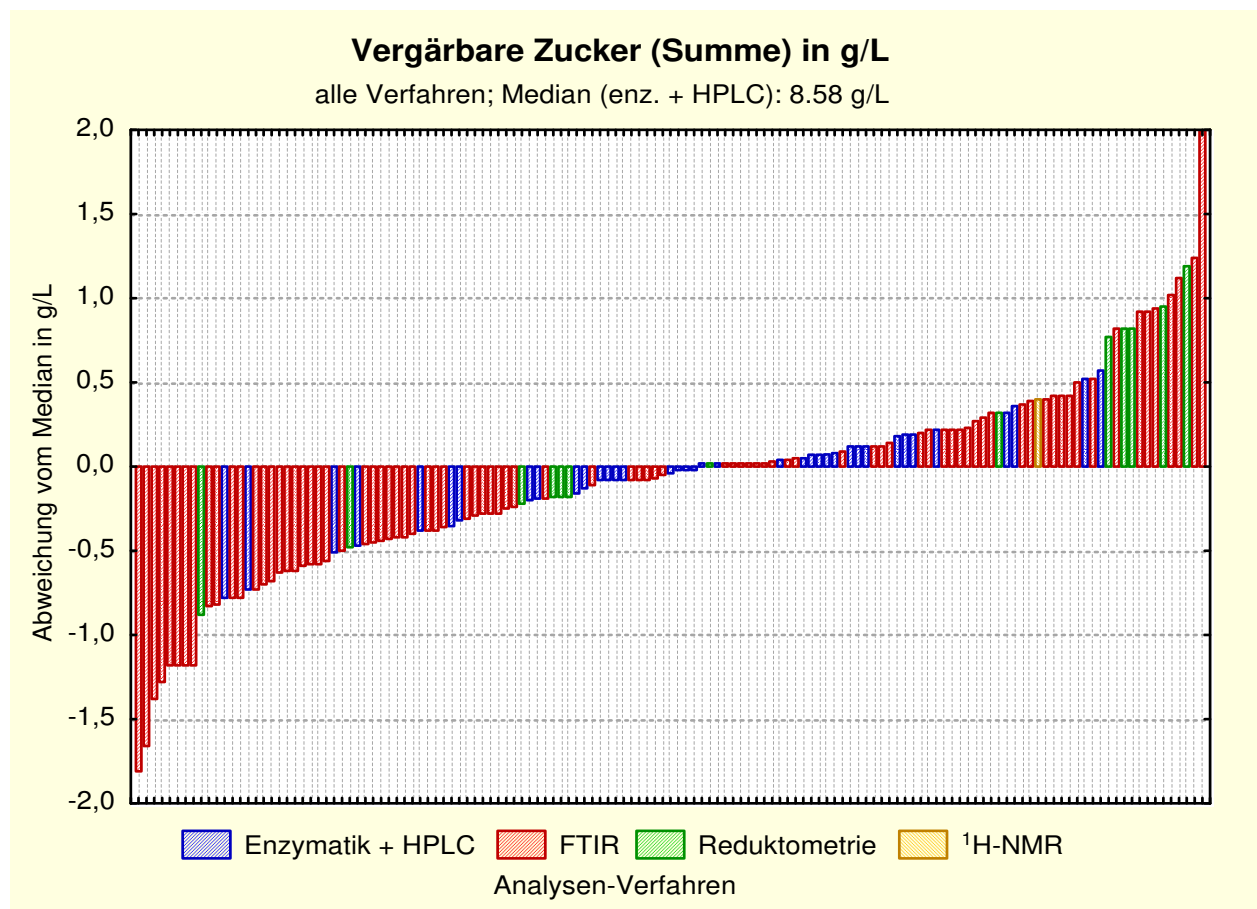
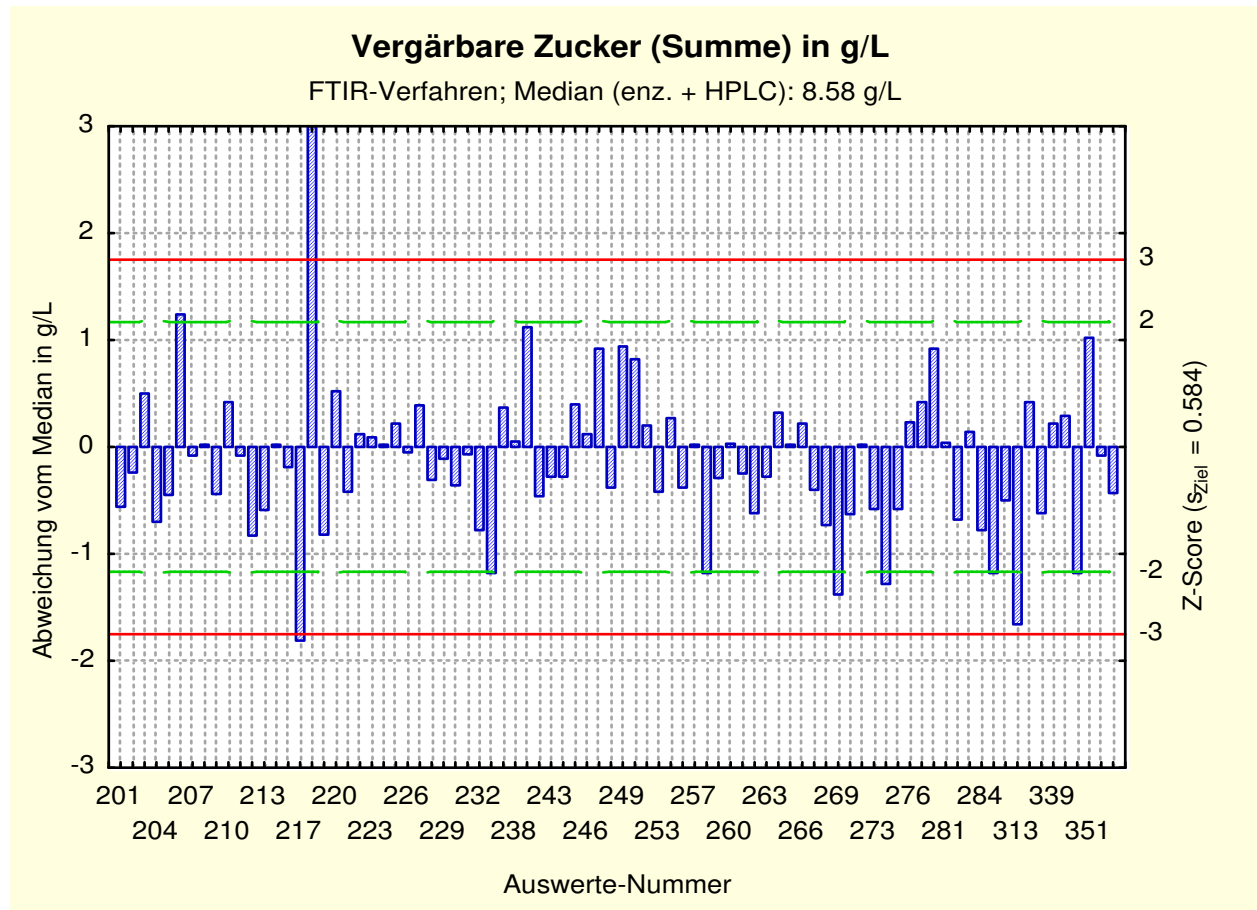
**4.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren- Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	8,360	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	12	8,831	0,739
	reduktometrische Verfahren	13	8,790	0,715
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	25	8,509	0,233
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	8,665	0,214
	enzymatische und HPLC-Verfahren	38	8,559	0,253
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	85	8,368	0,620
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	85	8,429	0,574
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	8,980	









## 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	4,13	0,320	1,82	2,20	
02	enzymat. Hand	3,76	-0,050	-0,28	-0,34	
04	HPLC	3,67	-0,140	-0,79	-0,96	
05	enzymat., autom.	3,97	0,160	0,91	1,10	
06	enzymat., autom.	3,76	-0,050	-0,28	-0,34	
07	enzymat. Hand	3,80	-0,010	-0,06	-0,07	
08	enzymat. Hand	3,90	0,090	0,51	0,62	
09	HPLC	3,86	0,050	0,28	0,34	
10	enzymat. Hand	3,85	0,040	0,23	0,27	
11	enzymat., autom.	3,55	-0,260	-1,48	-1,78	
12	enzymat., autom.	3,70	-0,107	-0,61	-0,74	
14	HPLC	3,76	-0,052	-0,30	-0,36	
15	enzymat., autom.	3,74	-0,070	-0,40	-0,48	
16	enzymat., autom.	3,90	0,090	0,51	0,62	
19	HPLC	3,88	0,070	0,40	0,48	
21	HPLC	3,79	-0,020	-0,11	-0,14	
22	enzymat., autom.	3,82	0,010	0,06	0,07	
23	HPLC	3,76	-0,050	-0,28	-0,34	
24	NMR	4,10	0,290	1,65	1,99	
27	enzymat., autom.	3,97	0,160	0,91	1,10	
28	HPLC	3,95	0,140	0,79	0,96	
32	enzymat., autom.	3,70	-0,110	-0,62	-0,75	
40	enzymat., autom.	3,90	0,090	0,51	0,62	
41	HPLC	3,55	-0,260	-1,48	-1,78	
44	HPLC	3,74	-0,074	-0,42	-0,51	
46	enzymat., autom.	3,87	0,060	0,34	0,41	
47	enzymat., autom.	3,85	0,040	0,23	0,27	
49	enzymat., autom.	3,92	0,110	0,62	0,75	
50	enzymat., autom.	4,02	0,210	1,19	1,44	
52	HPLC	3,66	-0,150	-0,85	-1,03	
54	enzymat., autom.	3,88	0,070	0,40	0,48	
55	enzymat., autom.	3,81	0,000	0,00	0,00	
57	enzymat., autom.	3,80	-0,010	-0,06	-0,07	
58	enzymat., autom.	3,82	0,008	0,05	0,05	
61	HPLC	3,60	-0,210	-1,19	-1,44	
63	HPLC	3,75	-0,059	-0,33	-0,40	
65	enzymat., autom.	3,80	-0,010	-0,06	-0,07	
66	enzymat. Hand	3,84	0,030	0,17	0,21	
70	enzymat., autom.	3,94	0,130	0,74	0,89	
72	enzymat., autom.	3,75	-0,060	-0,34	-0,41	
79	enzymat. Hand	3,87	0,060	0,34	0,41	
95	enzymat., autom.	3,43	-0,380	-2,16	-2,61	
97	HPLC	4,00	0,190	1,08	1,30	
99	enzymat., autom.	3,80	-0,010	-0,06	-0,07	

### 4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,56	-0,250	-1,42	-0,61	
202	FTIR	3,57	-0,240	-1,36	-0,59	
203	FTIR	3,88	0,070	0,40	0,17	
204	FTIR	3,39	-0,420	-2,38	-1,03	
205	FTIR	3,91	0,100	0,57	0,25	
206	FTIR	4,20	0,390	2,21	0,96	
207	FTIR	4,00	0,190	1,08	0,47	
208	FTIR	4,00	0,190	1,08	0,47	
209	FTIR	3,48	-0,330	-1,87	-0,81	
210	FTIR	3,59	-0,220	-1,25	-0,54	
211	FTIR	3,50	-0,310	-1,76	-0,76	
212	FTIR	3,60	-0,210	-1,19	-0,51	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
213	FTIR	3,51	-0,300	-1,70	-0,74	
215	FTIR	3,90	0,090	0,51	0,22	
216	FTIR	3,39	-0,420	-2,38	-1,03	
217	FTIR	3,00	-0,810	-4,60	-1,99	
218	FTIR	4,16	0,350	1,99	0,86	
219	FTIR	2,92	-0,890	-5,05	-2,18	
220	FTIR	4,10	0,290	1,65	0,71	
221	FTIR	3,76	-0,050	-0,28	-0,12	
222	FTIR	3,22	-0,590	-3,35	-1,45	
223	FTIR	4,49	0,680	3,86	1,67	
224	FTIR	3,70	-0,110	-0,62	-0,27	
225	FTIR	3,70	-0,110	-0,62	-0,27	
226	FTIR	3,56	-0,250	-1,42	-0,61	
227	FTIR	3,69	-0,120	-0,68	-0,29	
228	FTIR	3,51	-0,300	-1,70	-0,74	
229	FTIR	3,91	0,100	0,57	0,25	
230	FTIR	3,95	0,140	0,79	0,34	
231	FTIR	2,31	-1,500	-8,51	-3,68	
232	FTIR	3,00	-0,810	-4,60	-1,99	
234	FTIR	3,17	-0,640	-3,63	-1,57	
236	FTIR	3,81	0,000	0,00	0,00	
238	FTIR	4,03	0,220	1,25	0,54	
239	FTIR	5,50	1,690	9,59	4,14	
242	FTIR	3,19	-0,620	-3,52	-1,52	
243	FTIR	3,90	0,090	0,51	0,22	
244	FTIR	3,20	-0,610	-3,46	-1,50	
245	FTIR	4,01	0,200	1,13	0,49	
246	FTIR	3,40	-0,410	-2,33	-1,00	
247	FTIR	4,31	0,500	2,84	1,23	
248	FTIR	3,00	-0,810	-4,60	-1,99	
249	FTIR	3,98	0,170	0,96	0,42	
251	FTIR	4,10	0,290	1,65	0,71	
252	FTIR	4,03	0,220	1,25	0,54	
253	FTIR	3,20	-0,610	-3,46	-1,50	
254	FTIR	3,84	0,030	0,17	0,07	
256	FTIR	3,50	-0,310	-1,76	-0,76	
257	FTIR	4,10	0,290	1,65	0,71	
258	FTIR	3,10	-0,710	-4,03	-1,74	
259	FTIR	3,34	-0,470	-2,67	-1,15	
260	FTIR	3,60	-0,210	-1,19	-0,51	
261	FTIR	3,58	-0,230	-1,31	-0,56	
262	FTIR	3,82	0,010	0,06	0,02	
263	FTIR	3,50	-0,310	-1,76	-0,76	
264	FTIR	4,60	0,790	4,48	1,94	
265	FTIR	3,70	-0,110	-0,62	-0,27	
266	FTIR	3,50	-0,310	-1,76	-0,76	
267	FTIR	3,66	-0,150	-0,85	-0,37	
268	FTIR	3,18	-0,630	-3,58	-1,54	
269	FTIR	3,10	-0,710	-4,03	-1,74	
270	FTIR	3,21	-0,600	-3,40	-1,47	
271	FTIR	3,45	-0,360	-2,04	-0,88	
273	FTIR	4,00	0,190	1,08	0,47	
274	FTIR	3,13	-0,680	-3,86	-1,67	
275	FTIR	2,70	-1,110	-6,30	-2,72	
276	FTIR	3,79	-0,020	-0,11	-0,05	
277	FTIR	3,70	-0,110	-0,62	-0,27	
279	FTIR	4,40	0,590	3,35	1,45	
281	FTIR	3,13	-0,680	-3,86	-1,67	
282	FTIR	3,40	-0,410	-2,33	-1,00	
283	FTIR	3,32	-0,490	-2,78	-1,20	
284	FTIR	3,05	-0,760	-4,31	-1,86	
285	FTIR	3,20	-0,610	-3,46	-1,50	
286	FTIR	3,84	0,030	0,17	0,07	
313	FTIR	2,33	-1,480	-8,40	-3,63	
320	FTIR	4,20	0,390	2,21	0,96	
321	FTIR	3,08	-0,730	-4,14	-1,79	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

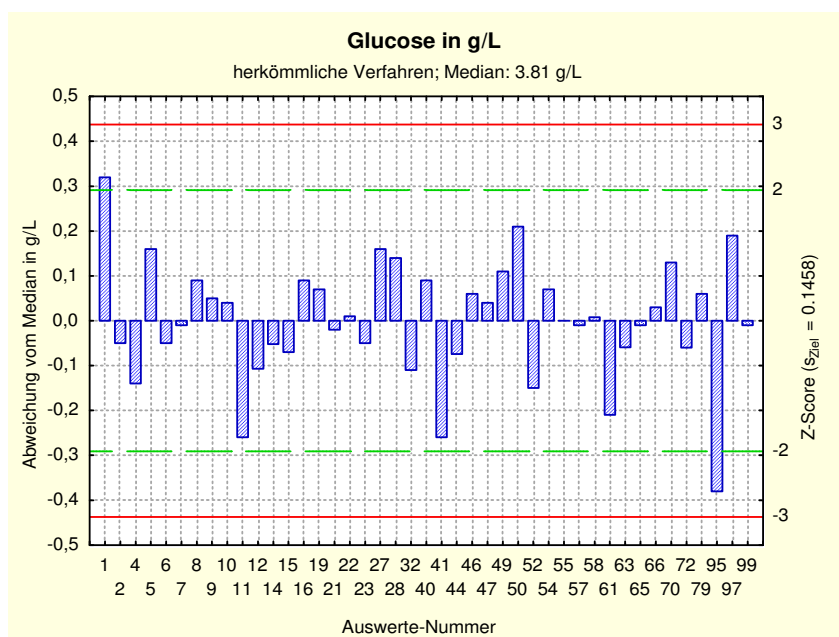
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
339	FTIR	3,40	-0,410	-2,33	-1,00	
345	FTIR	4,01	0,200	1,13	0,49	
346	FTIR	2,80	-1,010	-5,73	-2,48	
351	FTIR	4,30	0,490	2,78	1,20	
366	FTIR	3,00	-0,810	-4,60	-1,99	
371	FTIR	3,30	-0,510	-2,89	-1,25	

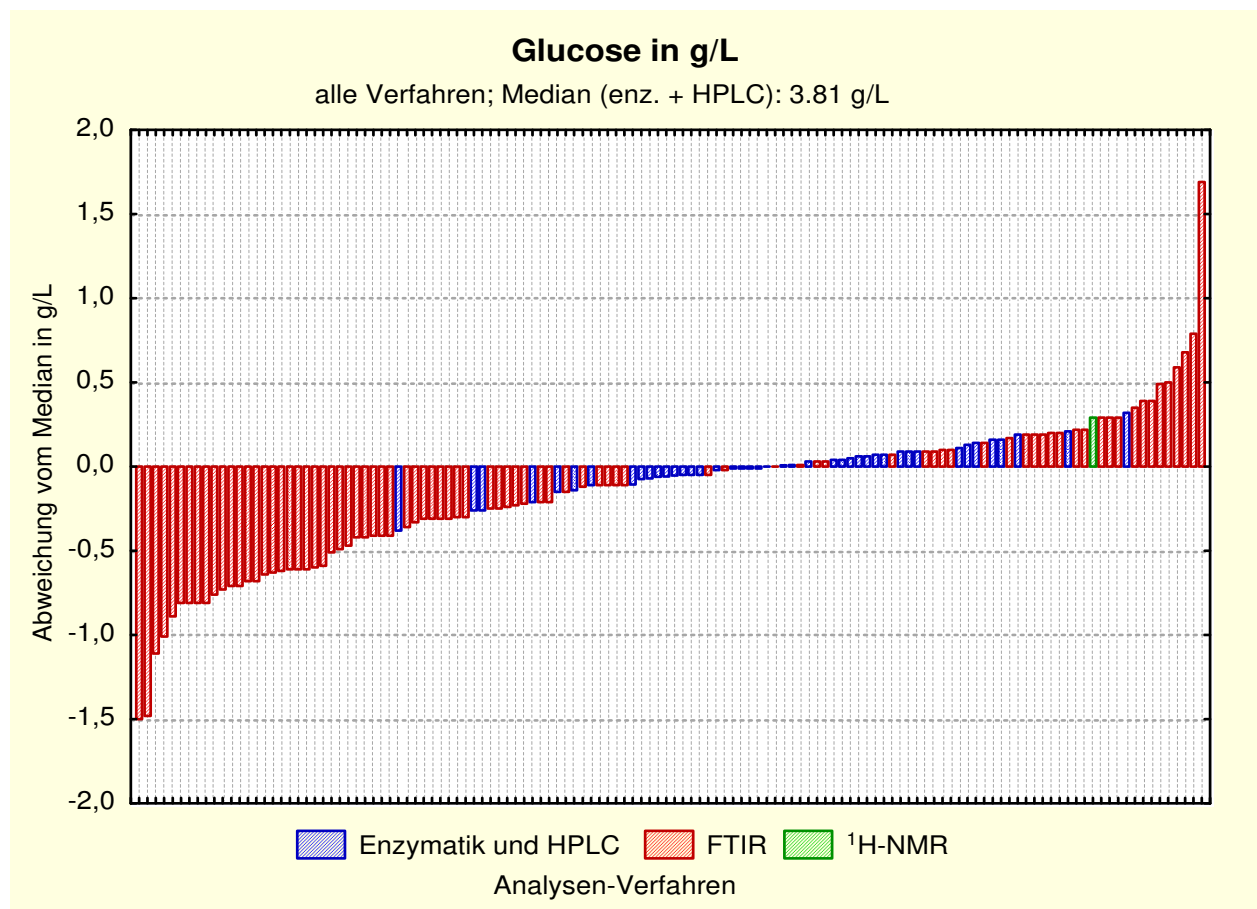
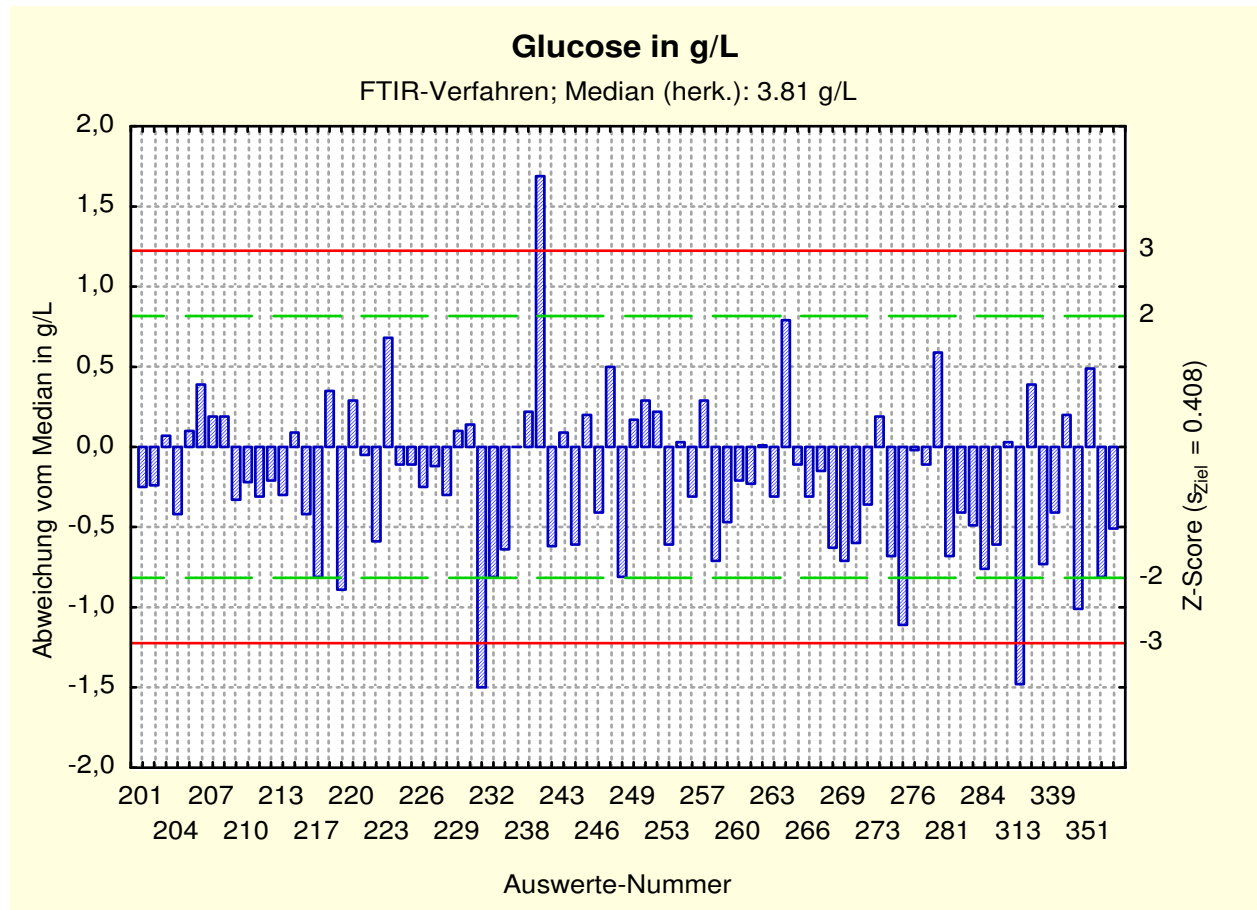
**4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	43
Minimalwert	3,43
Mittelwert	3,810
Median	3,810
Maximalwert	4,13
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,133
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,020
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,176
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,146
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,408
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,76
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,92
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,33
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,05

**4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	3,765	0,146
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	3,827	0,112
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	7	3,856	0,078
	herkömmliche Verfahren	43	3,815	0,118
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	3,592	0,469
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	4,100	





## 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	5,02	0,295	1,39	1,73	
02	enzymat. Hand	4,66	-0,065	-0,31	-0,38	
04	HPLC	4,95	0,225	1,06	1,32	
05	enzymat., autom.	4,73	0,005	0,02	0,03	
06	enzymat., autom.	4,66	-0,065	-0,31	-0,38	
07	enzymat. Hand	4,50	-0,225	-1,06	-1,32	
08	enzymat. Hand	4,80	0,075	0,35	0,44	
09	HPLC	4,68	-0,045	-0,21	-0,26	
10	enzymat. Hand	4,71	-0,015	-0,07	-0,09	
11	enzymat., autom.	4,56	-0,165	-0,78	-0,97	
12	enzymat., autom.	4,52	-0,201	-0,95	-1,18	
14	HPLC	5,01	0,283	1,34	1,66	
15	enzymat., autom.	4,80	0,075	0,35	0,44	
16	enzymat., autom.	4,70	-0,025	-0,12	-0,15	
19	HPLC	5,06	0,335	1,58	1,97	
21	HPLC	5,01	0,285	1,35	1,67	
22	enzymat., autom.	4,83	0,105	0,50	0,62	
23	HPLC	4,87	0,145	0,69	0,85	
24	NMR	4,88	0,155	0,73	0,91	
27	enzymat., autom.	4,69	-0,035	-0,17	-0,21	
28	HPLC	4,75	0,025	0,12	0,15	
32	enzymat., autom.	5,20	0,475	2,25	2,79	
40	enzymat., autom.	4,80	0,075	0,35	0,44	
41	HPLC	4,52	-0,205	-0,97	-1,20	
44	HPLC	4,92	0,191	0,90	1,12	
46	enzymat., autom.	4,78	0,055	0,26	0,32	
47	enzymat., autom.	4,60	-0,125	-0,59	-0,73	
49	enzymat., autom.	4,85	0,125	0,59	0,73	
50	enzymat., autom.	4,54	-0,185	-0,87	-1,09	
52	HPLC	4,94	0,215	1,02	1,26	
54	enzymat., autom.	4,68	-0,045	-0,21	-0,26	
55	enzymat., autom.	4,72	-0,005	-0,02	-0,03	
57	enzymat., autom.	4,60	-0,125	-0,59	-0,73	
58	enzymat., autom.	4,56	-0,165	-0,78	-0,97	
61	HPLC	4,60	-0,125	-0,59	-0,73	
63	HPLC	4,93	0,206	0,97	1,21	
65	enzymat., autom.	5,00	0,275	1,30	1,61	
66	enzymat. Hand	4,71	-0,015	-0,07	-0,09	
70	enzymat., autom.	4,90	0,175	0,83	1,03	
72	enzymat., autom.	4,64	-0,085	-0,40	-0,50	
79	enzymat. Hand	4,52	-0,205	-0,97	-1,20	
95	enzymat., autom.	4,42	-0,305	-1,44	-1,79	
97	HPLC	4,76	0,035	0,17	0,21	

### 4.6.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,46	-0,265	-1,25	-0,80	
202	FTIR	4,77	0,045	0,21	0,14	
203	FTIR	5,20	0,475	2,25	1,44	
204	FTIR	4,49	-0,235	-1,11	-0,71	
205	FTIR	4,22	-0,505	-2,39	-1,53	
206	FTIR	5,62	0,895	4,23	2,71	
207	FTIR	4,50	-0,225	-1,06	-0,68	
208	FTIR	4,60	-0,125	-0,59	-0,38	
209	FTIR	4,66	-0,065	-0,31	-0,20	
210	FTIR	5,41	0,685	3,24	2,08	
211	FTIR	5,00	0,275	1,30	0,83	
212	FTIR	4,15	-0,575	-2,72	-1,74	
213	FTIR	4,48	-0,245	-1,16	-0,74	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
215	FTIR	4,70	-0,025	-0,12	-0,08	
216	FTIR	5,00	0,275	1,30	0,83	
217	FTIR	3,77	-0,955	-4,51	-2,89	
218	FTIR	9,71	4,985	23,56	15,11	(*)
219	FTIR	4,84	0,115	0,54	0,35	
220	FTIR	5,00	0,275	1,30	0,83	
221	FTIR	4,40	-0,325	-1,54	-0,98	
222	FTIR	5,48	0,755	3,57	2,29	
223	FTIR	4,18	-0,545	-2,58	-1,65	
224	FTIR	4,90	0,175	0,83	0,53	
225	FTIR	5,10	0,375	1,77	1,14	
226	FTIR	4,97	0,245	1,16	0,74	
227	FTIR	5,28	0,555	2,62	1,68	
228	FTIR	4,76	0,035	0,17	0,11	
229	FTIR	4,56	-0,165	-0,78	-0,50	
230	FTIR	4,27	-0,455	-2,15	-1,38	
231	FTIR	6,20	1,475	6,97	4,47	
232	FTIR	4,80	0,075	0,35	0,23	
234	FTIR	4,23	-0,495	-2,34	-1,50	
236	FTIR	5,14	0,415	1,96	1,26	
238	FTIR	4,60	-0,125	-0,59	-0,38	
239	FTIR	4,20	-0,525	-2,48	-1,59	
242	FTIR	4,93	0,205	0,97	0,62	
243	FTIR	4,40	-0,325	-1,54	-0,98	
244	FTIR	5,10	0,375	1,77	1,14	
245	FTIR	4,97	0,245	1,16	0,74	
246	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
247	FTIR	5,19	0,465	2,20	1,41	
248	FTIR	5,20	0,475	2,25	1,44	
249	FTIR	5,54	0,815	3,85	2,47	
251	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
252	FTIR	4,75	0,025	0,12	0,08	
253	FTIR	4,96	0,235	1,11	0,71	
254	FTIR	5,01	0,285	1,35	0,86	
256	FTIR	4,70	-0,025	-0,12	-0,08	
257	FTIR	4,50	-0,225	-1,06	-0,68	
258	FTIR	4,30	-0,425	-2,01	-1,29	
259	FTIR	4,95	0,225	1,06	0,68	
260	FTIR	5,01	0,285	1,35	0,86	
261	FTIR	4,75	0,025	0,12	0,08	
262	FTIR	4,14	-0,585	-2,76	-1,77	
263	FTIR	4,80	0,075	0,35	0,23	
264	FTIR	4,30	-0,425	-2,01	-1,29	
265	FTIR	4,90	0,175	0,83	0,53	
266	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
267	FTIR	4,52	-0,205	-0,97	-0,62	
268	FTIR	4,67	-0,055	-0,26	-0,17	
269	FTIR	4,10	-0,625	-2,95	-1,89	
270	FTIR	4,74	0,015	0,07	0,05	
271	FTIR	5,15	0,425	2,01	1,29	
273	FTIR	4,00	-0,725	-3,43	-2,20	
274	FTIR	4,17	-0,555	-2,62	-1,68	
275	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
276	FTIR	5,02	0,295	1,39	0,89	
277	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
279	FTIR	5,10	0,375	1,77	1,14	
281	FTIR	5,49	0,765	3,62	2,32	
282	FTIR	4,50	-0,225	-1,06	-0,68	
283	FTIR	5,40	0,675	3,19	2,05	
284	FTIR	4,75	0,025	0,12	0,08	
285	FTIR	4,20	-0,525	-2,48	-1,59	
286	FTIR	4,24	-0,485	-2,29	-1,47	
313	FTIR	4,59	-0,135	-0,64	-0,41	
320	FTIR	4,80	0,075	0,35	0,23	
321	FTIR	4,88	0,155	0,73	0,47	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

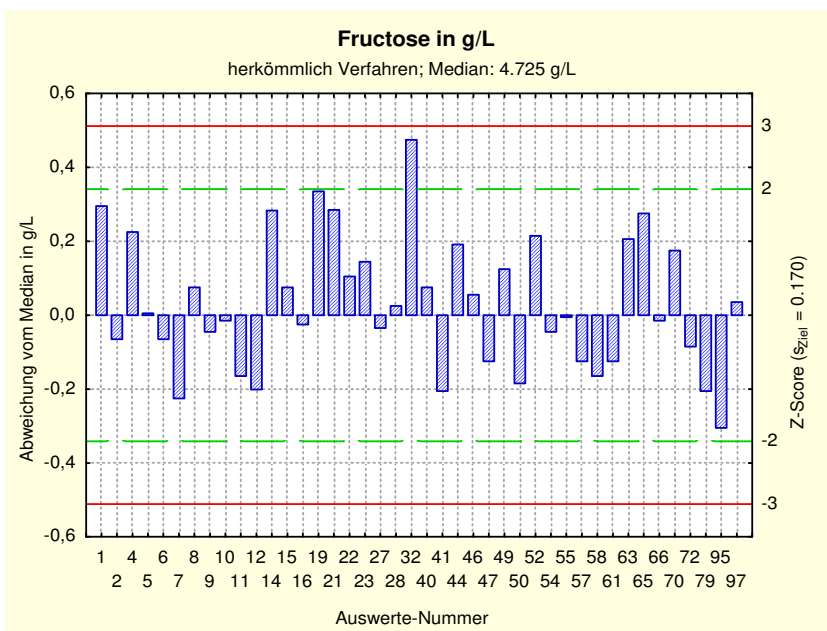
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
339	FTIR	5,40	0,675	3,19	2,05	
345	FTIR	4,86	0,135	0,64	0,41	
346	FTIR	4,60	-0,125	-0,59	-0,38	
351	FTIR	5,30	0,575	2,72	1,74	
366	FTIR	5,50	0,775	3,66	2,35	
371	FTIR	4,85	0,125	0,59	0,38	

**4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

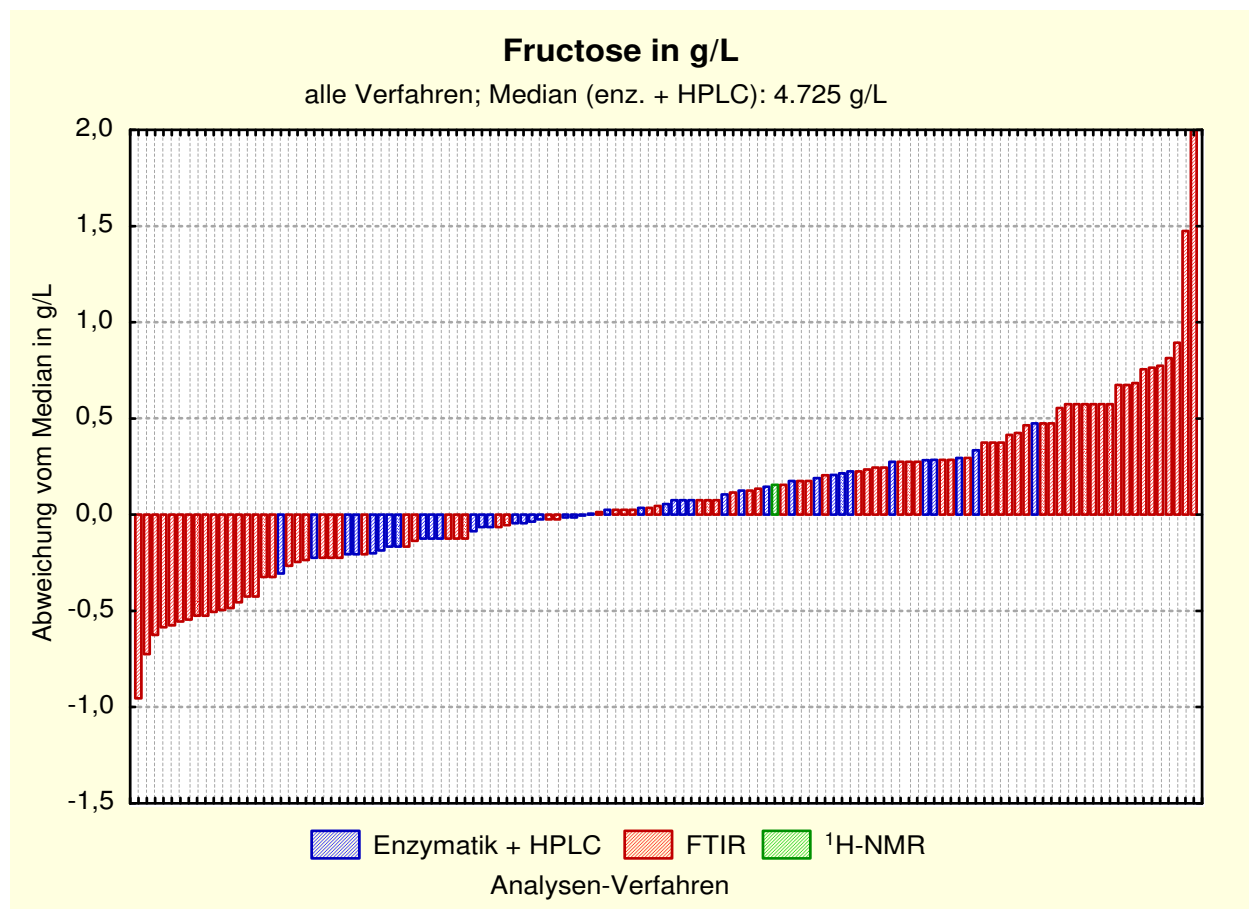
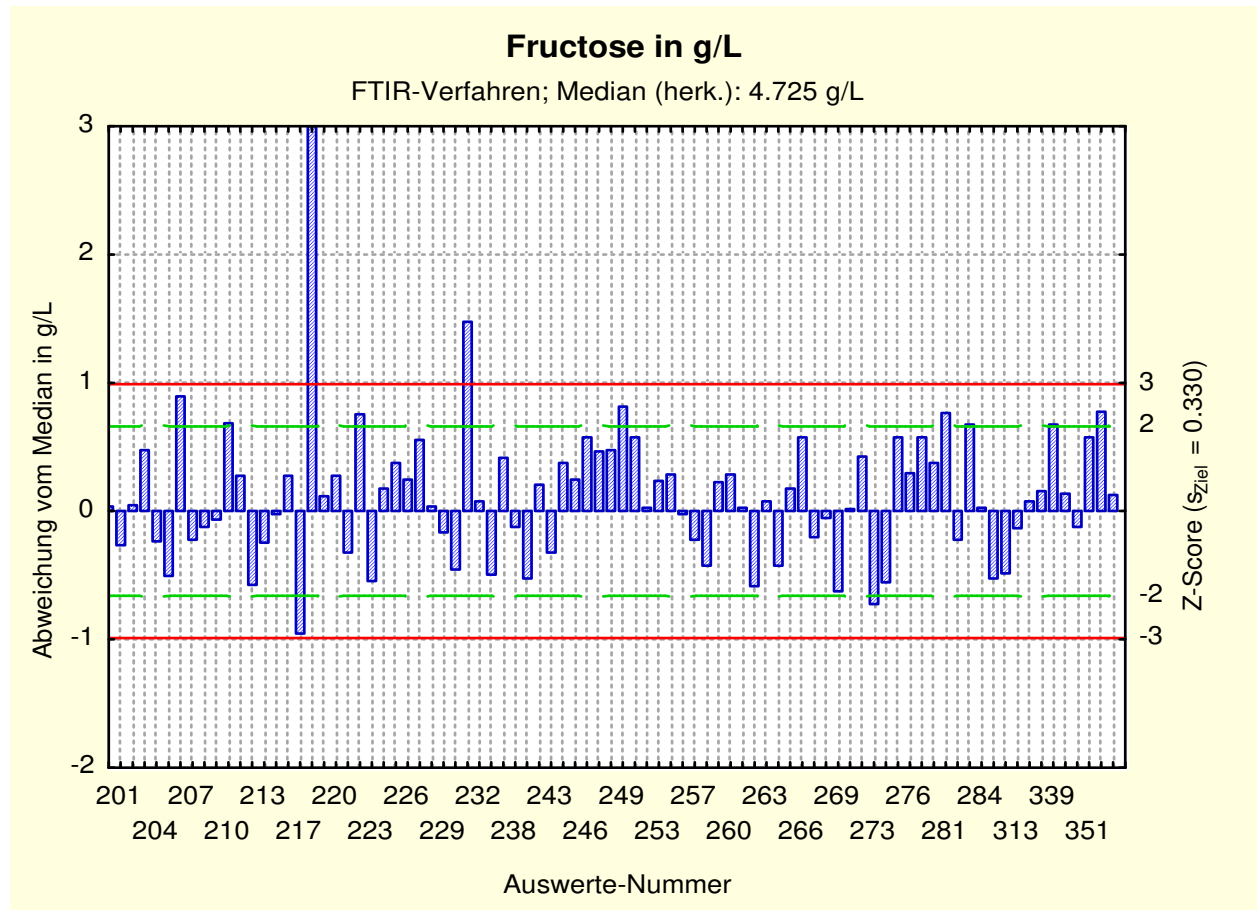
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	42
Minimalwert	4,42
Mittelwert	4,755
Median	4,725
Maximalwert	5,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,180
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,028
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,212
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,170
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,330
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,85
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,05
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,54
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,13
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,16
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,08

**4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	4,853	0,177
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	22	4,705	0,155
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	7	4,697	0,180
	herkömmliche Verfahren	42	4,751	0,190
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	4,820	0,475
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	4,880	







## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,61	0,50	2,21	
02	enzymat. Hand	5,03	-0,08	-0,35	
03	enzymat. Hand	5,14	0,03	0,13	
04	HPLC	5,15	0,04	0,18	
05	enzymat. autom.	5,10	-0,01	-0,04	
06	enzymat. autom.	5,18	0,07	0,31	
07	enzymat. Hand	4,90	-0,21	-0,93	
08	enzymat. Hand	5,05	-0,06	-0,27	
09	HPLC	5,23	0,12	0,53	
11	enzymat. autom.	5,00	-0,11	-0,49	
12	enzymat. autom.	6,08	0,97	4,30	
14	HPLC	5,15	0,04	0,17	
21	HPLC	5,04	-0,07	-0,31	
22	HPLC	5,14	0,03	0,13	
23	HPLC	5,02	-0,09	-0,40	
24	NMR	5,54	0,43	1,90	
27	HPLC	5,17	0,06	0,25	
28	HPLC	5,72	0,61	2,70	
41	HPLC	5,18	0,07	0,31	
44	HPLC	5,10	-0,01	-0,04	
47	enzymat. autom.	5,10	-0,01	-0,04	
52	HPLC	5,07	-0,04	-0,18	
61	HPLC	4,43	-0,68	-2,99	
63	HPLC	5,14	0,03	0,15	
70	enzymat. Hand	5,11	0,00	0,00	
79	enzymat. Hand	5,02	-0,09	-0,40	

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

### 4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,28	0,17	0,75	0,49	
202	FTIR	4,61	-0,50	-2,21	-1,44	
203	FTIR	5,14	0,03	0,13	0,09	
204	FTIR	5,54	0,43	1,90	1,24	
206	FTIR	5,30	0,19	0,84	0,55	
207	FTIR	5,20	0,09	0,40	0,26	
208	FTIR	5,10	-0,01	-0,04	-0,03	
209	FTIR	5,37	0,26	1,15	0,75	
210	FTIR	5,19	0,08	0,35	0,23	
211	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
213	FTIR	5,69	0,58	2,56	1,67	
215	FTIR	4,90	-0,21	-0,93	-0,60	
216	FTIR	5,36	0,25	1,11	0,72	
217	FTIR	5,70	0,59	2,61	1,70	
218	FTIR	3,93	-1,18	-5,22	-3,39	
219	FTIR	4,77	-0,34	-1,50	-0,98	
221	FTIR	5,02	-0,09	-0,40	-0,26	
222	FTIR	5,42	0,31	1,37	0,89	
223	FTIR	5,29	0,18	0,80	0,52	
224	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
225	FTIR	4,70	-0,41	-1,81	-1,18	
226	FTIR	5,20	0,09	0,40	0,26	
227	FTIR	4,59	-0,52	-2,30	-1,49	
228	FTIR	5,02	-0,09	-0,40	-0,26	
229	FTIR	5,30	0,19	0,84	0,55	
230	FTIR	4,81	-0,30	-1,33	-0,86	
231	FTIR	6,31	1,20	5,31	3,45	
232	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
234	FTIR	4,13	-0,98	-4,33	-2,82	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

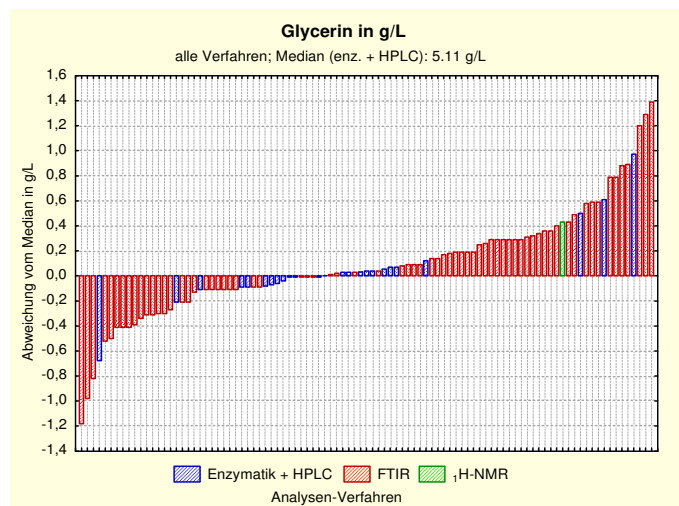
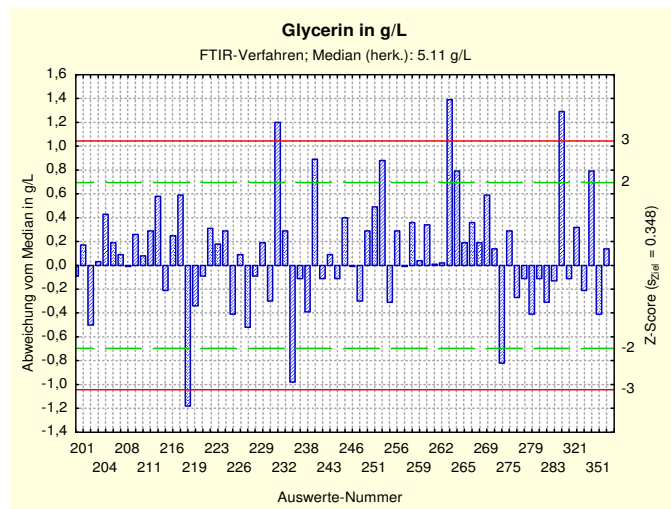
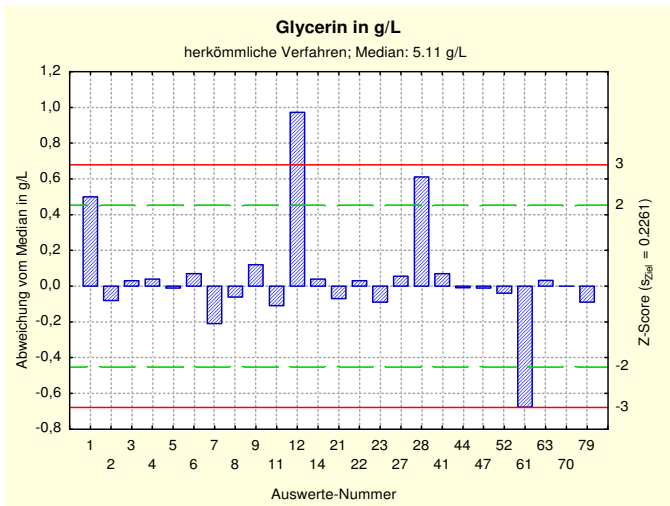
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
236	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
238	FTIR	4,72	-0,39	-1,72	-1,12	
239	FTIR	6,00	0,89	3,94	2,56	
242	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
243	FTIR	5,20	0,09	0,40	0,26	
244	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
245	FTIR	5,51	0,40	1,77	1,15	
246	FTIR	5,10	-0,01	-0,04	-0,03	
247	FTIR	4,81	-0,30	-1,33	-0,86	
248	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
251	FTIR	5,60	0,49	2,17	1,41	
252	FTIR	5,99	0,88	3,89	2,53	
254	FTIR	4,80	-0,31	-1,37	-0,89	
256	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
257	FTIR	5,10	-0,01	-0,04	-0,03	
258	FTIR	5,47	0,36	1,59	1,03	
259	FTIR	5,15	0,04	0,18	0,11	
260	FTIR	5,45	0,34	1,50	0,98	
261	FTIR	5,12	0,01	0,04	0,03	
262	FTIR	5,13	0,02	0,09	0,06	
263	FTIR	6,50	1,39	6,15	3,99	
264	FTIR	5,90	0,79	3,49	2,27	
265	FTIR	5,30	0,19	0,84	0,55	
267	FTIR	5,47	0,36	1,59	1,03	
268	FTIR	5,30	0,19	0,84	0,55	
269	FTIR	5,70	0,59	2,61	1,70	
270	FTIR	5,25	0,14	0,62	0,40	
274	FTIR	4,29	-0,82	-3,63	-2,36	
275	FTIR	5,40	0,29	1,28	0,83	
276	FTIR	4,84	-0,27	-1,19	-0,78	
277	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
279	FTIR	4,70	-0,41	-1,81	-1,18	
281	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
282	FTIR	4,80	-0,31	-1,37	-0,89	
283	FTIR	4,98	-0,13	-0,57	-0,37	
284	FTIR	6,40	1,29	5,70	3,71	
285	FTIR	5,00	-0,11	-0,49	-0,32	
321	FTIR	5,43	0,32	1,42	0,92	
339	FTIR	4,90	-0,21	-0,93	-0,60	
346	FTIR	5,90	0,79	3,49	2,27	
351	FTIR	4,70	-0,41	-1,81	-1,18	
371	FTIR	5,25	0,14	0,62	0,40	

**4.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	25
Minimalwert	4,4
Mittelwert	5,15
Median	5,11
Maximalwert	6,1
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,296
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,059
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,226
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,31
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,85
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,26
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,17

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	13	5,128	0,087
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	5,182	0,231
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	7	5,074	0,129
	herkömmliche Verfahren	25	5,114	0,103
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	5,198	0,392
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	5,540	



## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
02	elektrom.	3,24	0,005	0,11	
03	elektrom.	3,18	-0,055	-1,16	
04	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
05	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
06	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
07	elektrom.	3,23	-0,005	-0,11	
09	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
10	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
11	elektrom.	3,29	0,055	1,16	
12	elektrom.	3,23	-0,005	-0,11	
14	elektrom.	3,23	-0,005	-0,11	
15	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
16	elektrom.	3,16	-0,075	-1,58	
19	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
21	elektrom.	3,10	-0,135	-2,84	
22	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
23	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
24	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
25	elektrom.	3,22	-0,015	-0,32	
27	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
28	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
29	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
32	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
40	elektrom.	3,33	0,095	2,00	
41	elektrom.	3,22	-0,015	-0,32	
42	elektrom.	3,24	0,005	0,11	
44	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
45	elektrom.	3,11	-0,125	-2,63	
46	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
47	elektrom.	3,18	-0,055	-1,16	
49	elektrom.	3,20	-0,035	-0,74	
50	elektrom.	3,52	0,285	5,99	(**)
52	elektrom.	3,23	-0,010	-0,21	
57	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
58	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
61	elektrom.	3,29	0,055	1,16	
62	elektrom.	3,20	-0,035	-0,74	
63	elektrom.	3,03	-0,205	-4,31	
65	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
66	elektrom.	3,16	-0,075	-1,58	
70	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
72	elektrom.	3,48	0,245	5,15	(**)
78	elektrom.	3,28	0,045	0,95	
79	elektrom.	3,28	0,045	0,95	
81	elektrom.	3,24	0,005	0,11	
83	elektrom.	3,18	-0,055	-1,16	
86	elektrom.	3,28	0,045	0,95	

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

### 4.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	48	3,237	0,0542
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	3,267	0,0719

**4.8.3 FTIR-Laboregebnisse**

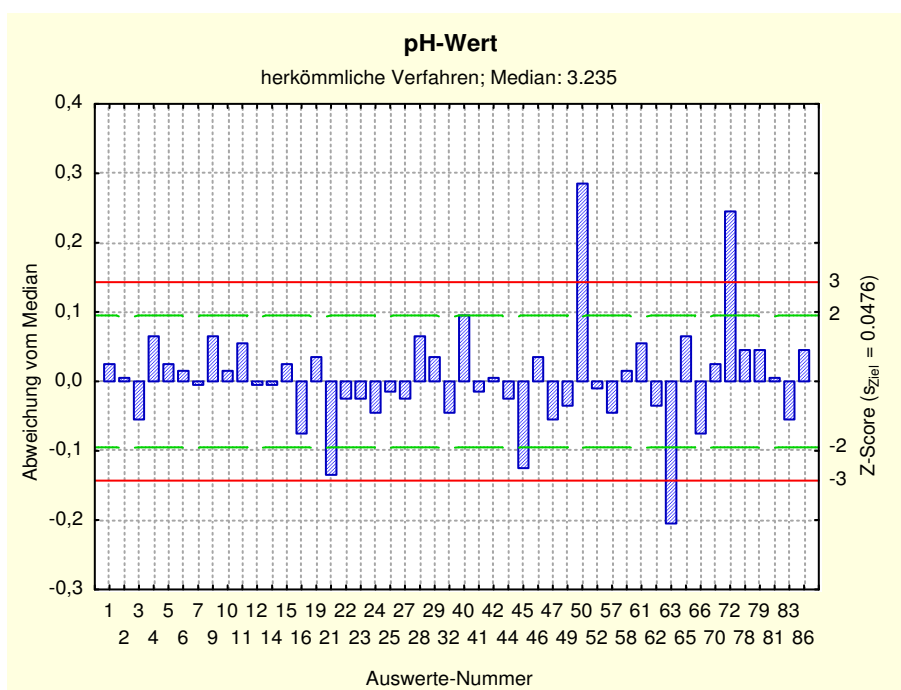
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,23	-0,010	-0,20	
202	FTIR	3,34	0,100	2,03	
203	FTIR	3,26	0,020	0,41	
204	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
205	FTIR	3,20	-0,040	-0,81	
206	FTIR	3,18	-0,060	-1,22	
207	FTIR	3,23	-0,010	-0,20	
208	FTIR	3,26	0,020	0,41	
209	FTIR	3,25	0,010	0,20	
210	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
211	FTIR	3,24	0,000	0,00	
213	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
215	FTIR	3,28	0,040	0,81	
216	FTIR	3,27	0,030	0,61	
217	FTIR	3,42	0,180	3,65	
218	FTIR	3,18	-0,060	-1,22	
219	FTIR	3,28	0,040	0,81	
220	FTIR	3,10	-0,140	-2,84	
221	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
222	FTIR	3,39	0,150	3,04	
223	FTIR	3,23	-0,010	-0,20	
224	FTIR	3,19	-0,050	-1,01	
225	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
226	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
227	FTIR	3,24	0,000	0,00	
228	FTIR	3,20	-0,040	-0,81	
229	FTIR	3,33	0,090	1,83	
230	FTIR	3,27	0,030	0,61	
231	FTIR	3,26	0,020	0,41	
232	FTIR	3,30	0,060	1,22	
234	FTIR	3,34	0,100	2,03	
236	FTIR	3,34	0,100	2,03	
238	FTIR	3,28	0,040	0,81	
239	FTIR	3,41	0,170	3,45	
242	FTIR	3,32	0,080	1,62	
243	FTIR	3,35	0,110	2,23	
244	FTIR	3,23	-0,010	-0,20	
245	FTIR	3,29	0,050	1,01	
246	FTIR	3,41	0,170	3,45	
247	FTIR	3,26	0,020	0,41	
248	FTIR	3,31	0,070	1,42	
249	FTIR	3,29	0,050	1,01	
251	FTIR	3,29	0,050	1,01	
252	FTIR	3,40	0,160	3,25	
253	FTIR	3,31	0,070	1,42	
254	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
256	FTIR	3,32	0,080	1,62	
257	FTIR	3,34	0,100	2,03	
258	FTIR	3,26	0,020	0,41	
259	FTIR	3,32	0,080	1,62	
260	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
261	FTIR	3,26	0,020	0,41	
262	FTIR	3,37	0,130	2,64	
263	FTIR	3,13	-0,110	-2,23	
264	FTIR	3,42	0,180	3,65	
265	FTIR	3,30	0,060	1,22	
266	FTIR	3,33	0,090	1,83	
267	FTIR	3,26	0,020	0,41	
268	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
269	FTIR	3,29	0,050	1,01	
270	FTIR	3,17	-0,070	-1,42	
271	FTIR	3,25	0,010	0,20	
272	FTIR	3,14	-0,100	-2,03	
273	FTIR	3,28	0,040	0,81	
274	FTIR	3,29	0,050	1,01	
275	FTIR	3,07	-0,170	-3,45	

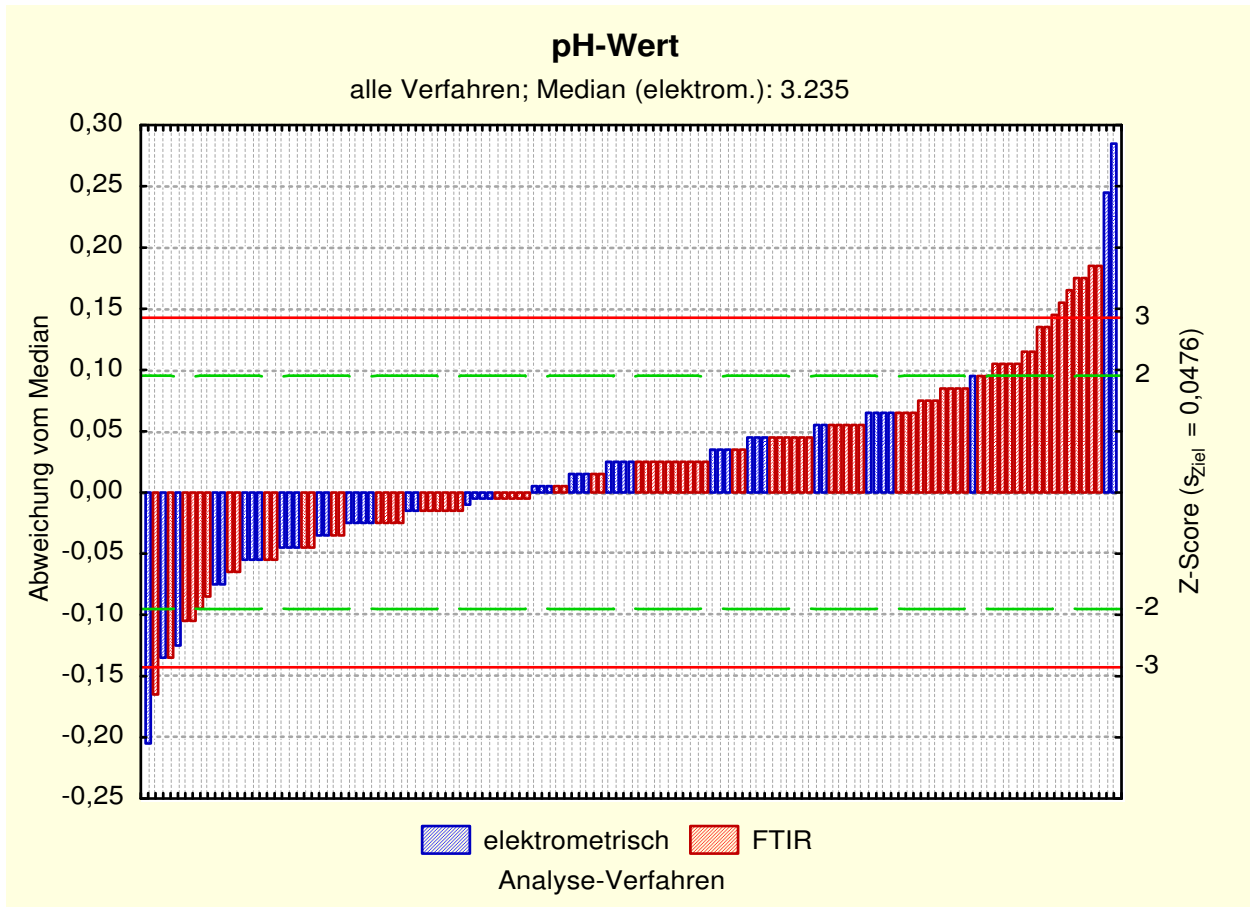
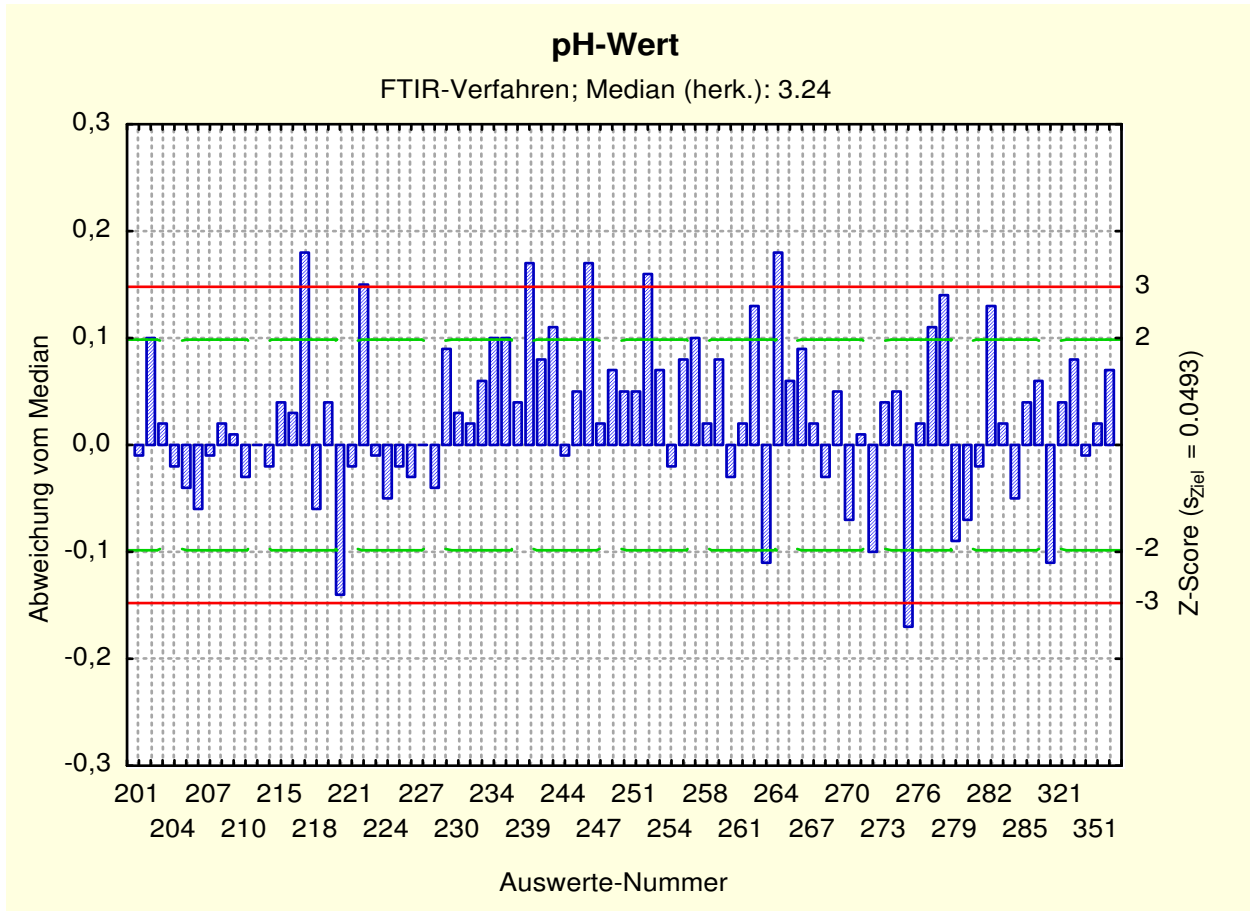
**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,26	0,020	0,41	
277	FTIR	3,35	0,110	2,23	
278	FTIR	3,38	0,140	2,84	
279	FTIR	3,15	-0,090	-1,83	
280	FTIR	3,17	-0,070	-1,42	
281	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
282	FTIR	3,37	0,130	2,64	
283	FTIR	3,26	0,020	0,41	
284	FTIR	3,19	-0,050	-1,01	
285	FTIR	3,28	0,040	0,81	
286	FTIR	3,30	0,060	1,22	
320	FTIR	3,13	-0,110	-2,23	
321	FTIR	3,28	0,040	0,81	
339	FTIR	3,32	0,080	1,62	
346	FTIR	3,23	-0,010	-0,20	
351	FTIR	3,26	0,020	0,41	
366	FTIR	3,31	0,070	1,42	

**4.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	48	46
Minimalwert	3,03	3,03
Mittelwert	3,240	3,229
Median	3,240	3,235
Maximalwert	3,52	3,33
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,0789	0,0580
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,0114	0,0085
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,66	1,22
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,60	1,18
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,24	0,18
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,23	0,17







## 4.9 Gesamtsäure [g/L]

### 4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	6,17	-0,230	-0,84	-2,15	
02	LwK 5.2.1	6,33	-0,070	-0,26	-0,65	
03	LwK 5.2.1	6,32	-0,080	-0,29	-0,75	
05	LwK 5.2.1	6,27	-0,130	-0,47	-1,21	
06	LwK 5.1	6,37	-0,030	-0,11	-0,28	
07	LwK 5.1	6,32	-0,080	-0,29	-0,75	
08	LwK 5.2.1	6,71	0,310	1,13	2,89	
09	LwK 5.2.1	6,36	-0,040	-0,15	-0,37	
10	LwK 5.2.1	6,35	-0,050	-0,18	-0,47	
11	LwK 5.1	6,41	0,010	0,04	0,09	
12	LwK 5.2.1	6,20	-0,205	-0,75	-1,91	
14	LwK 5.1	6,59	0,190	0,69	1,77	
15	LwK 5.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
16	LwK 5.2.1	6,20	-0,200	-0,73	-1,87	
18	LwK 5.2.2	6,40	0,000	0,00	0,00	
19	LwK 5.2.1	6,52	0,120	0,44	1,12	
20	LwK 5.1	6,40	0,000	0,00	0,00	
21	LwK 5.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
22	LwK 5.1	6,38	-0,020	-0,07	-0,19	
23	LwK 5.1	6,40	0,000	0,00	0,00	
24	LwK 5.1	6,00	-0,400	-1,46	-3,73	
27	LwK 5.1	6,56	0,160	0,58	1,49	
28	LwK 5.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
29	LwK 5.1	6,40	0,000	0,00	0,00	
32	LwK 5.2.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
36	LwK 5.2.1	6,40	0,000	0,00	0,00	
40	LwK 5.1	6,40	0,000	0,00	0,00	
41	LwK 5.2.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
42	LwK 5.1	6,34	-0,060	-0,22	-0,56	
44	LwK 5.1	6,30	-0,100	-0,37	-0,93	
45	LwK 5.1	6,60	0,200	0,73	1,87	
46	LwK 5.1	6,52	0,120	0,44	1,12	
47	LwK 5.1	6,54	0,140	0,51	1,31	
49	LwK 5.1	6,15	-0,250	-0,91	-2,33	
50	LwK 5.1	6,52	0,120	0,44	1,12	
52	LwK 5.1	6,49	0,090	0,33	0,84	
53	LwK 5.1	6,60	0,200	0,73	1,87	
54	LwK 5.2.1	6,60	0,200	0,73	1,87	
55	LwK 5.1	6,50	0,100	0,37	0,93	
57	LwK 5.2.2	6,20	-0,200	-0,73	-1,87	
58	LwK 5.2.1	6,32	-0,080	-0,29	-0,75	
61	LwK 5.1	6,14	-0,260	-0,95	-2,43	
62	LwK 5.2.1	6,33	-0,070	-0,26	-0,65	
63	LwK 5.2.2	6,40	0,000	0,00	0,00	
65	LwK 5.2.1	6,30	-0,100	-0,37	-0,93	
66	LwK 5.1	6,30	-0,100	-0,37	-0,93	
70	LwK 5.1	6,22	-0,180	-0,66	-1,68	
71	LwK 5.1	6,30	-0,100	-0,37	-0,93	
72	LwK 5.2.1	6,76	0,360	1,31	3,36	
78	LwK 5.1	6,59	0,190	0,69	1,77	
79	LwK 5.1	6,61	0,210	0,77	1,96	
81	LwK 5.1	6,60	0,200	0,73	1,87	
83	LwK 5.2.1	6,60	0,200	0,73	1,87	
86	LwK 5.2.2	6,20	-0,200	-0,73	-1,87	
90	LwK 5.2.1	6,40	0,000	0,00	0,00	

## 4.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,23	-0,170	-0,62	-1,17	
202	LwK 5.3	6,34	-0,060	-0,22	-0,41	
203	LwK 5.3	6,16	-0,240	-0,88	-1,66	
204	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
205	LwK 5.3	6,44	0,040	0,15	0,28	
206	LwK 5.3	6,22	-0,180	-0,66	-1,24	
207	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
208	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
209	LwK 5.3	6,19	-0,210	-0,77	-1,45	
210	LwK 5.3	6,24	-0,160	-0,58	-1,10	
211	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
212	LwK 5.3	6,16	-0,240	-0,88	-1,66	
213	LwK 5.3	6,53	0,130	0,47	0,90	
215	LwK 5.3	6,60	0,200	0,73	1,38	
216	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
217	LwK 5.3	6,38	-0,020	-0,07	-0,14	
218	LwK 5.3	6,14	-0,260	-0,95	-1,79	
219	LwK 5.3	6,39	-0,010	-0,04	-0,07	
220	LwK 5.3	6,80	0,400	1,46	2,76	
221	LwK 5.3	6,19	-0,210	-0,77	-1,45	
222	LwK 5.3	6,61	0,210	0,77	1,45	
223	LwK 5.3	6,38	-0,020	-0,07	-0,14	
224	LwK 5.3	6,20	-0,200	-0,73	-1,38	
225	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
226	LwK 5.3	6,65	0,250	0,91	1,72	
227	LwK 5.3	6,35	-0,050	-0,18	-0,34	
228	LwK 5.3	6,20	-0,200	-0,73	-1,38	
229	LwK 5.3	6,52	0,120	0,44	0,83	
230	LwK 5.3	6,42	0,020	0,07	0,14	
231	LwK 5.3	6,06	-0,340	-1,24	-2,34	
232	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
234	LwK 5.3	6,56	0,160	0,58	1,10	
236	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
238	LwK 5.3	6,16	-0,240	-0,88	-1,66	
239	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
242	LwK 5.3	6,51	0,110	0,40	0,76	
243	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
244	LwK 5.3	6,25	-0,150	-0,55	-1,03	
245	LwK 5.3	6,00	-0,400	-1,46	-2,76	
246	LwK 5.3	6,70	0,300	1,10	2,07	
247	LwK 5.3	6,60	0,200	0,73	1,38	
248	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
249	LwK 5.3	6,36	-0,040	-0,15	-0,28	
250	LwK 5.3	6,64	0,240	0,88	1,66	
251	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
252	LwK 5.3	6,13	-0,270	-0,99	-1,86	
253	LwK 5.3	6,51	0,110	0,40	0,76	
254	LwK 5.3	6,73	0,330	1,21	2,28	
256	LwK 5.3	6,60	0,200	0,73	1,38	
257	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
258	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
259	LwK 5.3	6,38	-0,020	-0,07	-0,14	
260	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
261	LwK 5.3	6,31	-0,090	-0,33	-0,62	
262	LwK 5.3	6,04	-0,360	-1,31	-2,48	
263	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
264	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
265	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
266	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
267	LwK 5.3	6,25	-0,150	-0,55	-1,03	
268	LwK 5.3	6,14	-0,260	-0,95	-1,79	
269	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
270	LwK 5.3	6,17	-0,230	-0,84	-1,59	
271	LwK 5.3	6,20	-0,200	-0,73	-1,38	
272	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
273	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

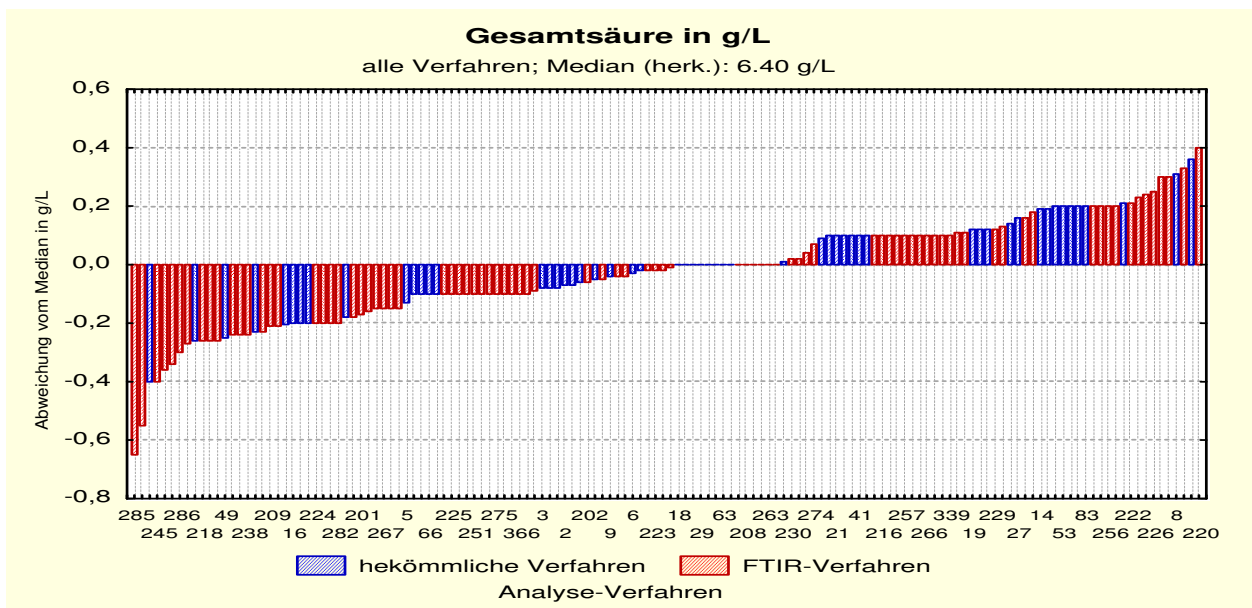
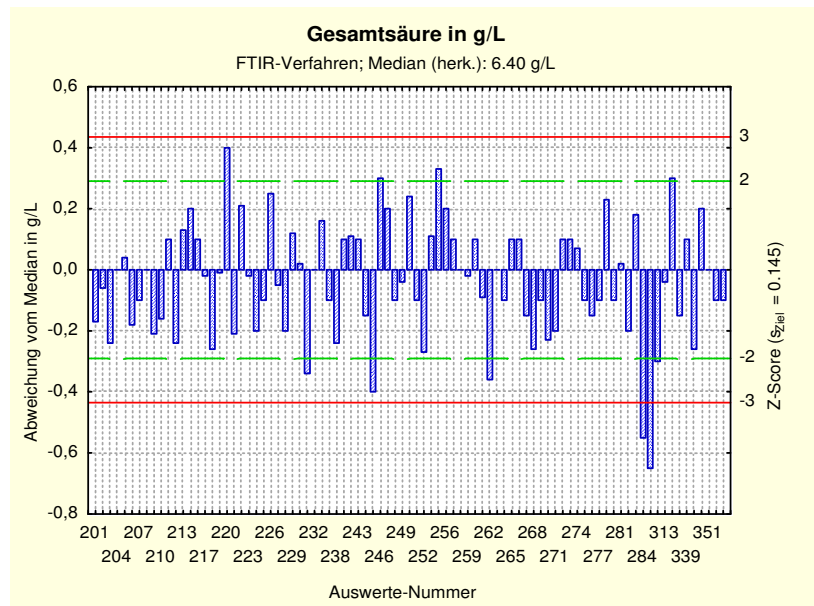
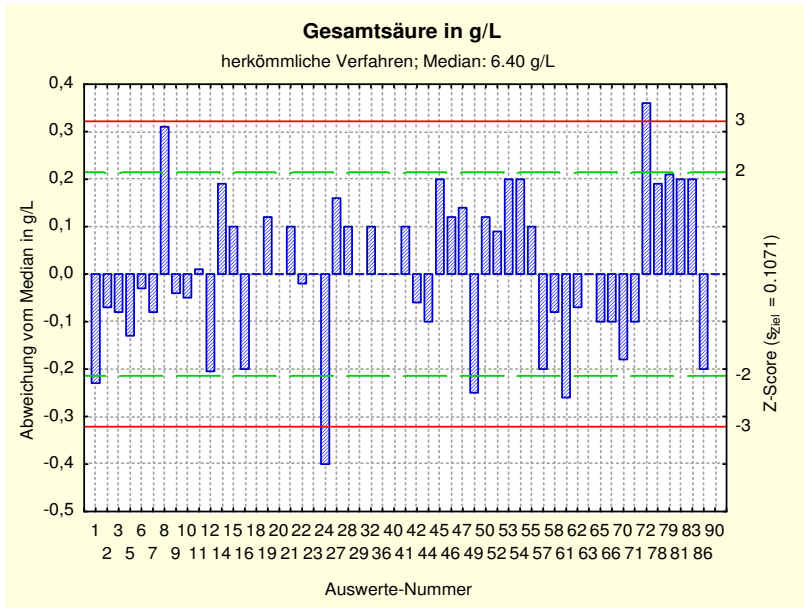
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 5.3	6,47	0,070	0,26	0,48	
275	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
276	LwK 5.3	6,25	-0,150	-0,55	-1,03	
277	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
278	LwK 5.3	6,63	0,230	0,84	1,59	
279	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
281	LwK 5.3	6,42	0,020	0,07	0,14	
282	LwK 5.3	6,20	-0,200	-0,73	-1,38	
283	LwK 5.3	6,58	0,180	0,66	1,24	
284	LwK 5.3	5,85	-0,550	-2,01	-3,79	
285	LwK 5.3	5,75	-0,650	-2,37	-4,48	
286	LwK 5.3	6,10	-0,300	-1,10	-2,07	
313	LwK 5.3	6,36	-0,040	-0,15	-0,28	
320	LwK 5.3	6,70	0,300	1,10	2,07	
321	LwK 5.3	6,25	-0,150	-0,55	-1,03	
339	LwK 5.3	6,50	0,100	0,37	0,69	
345	LwK 5.3	6,14	-0,260	-0,95	-1,79	
346	LwK 5.3	6,60	0,200	0,73	1,38	
351	LwK 5.3	6,40	0,000	0,00	0,00	
366	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	
371	LwK 5.3	6,30	-0,100	-0,37	-0,69	

**4.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	55
Minimalwert	6,00
Mittelwert	6,407
Median	6,400
Maximalwert	6,76
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,157
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,021
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,274
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,57
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,46
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	1,08
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,20
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,15

**4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	31	6,432	0,148
LwK 5.2.1	Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	20	6,399	0,171
LwK 5.2.2	Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	4	6,300	0,131
	herkömmliche Verfahren	55	6,408	0,162
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	6,366	0,190



## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,37	-0,250	-1,95	
02	IC	2,50	-0,119	-0,93	
05	photometr.	2,26	-0,360	-2,81	
06	HPLC	2,63	0,010	0,08	
07	HPLC	2,41	-0,210	-1,64	
08	HPLC	2,38	-0,240	-1,87	
09	IC	2,45	-0,170	-1,33	
11	photometr., autom.	2,93	0,310	2,42	
12	photometr., autom.	2,37	-0,252	-1,97	
16	photometr., autom.	2,90	0,280	2,18	
19	IC	2,86	0,240	1,87	
22	HPLC	2,63	0,010	0,08	
23	HPLC	3,02	0,400	3,12	
24	NMR	2,34	-0,280	-2,18	
27	photometr., autom.	2,42	-0,200	-1,56	
28	HPLC	2,56	-0,065	-0,51	
32	photometr., autom.	2,60	-0,020	-0,16	
40	photometr., autom.	2,93	0,310	2,42	
47	photometr., autom.	2,71	0,090	0,70	
49	photometr.	3,33	0,710	5,54	(**)
50	photometr., autom.	3,02	0,400	3,12	
52	HPLC	2,56	-0,060	-0,47	
57	photometr., autom.	2,90	0,280	2,18	
58	photometr., autom.	2,95	0,326	2,54	
61	HPLC	2,49	-0,130	-1,01	
63	photometr.	2,20	-0,420	-3,28	
65	HPLC	3,02	0,400	3,12	
70	photometr.	2,62	0,000	0,00	
72	photometr., autom.	2,54	-0,080	-0,62	
79	photometr.	2,69	0,070	0,55	
90	HPLC	2,43	-0,190	-1,48	
95	photometr., autom.	2,63	0,010	0,08	
102	IC	2,76	0,140	1,09	

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

### 4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,15	-0,475	-3,70	-2,09	
202	FTIR	2,26	-0,365	-2,84	-1,61	
203	FTIR	2,39	-0,235	-1,83	-1,04	
204	FTIR	2,39	-0,235	-1,83	-1,04	
205	FTIR	2,59	-0,035	-0,27	-0,15	
206	FTIR	2,83	0,205	1,60	0,90	
208	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
209	FTIR	2,41	-0,215	-1,67	-0,95	
210	FTIR	2,44	-0,185	-1,44	-0,81	
211	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
213	FTIR	2,02	-0,605	-4,71	-2,67	
215	FTIR	2,10	-0,525	-4,09	-2,31	
216	FTIR	2,34	-0,285	-2,22	-1,26	
217	FTIR	2,48	-0,145	-1,13	-0,64	
218	FTIR	3,64	1,015	7,90	4,47	
219	FTIR	2,27	-0,355	-2,76	-1,56	
220	FTIR	2,80	0,175	1,36	0,77	
221	FTIR	2,80	0,175	1,36	0,77	
222	FTIR	2,28	-0,345	-2,69	-1,52	
223	FTIR	1,82	-0,805	-6,27	-3,55	
224	FTIR	2,23	-0,395	-3,08	-1,74	
225	FTIR	2,20	-0,425	-3,31	-1,87	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	2,80	0,175	1,36	0,77	
227	FTIR	2,49	-0,135	-1,05	-0,59	
228	FTIR	2,20	-0,425	-3,31	-1,87	
229	FTIR	2,54	-0,085	-0,66	-0,37	
230	FTIR	2,49	-0,135	-1,05	-0,59	
231	FTIR	2,11	-0,515	-4,01	-2,27	
232	FTIR	2,00	-0,625	-4,87	-2,75	
234	FTIR	2,33	-0,295	-2,30	-1,30	
236	FTIR	2,75	0,125	0,97	0,55	
238	FTIR	2,11	-0,515	-4,01	-2,27	
239	FTIR	2,50	-0,125	-0,97	-0,55	
242	FTIR	2,42	-0,205	-1,60	-0,90	
243	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
244	FTIR	2,96	0,335	2,61	1,48	
245	FTIR	1,58	-1,045	-8,14	-4,60	
246	FTIR	2,60	-0,025	-0,19	-0,11	
247	FTIR	2,74	0,115	0,90	0,51	
248	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
249	FTIR	2,41	-0,215	-1,67	-0,95	
251	FTIR	2,40	-0,225	-1,75	-0,99	
252	FTIR	2,01	-0,615	-4,79	-2,71	
254	FTIR	2,80	0,175	1,36	0,77	
256	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
257	FTIR	2,60	-0,025	-0,19	-0,11	
258	FTIR	3,54	0,915	7,13	4,03	
259	FTIR	1,61	-1,015	-7,90	-4,47	
260	FTIR	2,62	-0,005	-0,04	-0,02	
261	FTIR	2,44	-0,185	-1,44	-0,81	
262	FTIR	2,52	-0,105	-0,82	-0,46	
263	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
264	FTIR	2,40	-0,225	-1,75	-0,99	
267	FTIR	2,43	-0,195	-1,52	-0,86	
268	FTIR	2,38	-0,245	-1,91	-1,08	
269	FTIR	2,20	-0,425	-3,31	-1,87	
270	FTIR	2,35	-0,275	-2,14	-1,21	
271	FTIR	2,25	-0,375	-2,92	-1,65	
272	FTIR	2,56	-0,065	-0,51	-0,29	
273	FTIR	2,40	-0,225	-1,75	-0,99	
274	FTIR	2,20	-0,425	-3,31	-1,87	
275	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
276	FTIR	2,29	-0,335	-2,61	-1,48	
277	FTIR	2,50	-0,125	-0,97	-0,55	
278	FTIR	1,63	-0,995	-7,75	-4,38	
279	FTIR	2,50	-0,125	-0,97	-0,55	
280	FTIR	6,51	3,885	30,25	17,11	(*)
281	FTIR	2,19	-0,435	-3,39	-1,92	
282	FTIR	2,30	-0,325	-2,53	-1,43	
283	FTIR	2,43	-0,195	-1,52	-0,86	
284	FTIR	2,20	-0,425	-3,31	-1,87	
285	FTIR	1,34	-1,285	-10,01	-5,66	(**)
286	FTIR	2,40	-0,225	-1,75	-0,99	
320	FTIR	2,90	0,275	2,14	1,21	
321	FTIR	2,16	-0,465	-3,62	-2,05	
339	FTIR	2,10	-0,525	-4,09	-2,31	
346	FTIR	2,50	-0,125	-0,97	-0,55	
351	FTIR	2,90	0,275	2,14	1,21	

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

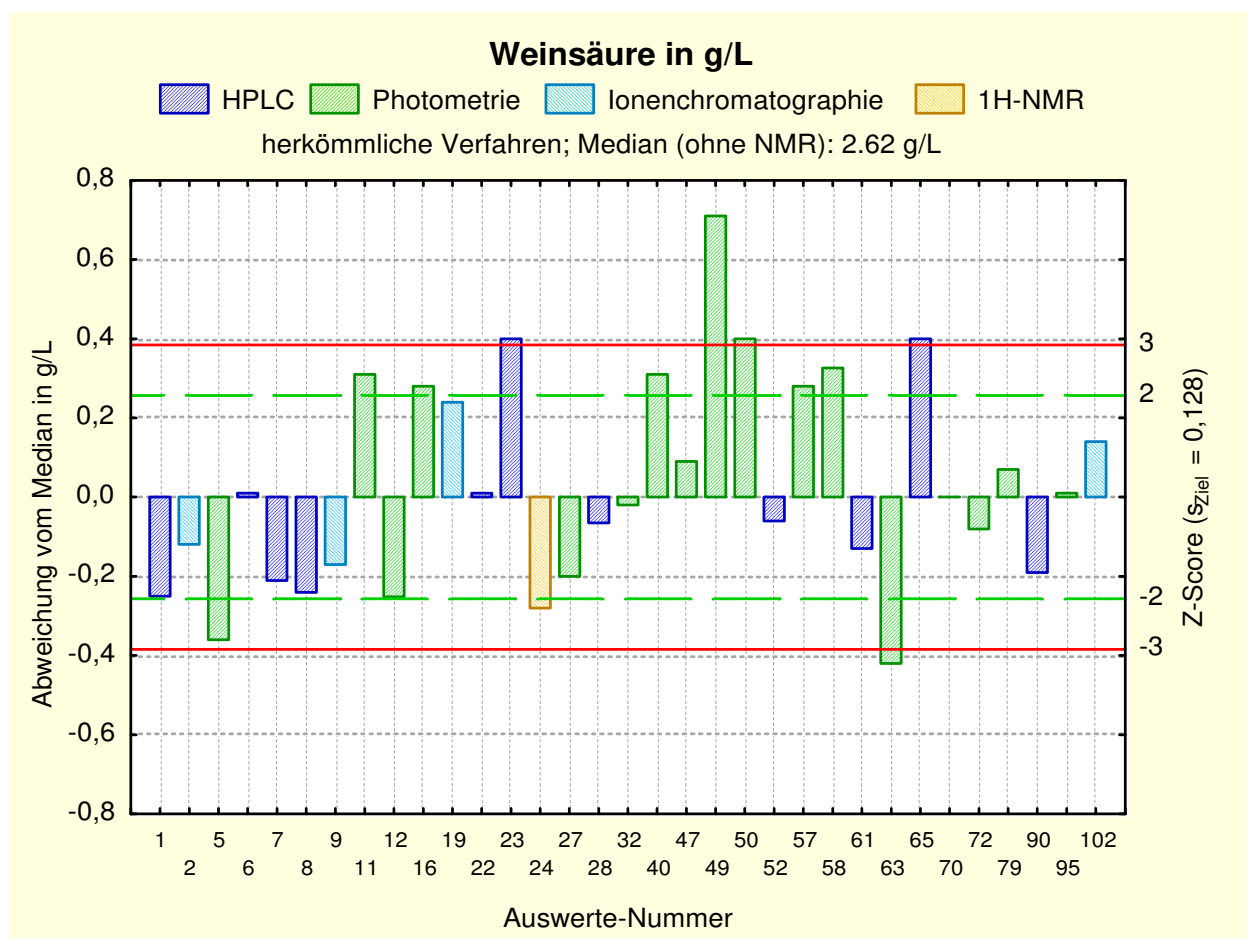
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

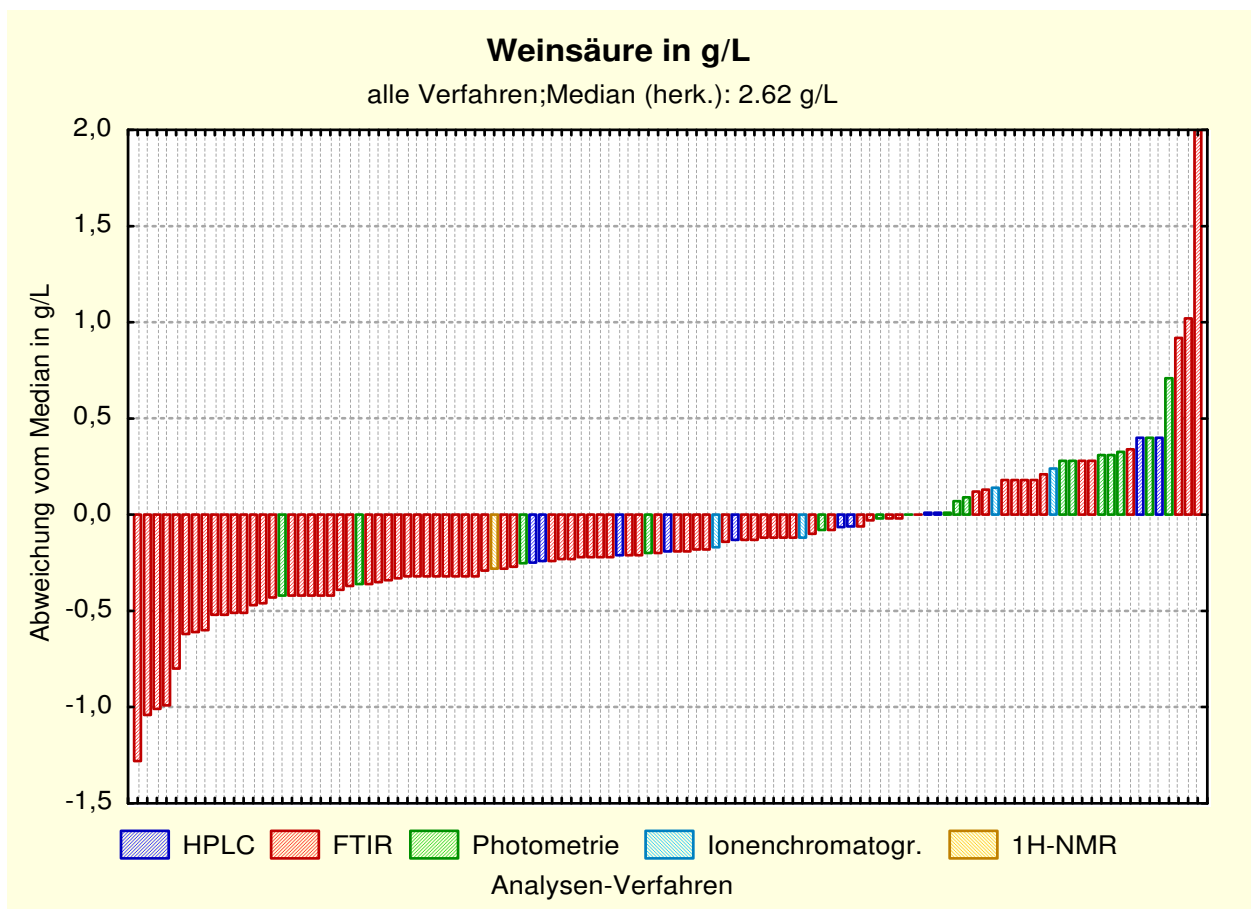
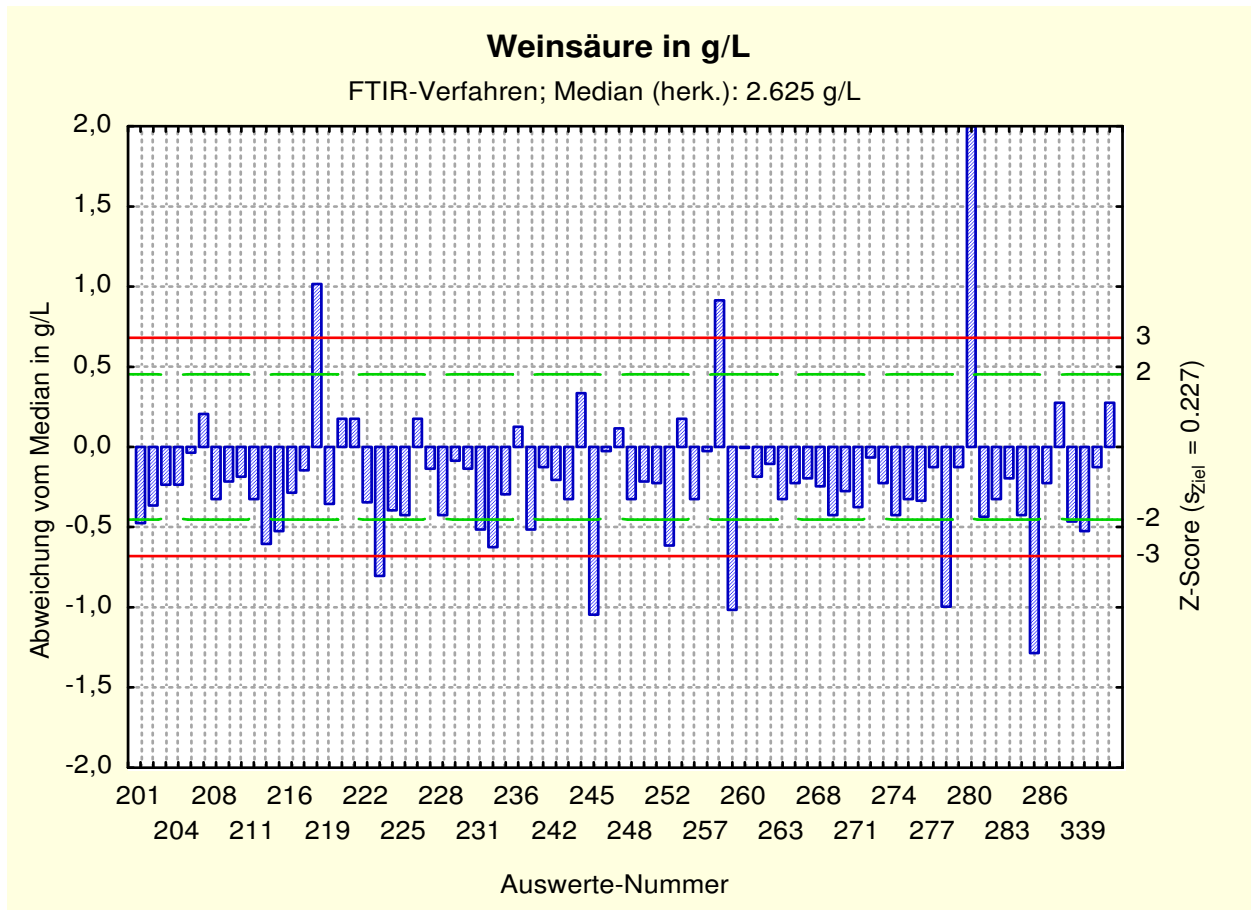
**4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	32	31
Minimalwert	2,20	2,20
Mittelwert	2,658	2,636
Median	2,625	2,620
Maximalwert	3,33	3,02
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,264	0,238
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,047	0,043
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,128	0,128
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,227	0,227
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,06	1,86
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	1,16	1,05
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,36	0,33
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,21	0,19

**4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	2,559	0,192
photometr.	photometrisch n. Rebelein	5	2,620	0,512
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	12	2,744	0,250
IC	Ionenchromatographie	4	2,643	0,225
	herkömmliche Verfahren	32	2,651	0,277
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	2,390	0,274
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,340	







## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,450	0,0750	3,05	2,63	
02	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,354	-0,0210	-0,85	-0,74	
03	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,622	0,2470	10,05	8,64	(*)
05	Österreich, SO <sub>2</sub> korr.	0,390	0,0150	0,61	0,53	
06	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,345	-0,0300	-1,22	-1,05	
07	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,447	0,0720	2,93	2,52	
08	OIV o. SO <sub>2</sub> -korr.	0,400	0,0250	1,02	0,88	
09	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,200	-0,1750	-7,12	-6,12	(**)
10	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,294	-0,0810	-3,29	-2,84	
11	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,200	-0,1750	-7,12	-6,12	(**)
12	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,323	-0,0520	-2,11	-1,82	
14	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,388	0,0130	0,53	0,46	
21	Gerhardt SO <sub>2</sub> unber.	0,500	0,1250	5,08	4,38	
23	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,430	0,0550	2,24	1,92	
29	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,279	-0,0960	-3,90	-3,36	
32	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,380	0,0050	0,20	0,18	
40	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,410	0,0350	1,42	1,22	
41	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,390	0,0150	0,61	0,53	
44	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,420	0,0450	1,83	1,57	
45	Gerhardt SO <sub>2</sub> unber.	0,588	0,2130	8,66	7,45	(*)
47	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,370	-0,0050	-0,20	-0,18	
49	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,463	0,0880	3,58	3,08	
52	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,282	-0,0930	-3,78	-3,26	
55	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,510	0,1350	5,49	4,72	
58	Rentschler mod. korr.	0,308	-0,0670	-2,72	-2,34	
62	Wädenswil SO <sub>2</sub> korr.	0,275	-0,1000	-4,07	-3,50	
63	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,330	-0,0450	-1,83	-1,57	
65	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,420	0,0450	1,83	1,57	
66	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,500	0,1250	5,08	4,38	
68	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,450	0,0750	3,05	2,63	
70	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,430	0,0550	2,24	1,92	
71	Wädenswil SO <sub>2</sub> korr.	0,384	0,0091	0,37	0,32	
72	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,550	0,1750	7,12	6,13	(**)
79	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,260	-0,1150	-4,68	-4,02	
98	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,462	0,0870	3,54	3,05	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur ab. Der SO<sub>2</sub>-korrigierte Wert bleibt unberücksichtigt. (\*\*) Diese Werte werden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,465	0,0900	3,66	1,01	
202	FTIR	0,330	-0,0450	-1,83	-0,51	
203	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
204	FTIR	0,380	0,0050	0,20	0,06	
205	FTIR	0,330	-0,0450	-1,83	-0,51	
206	FTIR	0,410	0,0350	1,42	0,39	
208	FTIR	0,280	-0,0950	-3,86	-1,07	
209	FTIR	0,380	0,0050	0,20	0,06	
210	FTIR	0,282	-0,0930	-3,78	-1,04	
211	FTIR	0,490	0,1150	4,68	1,29	
212	FTIR	0,265	-0,1100	-4,47	-1,23	
215	FTIR	0,290	-0,0850	-3,46	-0,95	
216	FTIR	0,400	0,0250	1,02	0,28	
217	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
218	FTIR	0,170	-0,2050	-8,34	-2,30	
219	FTIR	0,380	0,0050	0,20	0,06	
220	FTIR	0,300	-0,0750	-3,05	-0,84	
221	FTIR	0,290	-0,0850	-3,46	-0,95	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

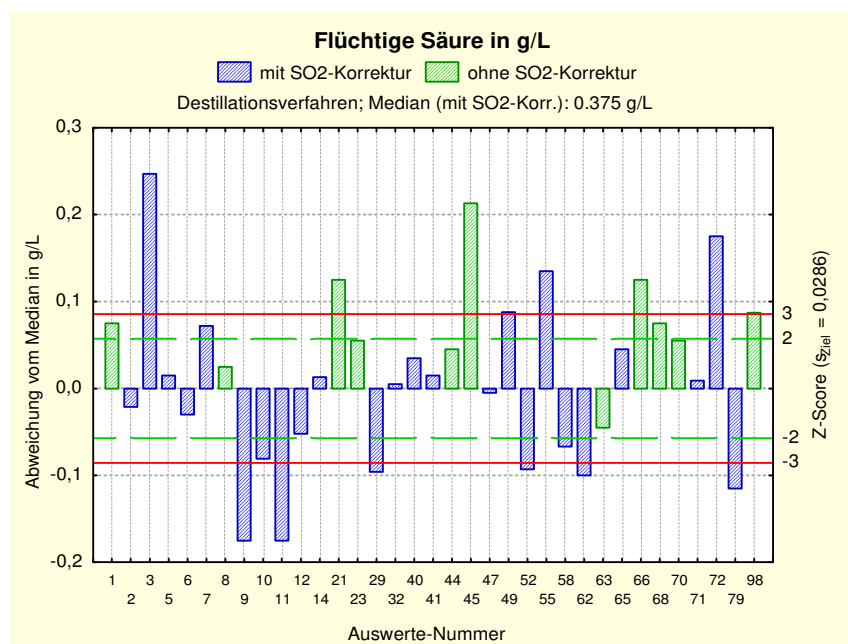
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
223	FTIR	0,340	-0,0350	-1,42	-0,39	
225	FTIR	0,460	0,0850	3,46	0,95	
226	FTIR	0,250	-0,1250	-5,08	-1,40	
227	FTIR	0,471	0,0960	3,90	1,08	
228	FTIR	0,340	-0,0350	-1,42	-0,39	
229	FTIR	0,550	0,1750	7,12	1,96	
230	FTIR	0,260	-0,1150	-4,68	-1,29	
231	FTIR	0,300	-0,0750	-3,05	-0,84	
232	FTIR	0,380	0,0050	0,20	0,06	
234	FTIR	0,410	0,0350	1,42	0,39	
236	FTIR	0,320	-0,0550	-2,24	-0,62	
238	FTIR	0,490	0,1150	4,68	1,29	
239	FTIR	0,540	0,1650	6,71	1,85	
242	FTIR	0,490	0,1150	4,68	1,29	
243	FTIR	0,410	0,0350	1,42	0,39	
244	FTIR	0,420	0,0450	1,83	0,51	
245	FTIR	0,400	0,0250	1,02	0,28	
246	FTIR	0,360	-0,0150	-0,61	-0,17	
247	FTIR	0,400	0,0250	1,02	0,28	
248	FTIR	0,460	0,0850	3,46	0,95	
249	FTIR	0,410	0,0350	1,42	0,39	
251	FTIR	0,500	0,1250	5,08	1,40	
252	FTIR	0,100	-0,2750	-11,18	-3,09	
253	FTIR	0,440	0,0650	2,64	0,73	
254	FTIR	0,280	-0,0950	-3,86	-1,07	
256	FTIR	0,440	0,0650	2,64	0,73	
257	FTIR	0,560	0,1850	7,52	2,08	
259	FTIR	0,500	0,1250	5,08	1,40	
260	FTIR	0,360	-0,0150	-0,61	-0,17	
261	FTIR	0,330	-0,0450	-1,83	-0,51	
262	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
263	FTIR	0,330	-0,0450	-1,83	-0,51	
264	FTIR	0,300	-0,0750	-3,05	-0,84	
265	FTIR	0,450	0,0750	3,05	0,84	
266	FTIR	0,300	-0,0750	-3,05	-0,84	
267	FTIR	0,390	0,0150	0,61	0,17	
268	FTIR	0,400	0,0250	1,02	0,28	
269	FTIR	0,340	-0,0350	-1,42	-0,39	
270	FTIR	0,430	0,0550	2,24	0,62	
271	FTIR	0,315	-0,0600	-2,44	-0,67	
272	FTIR	0,420	0,0450	1,83	0,51	
273	FTIR	0,450	0,0750	3,05	0,84	
274	FTIR	0,440	0,0650	2,64	0,73	
275	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
276	FTIR	0,440	0,0650	2,64	0,73	
277	FTIR	0,470	0,0950	3,86	1,07	
278	FTIR	0,530	0,1550	6,30	1,74	
279	FTIR	0,450	0,0750	3,05	0,84	
280	FTIR	0,335	-0,0400	-1,63	-0,45	
281	FTIR	0,310	-0,0650	-2,64	-0,73	
282	FTIR	0,340	-0,0350	-1,42	-0,39	
286	FTIR	0,380	0,0050	0,20	0,06	
320	FTIR	0,350	-0,0250	-1,02	-0,28	
321	FTIR	0,370	-0,0050	-0,20	-0,06	
339	FTIR	0,320	-0,0550	-2,24	-0,62	
346	FTIR	0,680	0,3050	12,40	3,42	
351	FTIR	0,360	-0,0150	-0,61	-0,17	
366	FTIR	0,290	-0,0850	-3,46	-0,95	
371	FTIR	0,255	-0,1200	-4,88	-1,35	

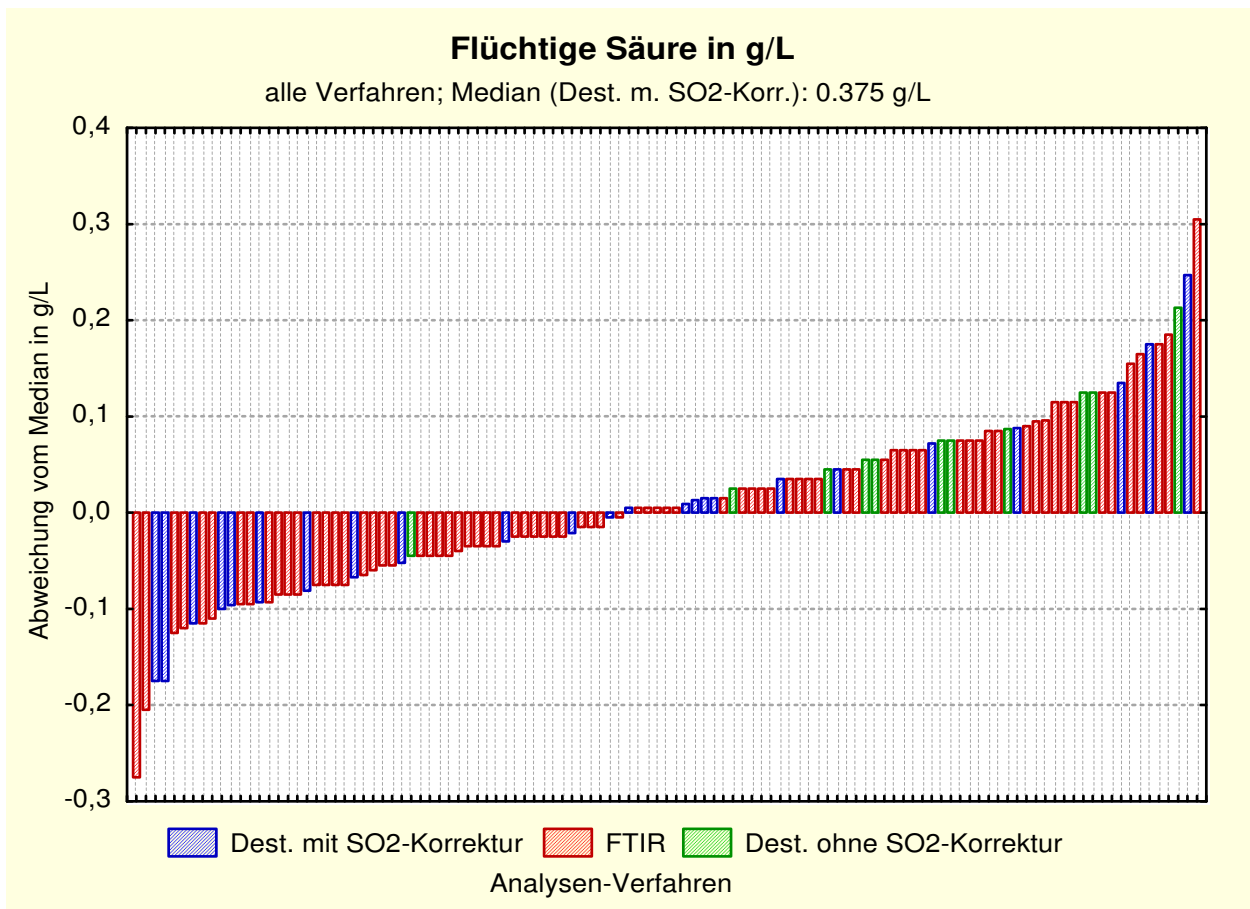
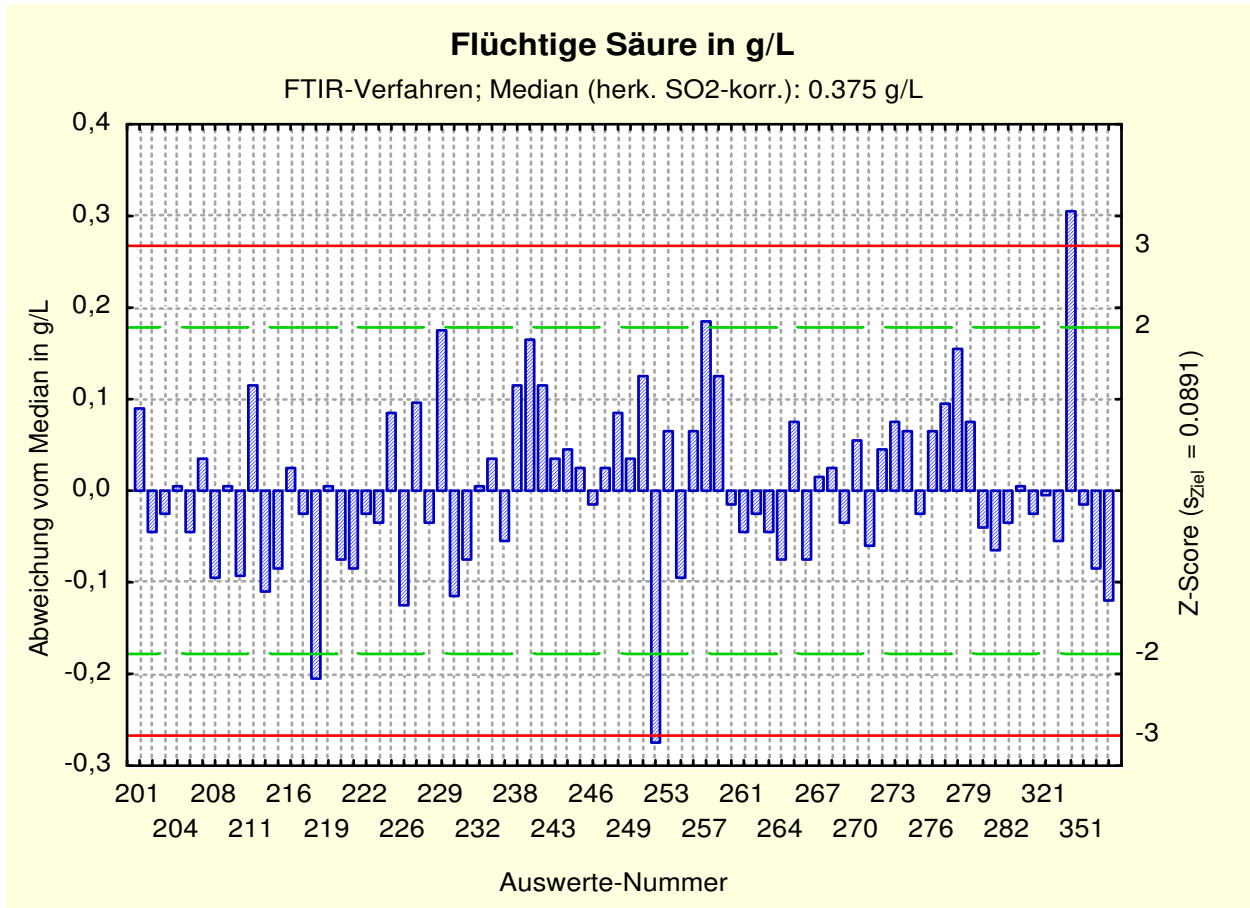
### 4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	23	20
Minimalwert	0,200	0,260
Mittelwert	0,3575	0,3636
Median	0,3700	0,3750
Maximalwert	0,550	0,510
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,089	0,068
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,019	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,024	0,025
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	3,68	2,78
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	3,13	2,39
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,00	0,77
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,77	0,62
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,65	0,53
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,21	0,17

### 4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO2 unber.	Halbmikrodestillation n. AVV			
	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,4371	0,0444
Halbmikro SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	5	0,3171	0,0832
Wädenswil SO2 unber.	Wädenswil-Verfahren			
	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,4500	
Wädenswil SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,3296	0,0875
Gerhardt SO2 unber.	Destillationsapparat Gerhardt			
	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	2	0,5440	0,0706
Gerhardt SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,4630	
Gerhardt SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	9	0,4139	0,0669
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO2-korr.	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	5	0,3330	0,1947
o. SO2-korr.	ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,4000	
Rentschler mod. korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,3080	
Österreich, SO2 korr.	Erläuterung siehe Teil 1 Abschnitt 6.18.4	1	0,3900	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	24	0,3636	0,100
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,3783	0,0853





## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,226	-0,058	-2,99	
06	enzymat. autom.	0,305	0,021	1,08	
07	HPLC	0,252	-0,032	-1,65	
11	enzymat. autom.	0,300	0,016	0,82	
15	enzymat. autom.	0,340	0,056	2,88	
16	enzymat. autom.	0,290	0,006	0,31	
19	IC	0,290	0,006	0,31	
22	HPLC	0,314	0,030	1,55	
24	NMR	0,230	-0,054	-2,78	
27	enzymat. autom.	0,300	0,016	0,82	
28	HPLC	0,220	-0,064	-3,30	
32	enzymat. autom.	0,410	0,126	6,49	(**)
40	enzymat. autom.	0,280	-0,004	-0,21	
42	enzymat. autom.	0,310	0,026	1,34	
47	enzymat. autom.	0,280	-0,004	-0,21	
49	enzymat. autom.	0,320	0,036	1,85	
50	enzymat. autom.	0,330	0,046	2,37	
52	enzymat. Hand	0,216	-0,068	-3,50	
57	enzymat. autom.	0,300	0,016	0,82	
58	enzymat. autom.	0,287	0,003	0,15	
61	enzymat. autom.	0,240	-0,044	-2,27	
65	enzymat. autom.	0,281	-0,003	-0,15	
70	enzymat. autom.	0,330	0,046	2,37	
72	enzymat. autom.	0,270	-0,014	-0,72	
79	enzymat. Hand	0,215	-0,069	-3,55	
90	HPLC	0,256	-0,028	-1,44	
95	enzymat. autom.	0,280	-0,004	-0,21	
105	enzymat. autom.	0,410	0,126	6,49	(**)
213	FTIR	0,350	0,066	3,40	
224	FTIR	0,260	-0,024	-1,24	
243	FTIR	0,410	0,126	6,49	(***)
258	FTIR	0,380	0,096	4,94	
262	FTIR	0,380	0,096	4,94	
283	FTIR	0,313	0,029	1,49	
284	FTIR	0,486	0,202	10,40	(*)
285	FTIR	0,220	-0,064	-3,30	

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

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

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

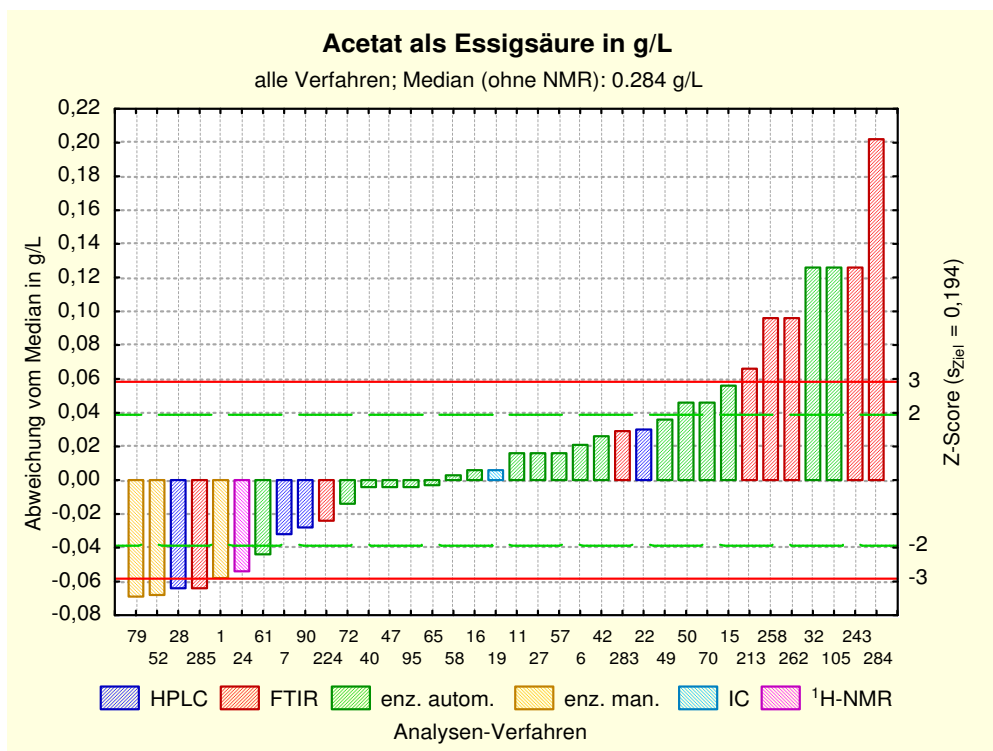
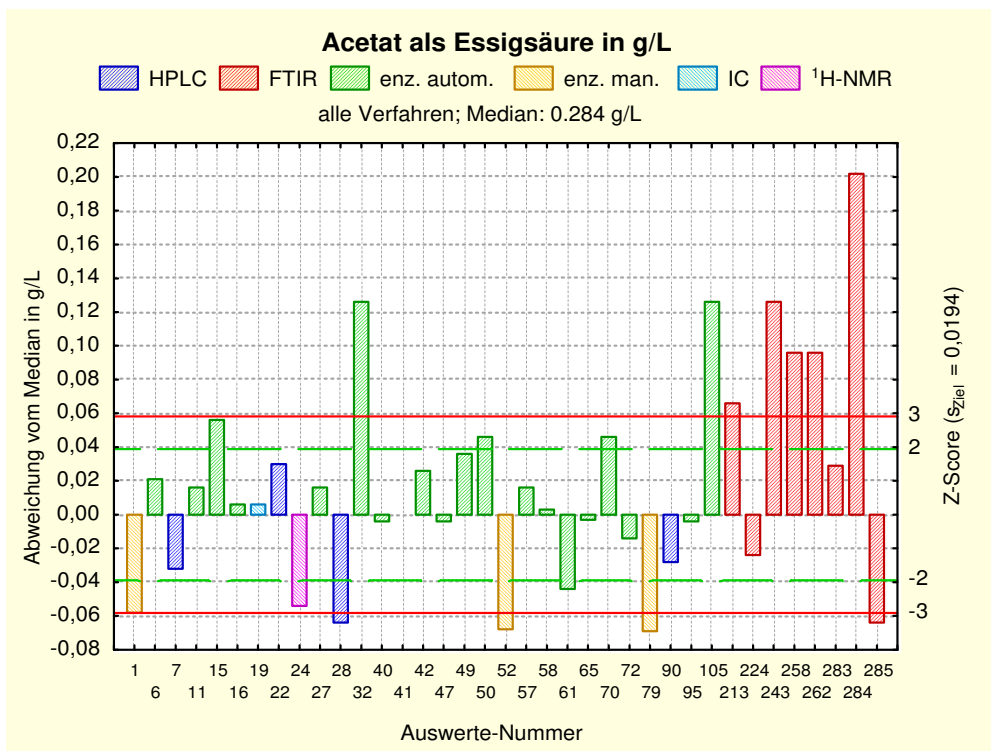
**Hinweis:** Alle Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz bewertet.

### 4.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	26
Minimalwert	0,215	0,215
Mittelwert	0,289	0,279
Median	0,288	0,284
Maximalwert	0,410	0,340
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,050	0,037
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,009	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,020	0,019
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )		
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,52	1,92
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,48	0,38
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )		

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,2588	0,0408
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	19	0,30315	0,0306
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	3	0,2184	0,0058
IC	Ionenchromatographie	1	0,2900	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,2300	
	herkömmliche Verfahren	28	0,2848	0,0459
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	8	0,3498	0,0927



### 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. man.	3,02	0,198	1,45	2,21	
02	enzymat. man.	2,78	-0,044	-0,32	-0,49	
06	HPLC	2,74	-0,080	-0,59	-0,89	
07	HPLC	2,92	0,100	0,73	1,12	
08	HPLC	2,59	-0,230	-1,69	-2,57	
11	enzymat. autom.	2,93	0,110	0,81	1,23	
19	IC	3,35	0,530	3,88	5,92	(**)
22	HPLC	2,82	0,000	0,00	0,00	
23	HPLC	2,78	-0,040	-0,29	-0,45	
24	NMR	2,52	-0,300	-2,20	-3,35	
28	HPLC	3,02	0,200	1,47	2,23	
52	HPLC	3,18	0,360	2,64	4,02	
61	HPLC	2,98	0,160	1,17	1,79	
65	enzymat. autom.	2,85	0,030	0,22	0,34	
72	enzymat. autom.	2,64	-0,180	-1,32	-2,01	
90	HPLC	2,74	-0,080	-0,59	-0,89	
102	IC	2,78	-0,040	-0,29	-0,45	

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

#### 4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) man.	2,95	0,163	1,21	1,84	
02	enz.(L-) man.	2,71	-0,085	-0,63	-0,96	
05	enz.(L-), autom.	2,62	-0,170	-1,26	-1,92	
06	enz.(L-), autom.	2,75	-0,038	-0,28	-0,43	
09	enz.(L-), autom.	2,83	0,040	0,30	0,45	
10	enz.(L-) man.	2,75	-0,040	-0,30	-0,45	
11	enz.(L-), autom.	2,83	0,040	0,30	0,45	
12	enz.(L-), autom.	2,48	-0,313	-2,31	-3,53	
16	enz.(L-), autom.	2,60	-0,190	-1,40	-2,14	
22	enz.(L-), autom.	2,69	-0,100	-0,74	-1,13	
27	enz.(L-), autom.	3,11	0,320	2,37	3,60	
32	enz.(L-), autom.	3,20	0,410	3,03	4,62	
40	enz.(L-), autom.	3,09	0,300	2,22	3,38	
42	enz.(L-), autom.	2,69	-0,100	-0,74	-1,13	
47	enz.(L-), autom.	2,81	0,020	0,15	0,23	
49	enz.(L-), autom.	3,18	0,390	2,88	4,39	
50	enz.(L-), autom.	3,01	0,220	1,63	2,48	
57	enz.(L-), autom.	3,30	0,510	3,77	5,75	(**)
58	enz.(L-), autom.	2,81	0,025	0,18	0,28	
61	enz.(L-), autom.	2,68	-0,108	-0,80	-1,22	
65	enz.(L-), autom.	2,80	0,010	0,07	0,11	
66	enz.(L-) man.	2,79	0,000	0,00	0,00	
70	enz.(L-), autom.	2,94	0,150	1,11	1,69	
72	enz.(L-), autom.	2,57	-0,220	-1,63	-2,48	
79	enz.(L-) man.	2,68	-0,110	-0,81	-1,24	
90	enz.(L-), autom.	2,79	0,000	0,00	0,00	
95	enz.(L-), autom.	2,71	-0,080	-0,59	-0,90	

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

#### 4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
202	FTIR	2,60	-0,235	-1,71	-1,08	
203	FTIR	2,30	-0,535	-3,90	-2,45	
204	FTIR	3,12	0,285	2,08	1,31	
205	FTIR	2,35	-0,485	-3,54	-2,22	
206	FTIR	2,93	0,095	0,69	0,44	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
208	FTIR	2,30	-0,535	-3,90	-2,45	
209	FTIR	2,75	-0,085	-0,62	-0,39	
210	FTIR	2,73	-0,105	-0,77	-0,48	
211	FTIR	2,50	-0,335	-2,44	-1,54	
213	FTIR	2,87	0,035	0,26	0,16	
215	FTIR	4,10	1,265	9,23	5,80	(**)
216	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
217	FTIR	2,87	0,035	0,26	0,16	
218	FTIR	4,63	1,795	13,09	8,23	(*)
219	FTIR	2,94	0,105	0,77	0,48	
220	FTIR	2,30	-0,535	-3,90	-2,45	
221	FTIR	2,66	-0,175	-1,28	-0,80	
222	FTIR	3,06	0,225	1,64	1,03	
223	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
224	FTIR	2,58	-0,255	-1,86	-1,17	
225	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
226	FTIR	2,67	-0,165	-1,20	-0,76	
227	FTIR	2,94	0,105	0,77	0,48	
228	FTIR	2,72	-0,115	-0,84	-0,53	
229	FTIR	2,88	0,045	0,33	0,21	
230	FTIR	3,40	0,565	4,12	2,59	
231	FTIR	3,23	0,395	2,88	1,81	
232	FTIR	2,80	-0,035	-0,26	-0,16	
234	FTIR	2,93	0,095	0,69	0,44	
236	FTIR	2,95	0,115	0,84	0,53	
238	FTIR	3,01	0,175	1,28	0,80	
239	FTIR	3,10	0,265	1,93	1,22	
242	FTIR	2,97	0,135	0,98	0,62	
243	FTIR	2,90	0,065	0,47	0,30	
244	FTIR	3,25	0,415	3,03	1,90	
245	FTIR	2,72	-0,115	-0,84	-0,53	
246	FTIR	2,30	-0,535	-3,90	-2,45	
247	FTIR	3,03	0,195	1,42	0,89	
248	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
249	FTIR	3,01	0,175	1,28	0,80	
251	FTIR	2,40	-0,435	-3,17	-2,00	
252	FTIR	2,34	-0,495	-3,61	-2,27	
254	FTIR	2,70	-0,135	-0,98	-0,62	
256	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
257	FTIR	2,90	0,065	0,47	0,30	
258	FTIR	2,95	0,115	0,84	0,53	
259	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
260	FTIR	2,96	0,125	0,91	0,57	
261	FTIR	2,94	0,105	0,77	0,48	
262	FTIR	2,29	-0,545	-3,98	-2,50	
263	FTIR	2,90	0,065	0,47	0,30	
264	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
266	FTIR	2,90	0,065	0,47	0,30	
267	FTIR	3,37	0,535	3,90	2,45	
268	FTIR	2,19	-0,645	-4,70	-2,96	
269	FTIR	3,20	0,365	2,66	1,67	
270	FTIR	2,86	0,025	0,18	0,11	
271	FTIR	2,90	0,065	0,47	0,30	
272	FTIR	1,96	-0,875	-6,38	-4,01	
273	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
274	FTIR	2,54	-0,295	-2,15	-1,35	
275	FTIR	3,10	0,265	1,93	1,22	
276	FTIR	2,76	-0,075	-0,55	-0,34	
277	FTIR	3,70	0,865	6,31	3,97	
278	FTIR	3,45	0,615	4,49	2,82	
279	FTIR	2,70	-0,135	-0,98	-0,62	
280	FTIR	3,03	0,195	1,42	0,89	
281	FTIR	3,03	0,195	1,42	0,89	
282	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	

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

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



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
283	FTIR	2,84	0,005	0,04	0,02	
284	FTIR	1,85	-0,985	-7,18	-4,52	
285	FTIR	1,66	-1,175	-8,57	-5,39	(**)
286	FTIR	2,60	-0,235	-1,71	-1,08	
320	FTIR	2,30	-0,535	-3,90	-2,45	
321	FTIR	2,78	-0,055	-0,40	-0,25	
339	FTIR	2,70	-0,135	-0,98	-0,62	
346	FTIR	3,00	0,165	1,20	0,76	
351	FTIR	1,90	-0,935	-6,82	-4,29	
366	FTIR	2,40	-0,435	-3,17	-2,00	

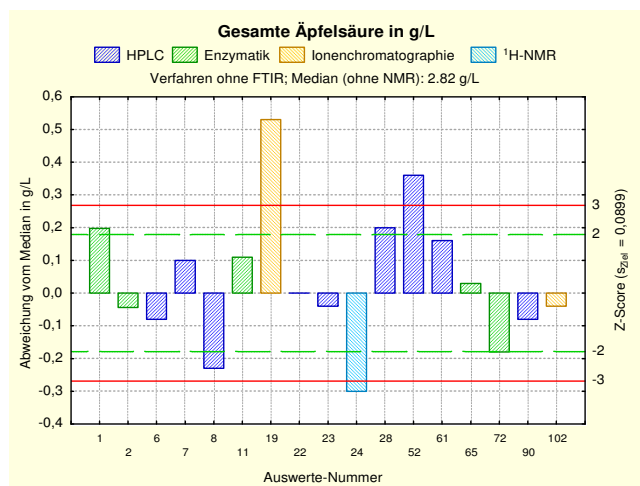
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

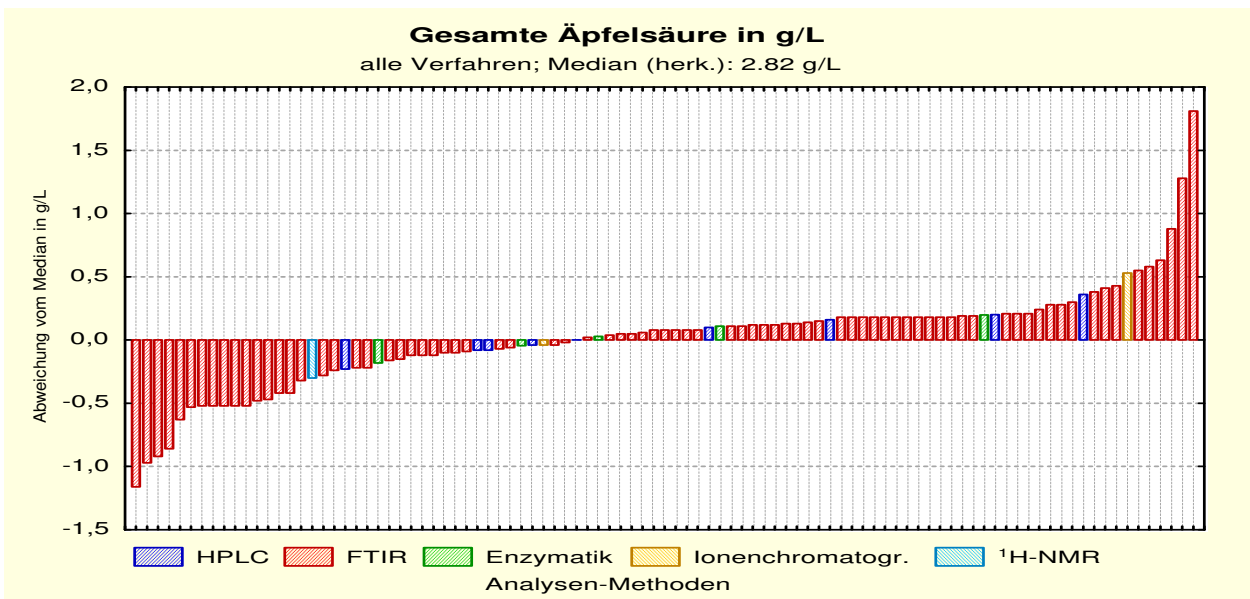
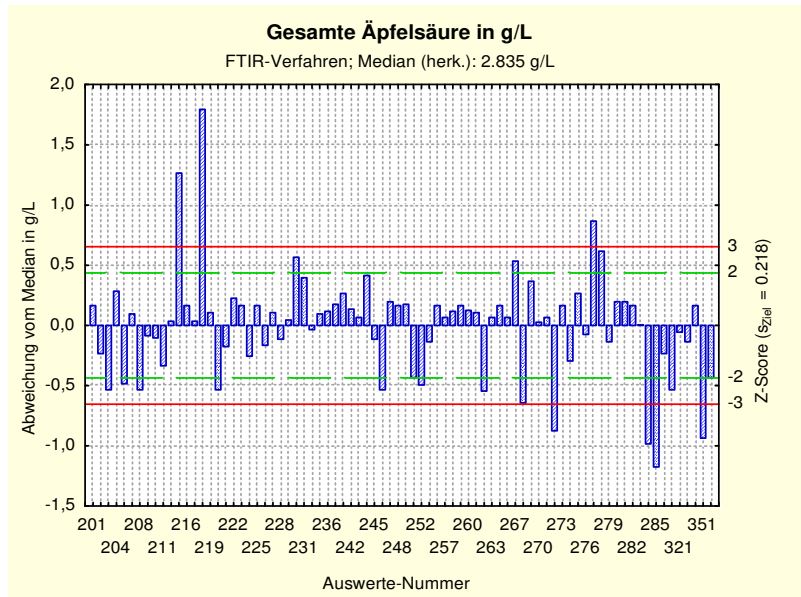
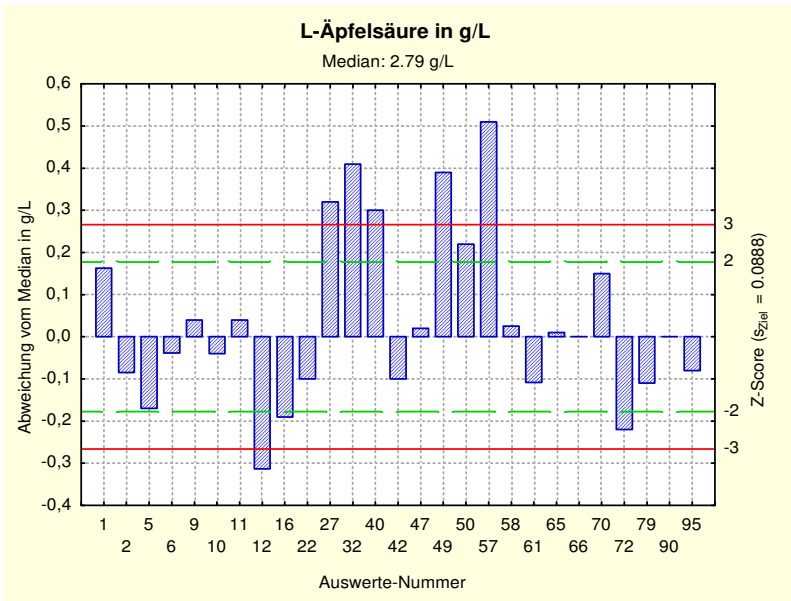
**4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	16	15	27	26
Minimalwert	2,59	2,59	2,48	2,48
Mittelwert	2,882	2,851	2,829	2,811
Median	2,835	2,820	2,790	2,790
Maximalwert	3,35	3,18	3,30	3,20
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,197	0,157	0,206	0,187
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,049	0,041	0,040	0,037
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,137	0,136	0,135	0,135
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,090	0,090	0,089	0,089
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218	0,218		
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,43	1,15	1,52	1,38
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	2,19	1,76	2,32	2,11
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,90	0,72		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,36	0,30	0,29	0,27
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,55	0,45	0,45	0,41
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,23	0,19		

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	2,861	0,196
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, automatisiert	3	2,817	0,150
enzymat. man.	D- und L-Äpfelsäure, manuell	2	2,897	0,194
IC	Ionenchromatographie	2	3,065	0,457
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	16	2,868	0,187
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	2,825	0,343
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,520	
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	22	2,834	0,238
enz.(L-) man.	enzymatisch nur L-Form , manuell	5	2,775	0,120
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	27	2,817	0,204





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

### 4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,111	-0,098	-6,55	(**)
02	enzymat. Hand	0,204	-0,005	-0,33	
05	enzymat. autom.	0,170	-0,039	-2,61	
06	enzymat. autom.	0,219	0,010	0,67	
07	HPLC	0,228	0,019	1,27	
09	enzymat. autom.	0,210	0,001	0,07	
10	enzymat. Hand	0,209	0,000	0,00	
11	enzymat. autom.	0,240	0,031	2,07	
12	enzymat. autom.	0,176	-0,033	-2,21	
19	IC	0,200	-0,009	-0,60	
22	enzymat. autom.	0,305	0,096	6,42	(**)
23	HPLC	0,190	-0,019	-1,27	
24	NMR	0,220	0,011	0,74	
28	HPLC	0,210	0,001	0,07	
41	HPLC	<0,2			
52	HPLC	0,060	-0,149	-9,96	(*)
61	HPLC	0,260	0,051	3,41	
65	enzymat. autom.	0,233	0,024	1,60	
66	enzymat. Hand	0,210	0,001	0,07	
72	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	
90	HPLC	0,175	-0,034	-2,27	
95	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	

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

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

### 4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	n.b. (< 0,16)				
02	enz.(L-) Hand	0,107	-0,003	-0,35	-0,13	
05	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
06	enz.(L-) autom.	0,117	0,007	0,81	0,31	
09	enz.(L-) autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	
10	enz.(L-) Hand	0,106	-0,004	-0,46	-0,18	
11	enz.(L-) autom.	0,132	0,022	2,54	0,98	
12	enz.(L-) autom.	0,094	-0,016	-1,87	-0,72	
16	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
22	enz.(L-) autom.	0,162	0,052	5,99	2,31	
27	enz.(L-) autom.	nn <sup>*)</sup>				
32	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
40	enz.(L-) autom.	0,160	0,050	5,76	2,22	
47	enz.(L-) autom.	0,190	0,080	9,22	3,55	
49	enz.(L-) autom.	0,160	0,050	5,76	2,22	
50	enz.(L-) autom.	0,100	-0,010	-1,15	-0,44	
58	enz.(L-) autom.	0,118	0,008	0,92	0,36	
61	enz.(L-) autom.	0,126	0,016	1,84	0,71	
65	enz.(L-) autom.	0,129	0,019	2,19	0,84	
66	enz.(L-) Hand	0,101	-0,009	-1,04	-0,40	
70	enz.(L-) autom.	0,097	-0,013	-1,50	-0,58	
72	enz.(L-) autom.	0,090	-0,020	-2,31	-0,89	
79	enz.(L-) Hand	0,108	-0,002	-0,23	-0,09	
90	enz.(L-) autom.	0,125	0,015	1,73	0,67	
95	enz.(L-) autom.	0,110	0,000	0,00	0,00	

<sup>\*)</sup> Die Form "nn" zur Mitteilung des Unterschreitens der Nachweis- oder Bestimmungsgrenze ist ohne Nennung des zugehörigen Zahlenwertes nicht korrekt, weil nicht auf Richtigkeit überprüfbar.

**4.14.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,300	0,091			
202	FTIR	0,260	0,051			
203	FTIR	0,100	-0,109			(*)
204	FTIR	-0,190	-0,399			(*)
205	FTIR	0,160	-0,049			
206	FTIR	0,160	-0,049			
208	FTIR	<0,3				
209	FTIR	<0,2				
210	FTIR	0,120	-0,089			
211	FTIR	0,300	0,091			
213	FTIR	0,440	0,231			(*)
215	FTIR	<= 0				
216	FTIR	0,310	0,101			(*)
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	0,180	-0,029			
219	FTIR	0,330	0,121			(*)
220	FTIR	0,300	0,091			
221	FTIR	0,140	-0,069			
222	FTIR	0,320	0,111			(*)
223	FTIR	0,350	0,141			(*)
224	FTIR	0,250	0,041			
225	FTIR	0,200	-0,009			
226	FTIR	0,090	-0,119			(*)
227	FTIR	0,250	0,041			
228	FTIR	0,240	0,031			
229	FTIR	0,080	-0,129			(*)
230	FTIR	0,240	0,031			
231	FTIR	0,030	-0,179			(*)
232	FTIR	0,100	-0,109			(*)
234	FTIR	<= 0				
236	FTIR	0,350	0,141			(*)
238	FTIR	<= 0				
239	FTIR	<= 0				
242	FTIR	0,160	-0,049			
243	FTIR	0,100	-0,109			(*)
244	FTIR	0,380	0,171			(*)
245	FTIR	0,090	-0,119			(*)
246	FTIR	<= 0				
247	FTIR	0,130	-0,079			
248	FTIR	0,200	-0,009			
249	FTIR	0,180	-0,029			
251	FTIR	0,200	-0,009			
252	FTIR	-0,140	-0,349			(*)
254	FTIR	0,100	-0,109			(*)
256	FTIR	0,200	-0,009			
257	FTIR	0,100	-0,109			(*)
258	FTIR	0,080	-0,129			(*)
259	FTIR	0,130	-0,079			
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,110	-0,099			
262	FTIR	-0,010	-0,219			(*)
263	FTIR	0,500	0,291			(*)
264	FTIR	<= 0				
266	FTIR	-0,500	-0,709			(*)
267	FTIR	0,270	0,061			
268	FTIR	0,400	0,191			(*)
269	FTIR	0,200	-0,009			
270	FTIR	0,050	-0,159			(*)
271	FTIR	0,400	0,191			(*)
272	FTIR	0,240	0,031			
273	FTIR	0,300	0,091			
274	FTIR	0,400	0,191			(*)
275	FTIR	0,400	0,191			(*)
276	FTIR	0,170	-0,039			
277	FTIR	0,100	-0,109			(*)

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	-0,320	-0,529			(*)
279	FTIR	0,100	-0,109			(*)
281	FTIR	0,250	0,041			
282	FTIR	0,300	0,091			
283	FTIR	0,050	-0,159			(*)
284	FTIR	0,630	0,421			(*)
285	FTIR	0,120	-0,089			
286	FTIR	0,200	-0,009			
320	FTIR	0,100	-0,109			(*)
321	FTIR	0,550	0,341			(*)
339	FTIR	0,200	-0,009			
346	FTIR	<= 0				
351	FTIR	0,500	0,291			(*)
366	FTIR	<= 0				

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

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

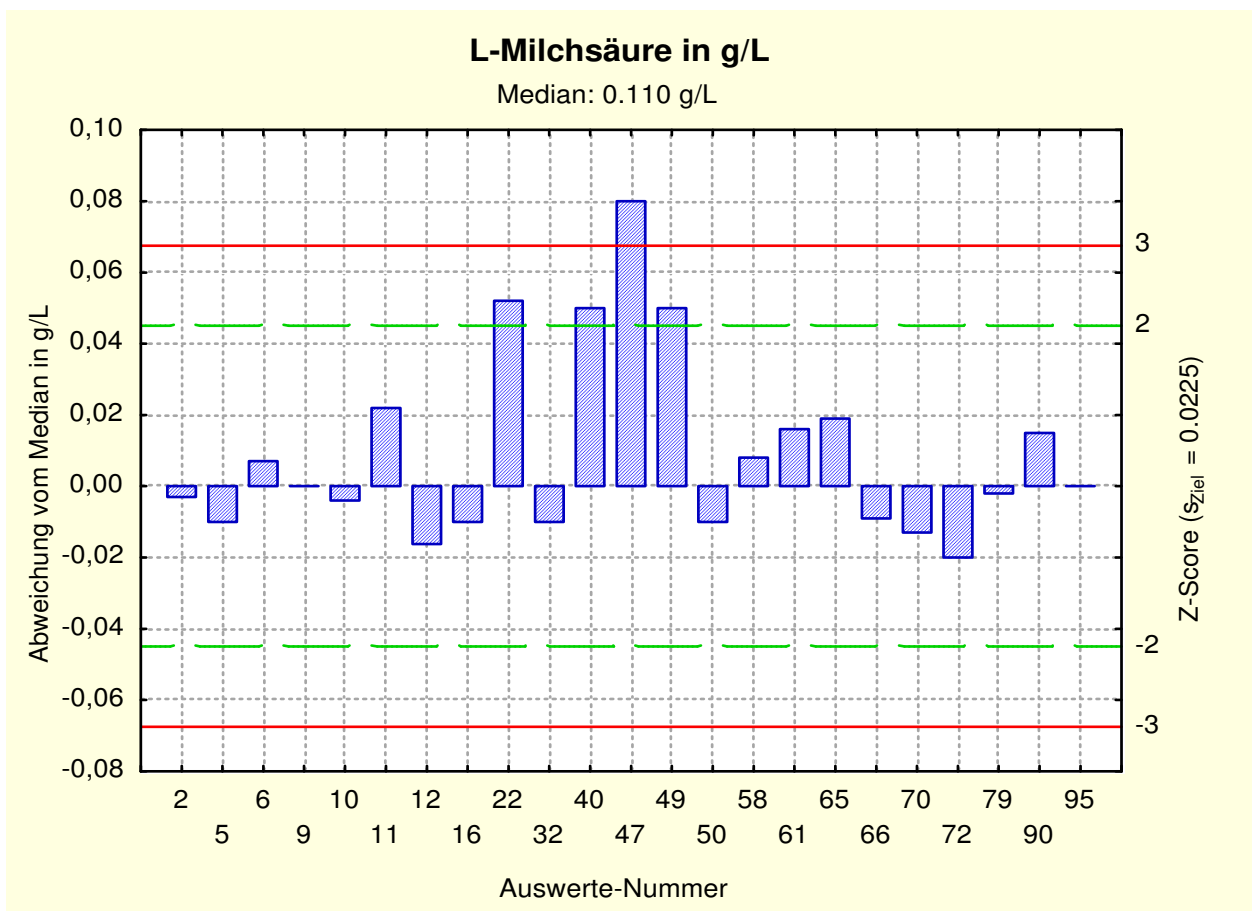
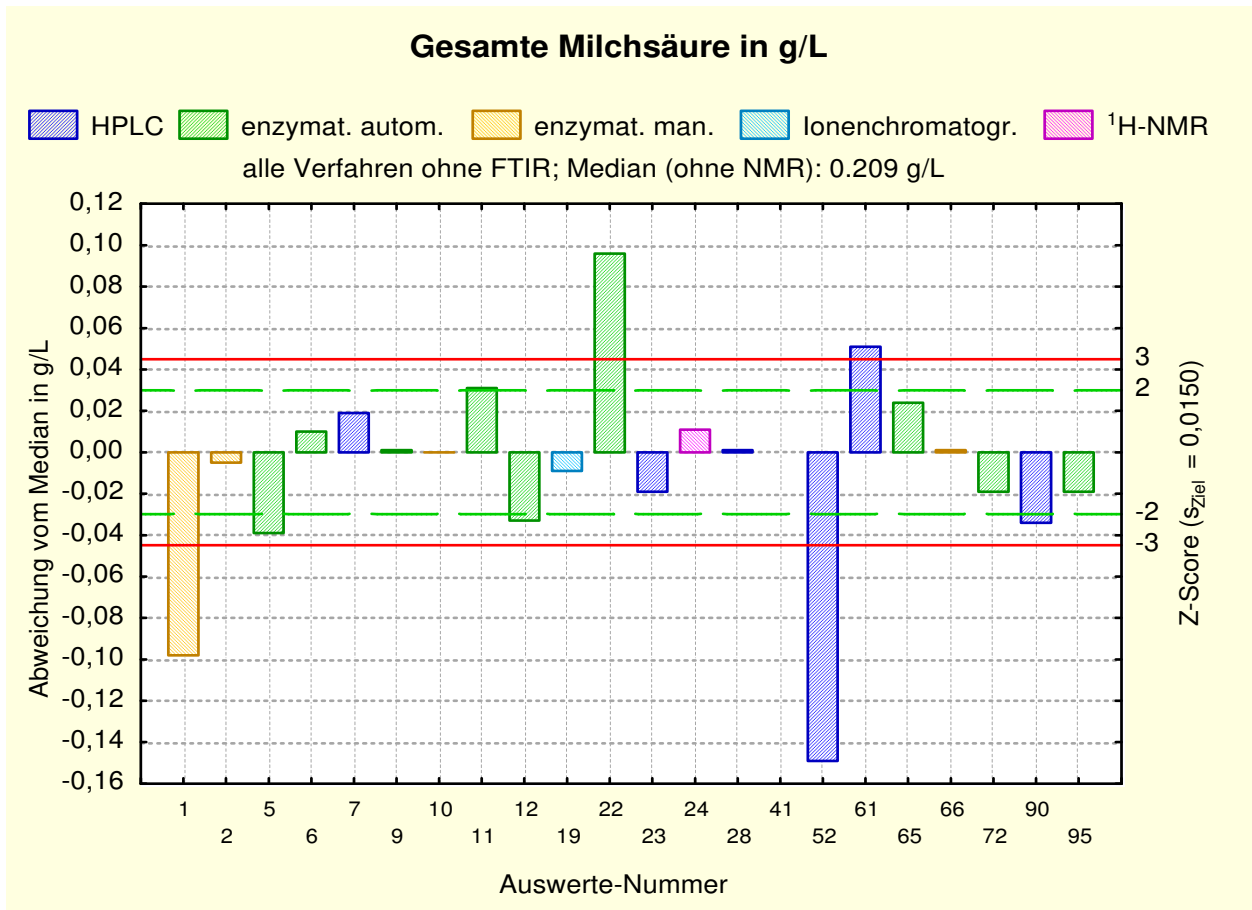
**Keine Berechnung von Z-Score, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereichs.**

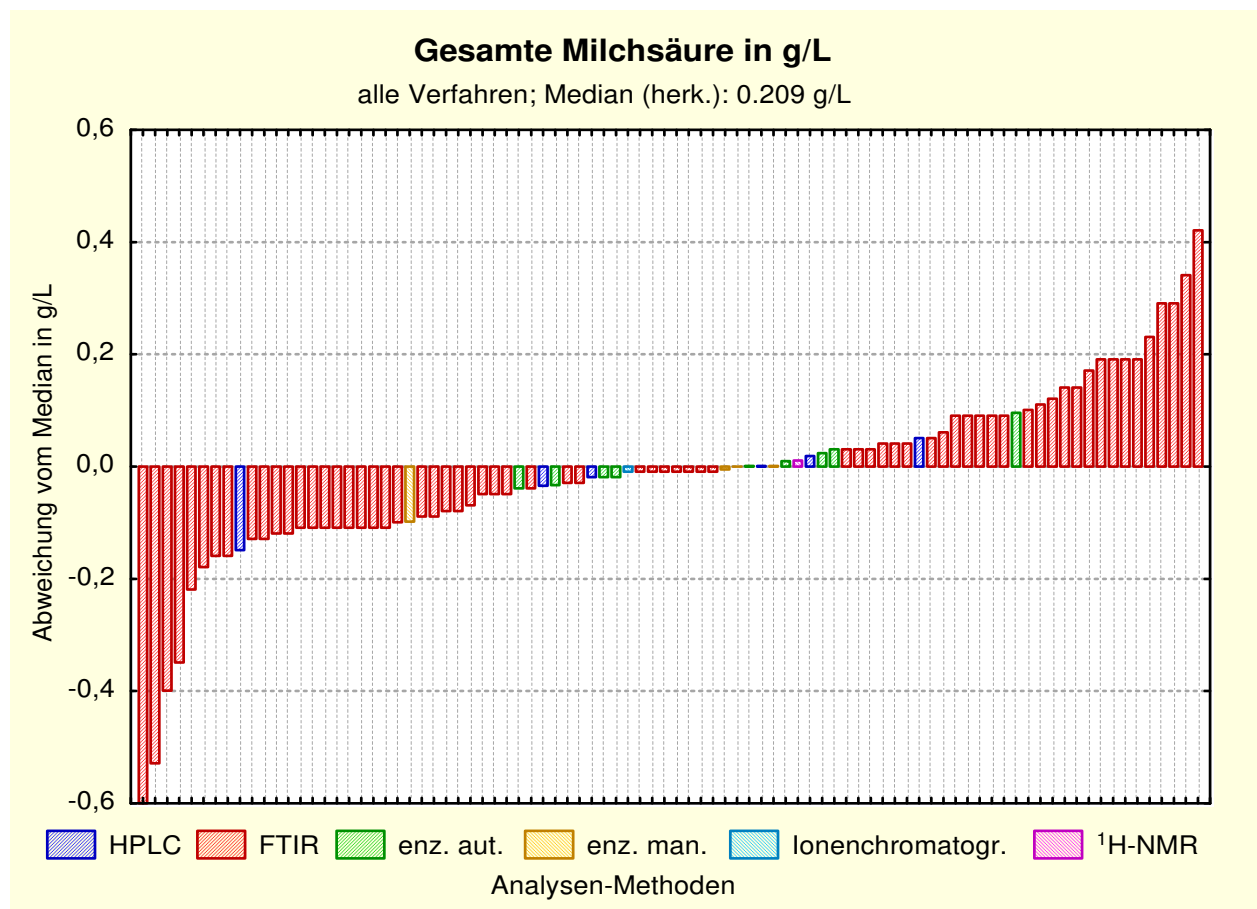
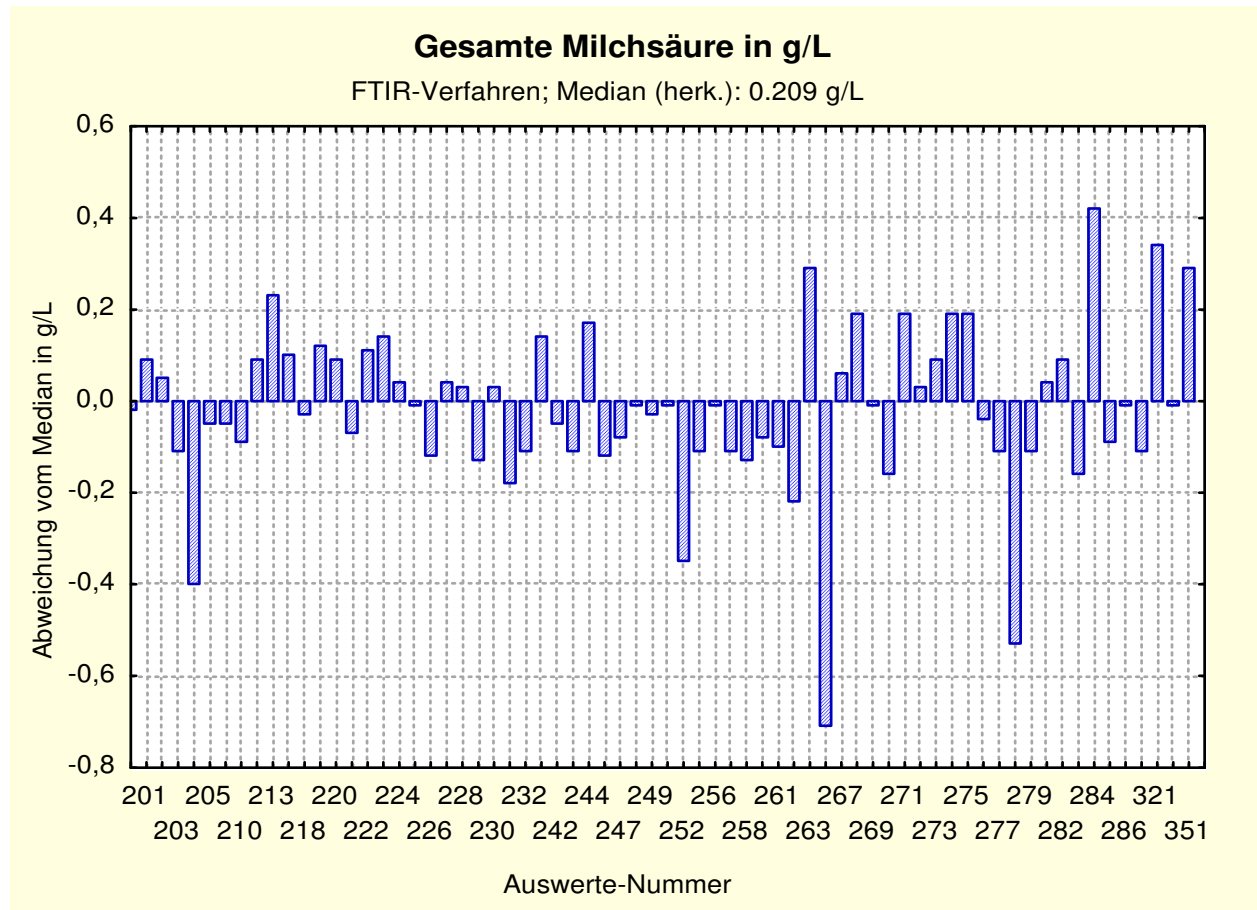
**4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	19	17	23
Minimalwert	0,11	0,17	0,09
Mittelwert	0,207	0,207	0,119
Median	0,209	0,209	0,110
Maximalwert	0,30	0,26	0,19
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,040	0,024	0,026
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,009	0,006	0,005
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,015	0,015	0,009
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,023
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,209	0,209	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,65	1,63	3,00
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			1,16
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,19	0,12	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,61	0,39	0,63
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)			0,24
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,04	0,03	

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	0,1944	0,0601
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	9	0,2102	0,0358
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	4	0,1849	0,0517
IC	Ionenchromatographie	1	0,2000	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	20	0,2034	0,0334
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	67	0,2030	0,1440
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,2200	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	0,1206	0,0279
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	0,1056	0,0032
	alle Verfahren L-Milchsäure	23	0,1156	0,0210





## 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	
14	Glyoxal/potentiometr.	6,8	1,80	2,87	
15	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
16	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
18	Glyoxal/Stärke	<=0			
19	Glyoxal/potentiometr.	3,6	-1,40	-2,23	
20	Glyoxal/Stärke	3,5	-1,50	-2,39	
22	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
24	Glyoxal/Stärke	10,0	5,00	7,96	(*)
25	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
27	Glyoxal/potentiometr.	6,9	1,88	2,99	
28	Propionaldehyd/Stärke	6,0	1,00	1,59	
32	Glyoxal/Stärke	6,0	1,00	1,59	
41	Glyoxal/potentiometr.	<3			
42	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
44	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
45	Glyoxal/Stärke	<3			
46	Glyoxal/potentiometr.	6,3	1,25	1,99	
53	Glyoxal/Stärke	<=0			
58	Glyoxal/MTT	0,2	-4,80	-7,64	(*)
61	Acetaldehyd/potent.	7,3	2,30	3,66	
62	Glyoxal/potentiometr.	8,0	3,00	4,78	
63	Glyoxal/Stärke	7,0	2,00	3,19	
66	Glyoxal/Stärke	<=0			
67	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
68	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
71	Glyoxal/potentiometr.	6,0	1,00	1,59	
72	Glyoxal/potentiometr.	5,0	0,00	0,00	
75	k. A.	10,0	5,00	7,96	(*)
77	Glyoxal/potentiometr.	7,0	2,00	3,19	
78	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
79	Acetaldehyd/Stärke	5,0	0,00	0,00	
81	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
83	Glyoxal/Stärke	<=0			
86	Propionaldehyd/Stärke	5,0	0,00	0,00	
109	Glyoxal/potentiometr.	<=0			

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben bei Berechnungen unberücksichtigt.  
 <= 0: Fehlerhafte Form "0" der Mitteilung eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

#### Anmerkungen:

Die Bestimmung der Reduktone war freigestellt, da das Weißwein-Prüfgut keine Ascorbinsäure enthielt. Da der Quotient  $s_L/s_H$  erheblich über 2,0 und der Quotient  $u_M/s_H$  bei 0,5 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Beschreibung der Laborleistung dar und sind daher in grauer Schriftfarbe dargestellt.

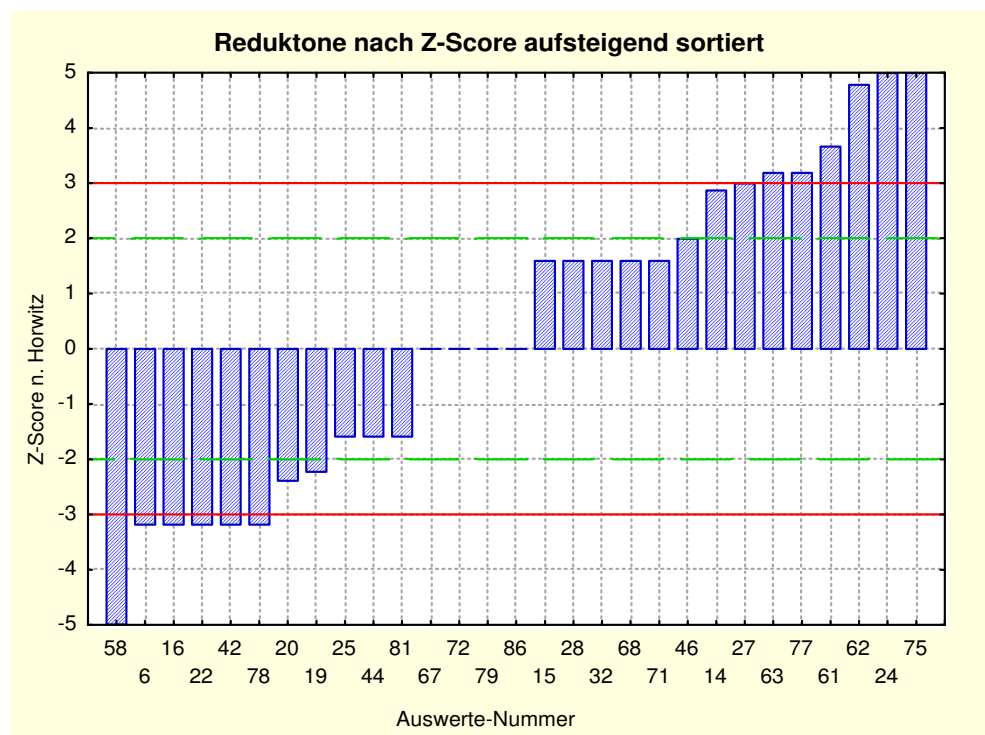
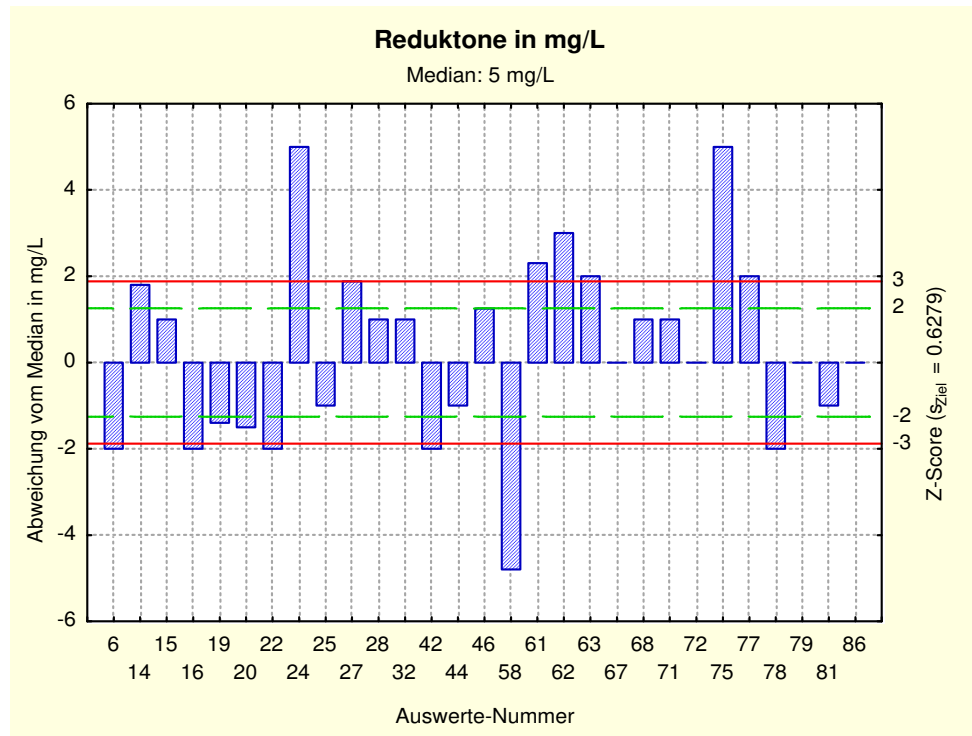
### 4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	26
Minimalwert	3,0
Mittelwert	5,13
Median	5,00
Maximalwert	8,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,580
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,310
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,628
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,52
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,49
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	



### 4.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	5,00	
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	5,15	3,45
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	2	5,50	0,80
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	10	4,69	1,82
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	12	5,67	1,79
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	10,00	
k. A.	keine Angabe	1	0,20	
alle Verfahren		29	5,25	2,04



## 4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	49,0	7,85	2,09	
06	LwK 6.2	36,2	-4,95	-1,32	
07	LwK 6.2	40,0	-1,15	-0,31	
10	LwK 6.2	42,6	1,45	0,39	
11	LwK 6.2	44,0	2,85	0,76	
12	LwK 6.2	45,6	4,45	1,18	
29	LwK 6.2	39,8	-1,35	-0,36	
49	LwK 6.3	47,0	5,85	1,55	
50	LwK 6.3	37,0	-4,15	-1,10	
55	LwK 6.3	43,0	1,85	0,49	
57	LwK 6.4	37,0	-4,15	-1,10	
58	LwK 6.4	42,2	1,05	0,28	
65	LwK 6.2	37,0	-4,15	-1,10	
70	LwK 6.4	42,0	0,85	0,23	
91	LwK 6.2 m	50,2	9,09	2,42	
95	LwK 6.2	41,3	0,15	0,04	
104	LwK 6.3	49,0	7,85	2,09	
106	LwK 6.2	41,8	0,65	0,17	
107	LwK 6.3	35,4	-5,75	-1,53	
206	LwK 6.5	32,0	-9,15	-2,43	
207	LwK 6.5	43,0	1,85	0,49	
210	LwK 6.5	47,3	6,15	1,63	
219	LwK 6.5	38,0	-3,15	-0,84	
226	LwK 6.5	41,0	-0,15	-0,04	
239	LwK 6.5	39,0	-2,15	-0,57	
253	LwK 6.5	41,0	-0,15	-0,04	
254	LwK 6.5	40,0	-1,15	-0,31	
260	LwK 6.5	55,8	14,65	3,89	
264	LwK 6.5	35,0	-6,15	-1,63	
265	LwK 6.5	37,0	-4,15	-1,10	
270	LwK 6.5	40,0	-1,15	-0,31	
273	LwK 6.5	42,0	0,85	0,23	
320	LwK 6.5	39,0	-2,15	-0,57	
339	LwK 6.5	37,0	-4,15	-1,10	
351	LwK 6.5	50,0	8,85	2,35	
366	LwK 6.5	47,0	5,85	1,55	

### 4.16.2 Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	47,0	5,00	1,31	
14	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,9	4,90	1,28	
15	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	8,00	2,09	
16	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-5,00	-1,31	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	7,00	1,83	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,4	-1,60	-0,42	
20	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-3,00	-0,78	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,0	-1,00	-0,26	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	0,00	0,00	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	47,0	5,00	1,31	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	18,00	4,70	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-5,00	-1,31	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,1	-0,85	-0,22	
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	9,00	2,35	
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-3,00	-0,78	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	4,00	1,04	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,0	1,00	0,26	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,0	-1,00	-0,26	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,2	1,20	0,31	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-5,00	-1,31	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-3,00	-0,78	
45	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	4,00	1,04	
46	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,9	-5,12	-1,34	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-5,00	-1,31	
53	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	-2,00	-0,52	
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	-4,00	-1,04	
61	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	8,00	2,09	
62	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-6,00	-1,57	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	8,00	2,09	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	9,00	2,35	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	7,00	1,83	
71	LwK 6.1 (incl.Red.)	54,0	12,00	3,13	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,0	1,00	0,26	
73	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	-2,00	-0,52	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	47,0	5,00	1,31	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	48,0	6,00	1,57	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	48,0	6,00	1,57	
79	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	-2,00	-0,52	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	52,0	10,00	2,61	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,0	-1,00	-0,26	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	-2,00	-0,52	
86	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,0	-8,00	-2,09	
98	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-3,00	-0,78	
109	Redox incl.	42,0	0,00	0,00	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

**4.16.3 Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,1	3,10	0,90	0,81	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	44,0	7,00	2,04	1,83	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	-3,00	-0,87	-0,78	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	12,00	3,49	3,13	
19	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,8	-0,20	-0,06	-0,05	
20	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,5	-1,50	-0,44	-0,39	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	2,00	0,58	0,52	
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	13,00	3,78	3,40	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,0	-4,00	-1,16	-1,04	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,3	-2,73	-0,79	-0,71	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	8,00	2,33	2,09	
32	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,0	-4,00	-1,16	-1,04	
42	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	-3,00	-0,87	-0,78	
44	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-2,00	-0,58	-0,52	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,6	-6,37	-1,85	-1,66	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	42,7	5,70	1,66	1,49	
62	LwK 6.1 (excl.Red.)	28,0	-9,00	-2,62	-2,35	
63	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-2,00	-0,58	-0,52	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,0	9,00	2,62	2,35	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	6,00	1,75	1,57	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	48,0	11,00	3,20	2,87	
72	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,0	1,00	0,29	0,26	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	0,00	0,00	0,00	
77	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	4,00	1,16	1,04	
78	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	8,00	2,33	2,09	
79	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	-2,00	-0,58	-0,52	
81	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	0,00	0,00	0,00	
86	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	-8,00	-2,33	-2,09	

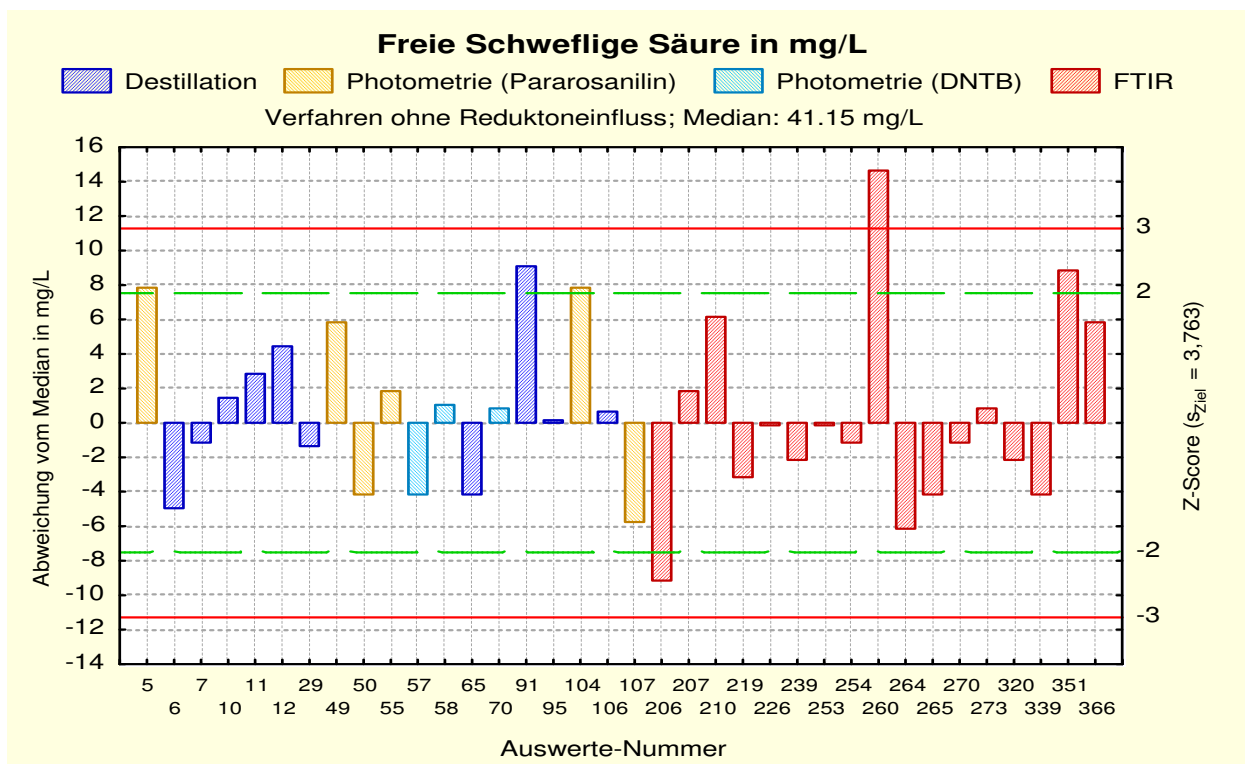
**4.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

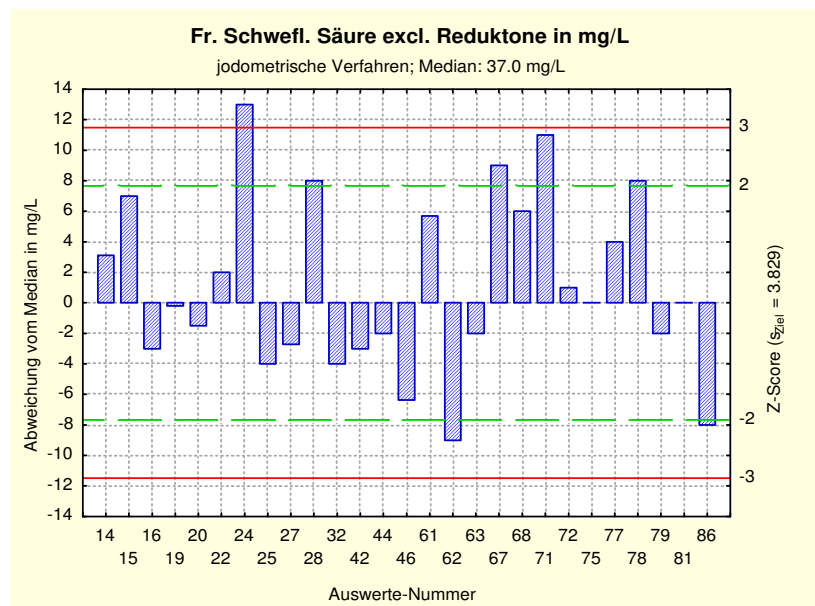
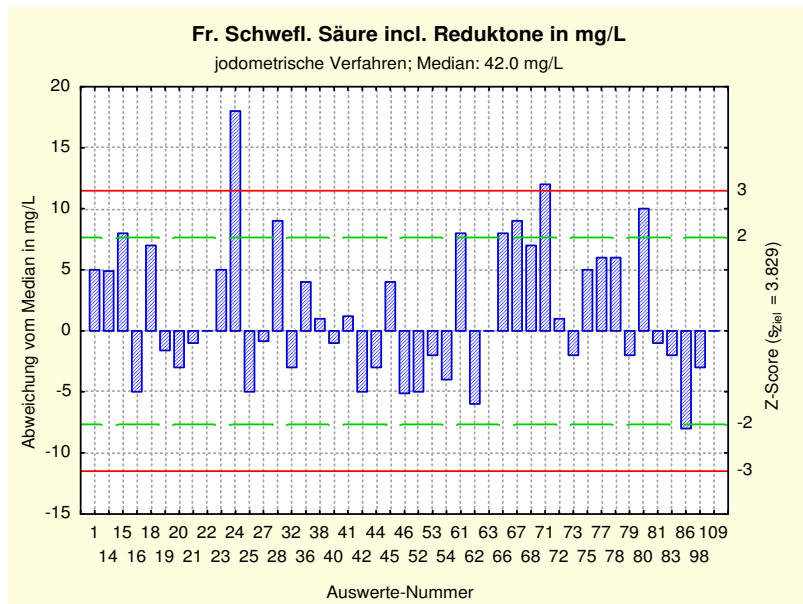
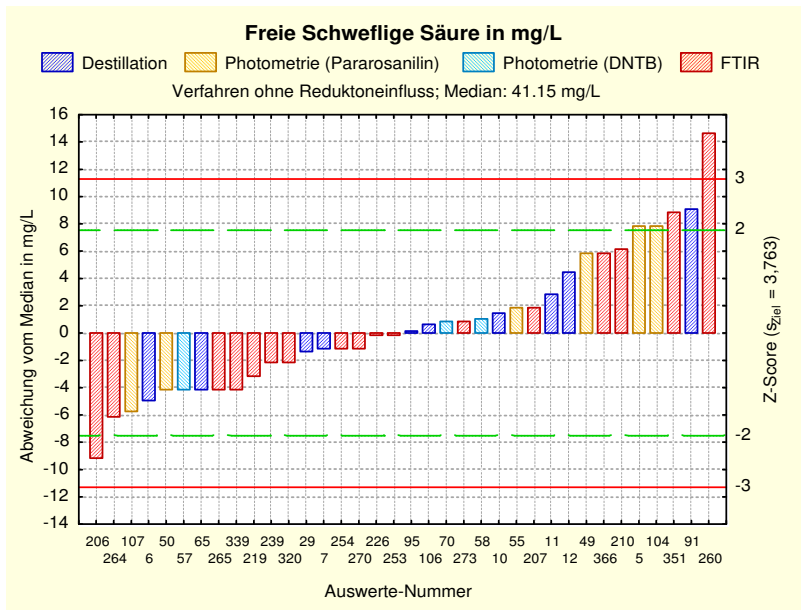
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	19	36	45	27
Minimalwert	35,4	32,0	34,0	28,0
Mittelwert	42,11	41,78	43,57	38,11
Median	42,00	41,15	42,00	37,00
Maximalwert	50,2	55,8	60,0	50,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	4,537	5,129	5,674	5,788
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,041	0,855	0,846	1,114
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	3,829	3,763	3,829	3,438
- n. Horwitz incl. Reduktone <sup>1)</sup> (s <sub>H</sub> incl. Red.)				3,829
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,19	1,36	1,48	1,68
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )				1,51
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,27	0,23	0,22	0,32
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)				0,29

<sup>1)</sup> Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone (s<sub>H</sub> incl. Red.)

**4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1(incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	44	43,40	5,934
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	42,00	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	45	43,36	5,853
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B mit Abzug der Reduktone	27	38,01	6,247
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	40,97	3,208
LwK 6.2 m	- modifiziert: 10 ml Probe, 5 ml 15 %ige Phosphorsäure	1	50,24	
LwK 6.3	Pararosanilimethode	6	43,52	6,612
LwK 6.4	DNTB-Verfahren, z.B. FOSS FIAstar	3	40,76	2,637
	Destillations- und photometrische Verfahren	19	42,09	5,088
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	17	40,94	5,220
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	36	41,61	5,152





## 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	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
02	LwK 7.1	108,4	-4,10	-0,46	-0,77	
04	LwK 7.3	145,6	33,10	3,74	6,18	(**)
05	LwK 7.7	134,0	21,50	2,43	4,01	
06	LwK 7.3	101,0	-11,50	-1,30	-2,15	
07	LwK 7.3	114,0	1,50	0,17	0,28	
09	LwK 7.3	105,8	-6,70	-0,76	-1,25	
10	LwK 7.3	114,8	2,30	0,26	0,43	
11	LwK 7.3	126,0	13,50	1,53	2,52	
12	LwK 7.3	118,2	5,74	0,65	1,07	
14	LwK 7.4.2	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
15	LwK 7.4.2	122,0	9,50	1,07	1,77	
16	LwK 7.4.1	113,0	0,50	0,06	0,09	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,0	3,50	0,40	0,65	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,3	-1,20	-0,14	-0,22	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
21	LwK 7.4.2	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	12,50	1,41	2,33	
24	LwK 7.4.2m	130,0	17,50	1,98	3,27	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
27	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	4,50	0,51	0,84	
29	LwK 7.3	131,6	19,10	2,16	3,57	
32	LwK 7.4.1	109,0	-3,50	-0,40	-0,65	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	2,50	0,28	0,47	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	1233,0	1120,50	126,73	209,16	(*)
40	LwK 7.7	119,0	6,50	0,74	1,21	
41	LwK 7.4.2	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
42	LwK 7.4.1	104,0	-8,50	-0,96	-1,59	
44	LwK 7.4.2	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
45	LwK 7.5.3(incl. Red.)	125,0	12,50	1,41	2,33	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,5	-0,05	-0,01	-0,01	
47	LwK 7.4.2	113,0	0,50	0,06	0,09	
49	LwK 7.4.2	115,0	2,50	0,28	0,47	
50	LwK 7.7	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
52	LwK 7.4.2	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
53	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
55	LwK 7.4.1	118,0	5,50	0,62	1,03	
57	LwK 7.7	98,0	-14,50	-1,64	-2,71	
58	LwK 7.7	119,0	6,50	0,74	1,21	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,4	6,90	0,78	1,29	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
65	IFU 7	113,0	0,50	0,06	0,09	
66	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	118,0	5,50	0,62	1,03	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	2,50	0,28	0,47	
70	LwK 7.4.2	119,0	6,50	0,74	1,21	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	15,50	1,75	2,89	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	114,0	1,50	0,17	0,28	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	8,50	0,96	1,59	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	5,50	0,62	1,03	
79	LwK 7.4.1	106,5	-6,00	-0,68	-1,12	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	8,50	0,96	1,59	
81	LwK 7.5.3(incl. Red.)	107,0	-5,50	-0,62	-1,03	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	

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

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

**Fortsetzung Laborergebnisse (wie mitgeteilt)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
91	LwK 7.3 m	135,0	22,54	2,55	4,21	
92	LwK 7.4.2	113,0	0,50	0,06	0,09	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,9	9,40	1,06	1,75	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
95	LwK 7.3	101,5	-11,00	-1,24	-2,05	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,7	4,17	0,47	0,78	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	-8,50	-0,96	-1,59	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
101	LwK 7.4.2	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
104	LwK 7.6	113,0	0,50	0,06	0,09	
105	LwK 7.7	120,0	7,50	0,85	1,40	
106	LwK 7.3	115,7	3,20	0,36	0,60	
107	LwK 7.6	121,0	8,50	0,96	1,59	
109	Redox	114,0	1,50	0,17	0,28	
206	LwK 7.8	102,0	-10,50	-1,19	-1,96	
207	LwK 7.8	117,0	4,50	0,51	0,84	
208	LwK 7.8	92,0	-20,50	-2,32	-3,83	
209	LwK 7.8	118,8	6,30	0,71	1,18	
210	LwK 7.8	126,4	13,90	1,57	2,59	
219	LwK 7.8	98,0	-14,50	-1,64	-2,71	
226	LwK 7.8	121,0	8,50	0,96	1,59	
239	LwK 7.8	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
253	LwK 7.8	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
254	LwK 7.8	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
260	LwK 7.8	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
264	LwK 7.8	114,0	1,50	0,17	0,28	
265	LwK 7.8	113,0	0,50	0,06	0,09	
270	LwK 7.8	140,0	27,50	3,11	5,13	(**)
273	LwK 7.8	98,0	-14,50	-1,64	-2,71	
320	LwK 7.8	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
339	LwK 7.8	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
351	LwK 7.8	120,0	7,50	0,85	1,40	
366	LwK 7.8	127,0	14,50	1,64	2,71	

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

**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.)	116,0	2,00	0,22	0,37	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,3	-2,70	-0,30	-0,50	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-6,00	-0,67	-1,12	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	11,00	1,23	2,05	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	-9,00	-1,01	-1,68	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	3,00	0,34	0,56	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	1,00	0,11	0,19	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	1233,0	1119,00	125,14	208,88	(*)
45	LwK 7.5.3(incl. Red.)	125,0	11,00	1,23	2,05	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,5	-1,55	-0,17	-0,29	
53	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-8,00	-0,89	-1,49	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	108,0	-6,00	-0,67	-1,12	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,4	5,40	0,60	1,01	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	-2,00	-0,22	-0,37	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-6,00	-0,67	-1,12	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	118,0	4,00	0,45	0,75	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	1,00	0,11	0,19	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	14,00	1,57	2,61	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,0	5,00	0,56	0,93	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt bei Berechnungen unberücksichtigt.  
rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

**Fortsetzung Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	7,00	0,78	1,31	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-6,00	-0,67	-1,12	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	4,00	0,45	0,75	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	7,00	0,78	1,31	
81	LwK 7.5.3(incl. Red.)	107,0	-7,00	-0,78	-1,31	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	110,0	-4,00	-0,45	-0,75	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-8,00	-0,89	-1,49	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,9	7,90	0,88	1,47	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	110,0	-4,00	-0,45	-0,75	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-4,00	-0,45	-0,75	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,7	2,67	0,30	0,50	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	-10,00	-1,12	-1,87	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	-3,00	-0,34	-0,56	
109	Redox incl.	114,0	0,00	0,00	0,00	

**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.)	107,7	-0,65	-0,08	-0,12	
20	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,5	-3,85	-0,45	-0,72	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	2,65	0,31	0,49	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	-7,35	-0,86	-1,37	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	2,65	0,31	0,49	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,2	-2,15	-0,25	-0,40	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,1	3,75	0,44	0,70	
62	LwK 7.5.2(excl. Red.)	104,0	-4,35	-0,51	-0,81	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	-7,35	-0,86	-1,37	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	113,0	4,65	0,54	0,87	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	0,65	0,08	0,12	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	122,0	13,65	1,59	2,55	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	114,0	5,65	0,66	1,05	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	2,65	0,31	0,49	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	-7,35	-0,86	-1,37	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	115,0	6,65	0,78	1,24	
81	LwK 7.5.3(excl. Red.)	103,0	-5,35	-0,62	-1,00	
86	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	-7,35	-0,86	-1,37	
93	LwK 7.5.1(excl. Red.)	115,1	6,75	0,79	1,26	
94	LwK 7.5.2(excl. Red.)	107,0	-1,35	-0,16	-0,25	
97	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,8	1,44	0,17	0,27	
99	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-3,35	-0,39	-0,63	

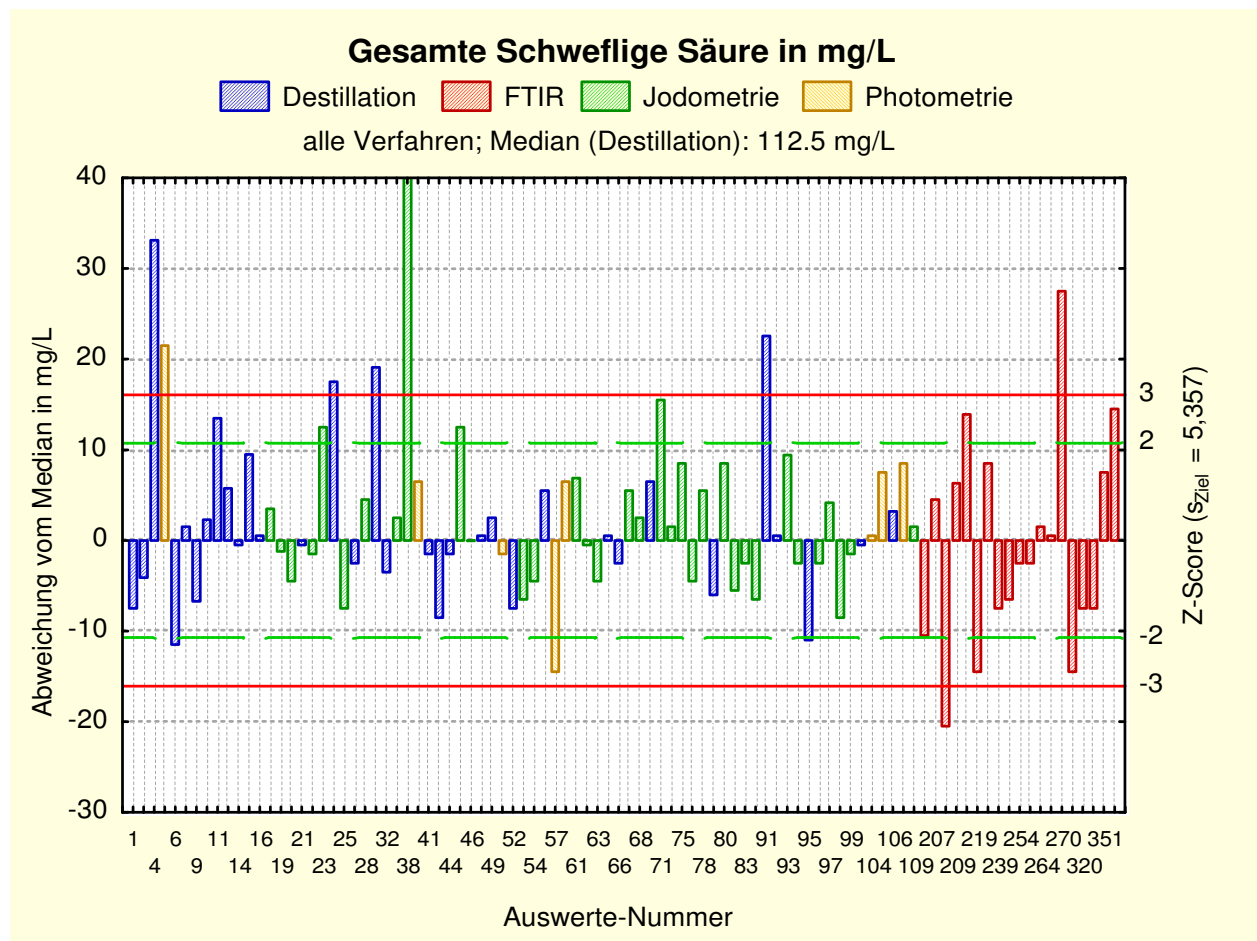
**4.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

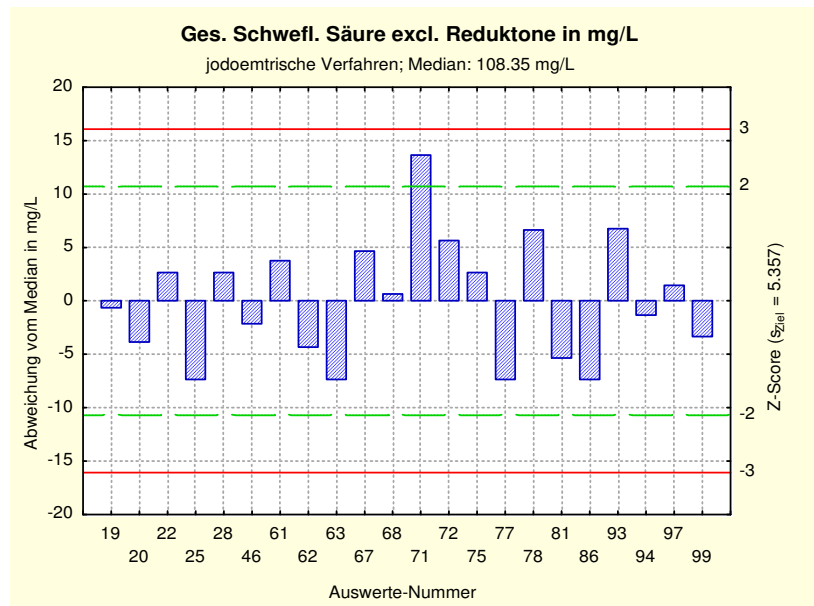
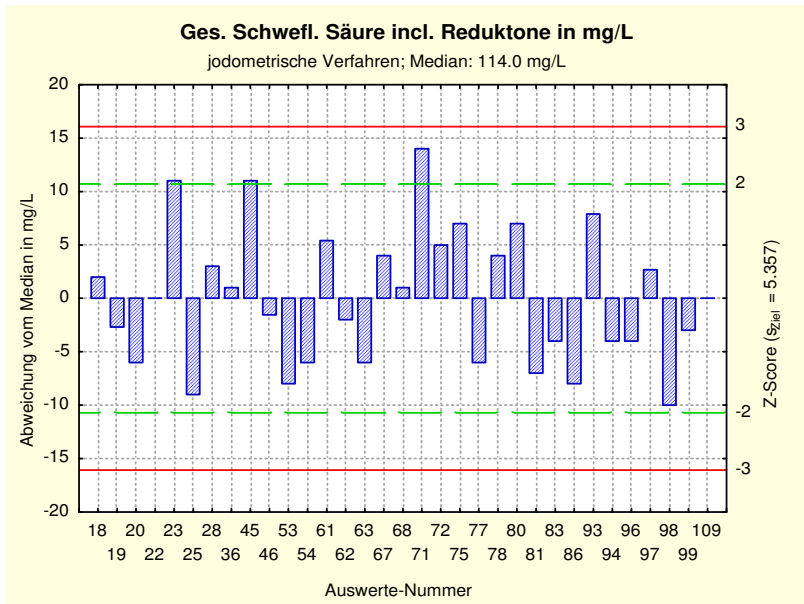
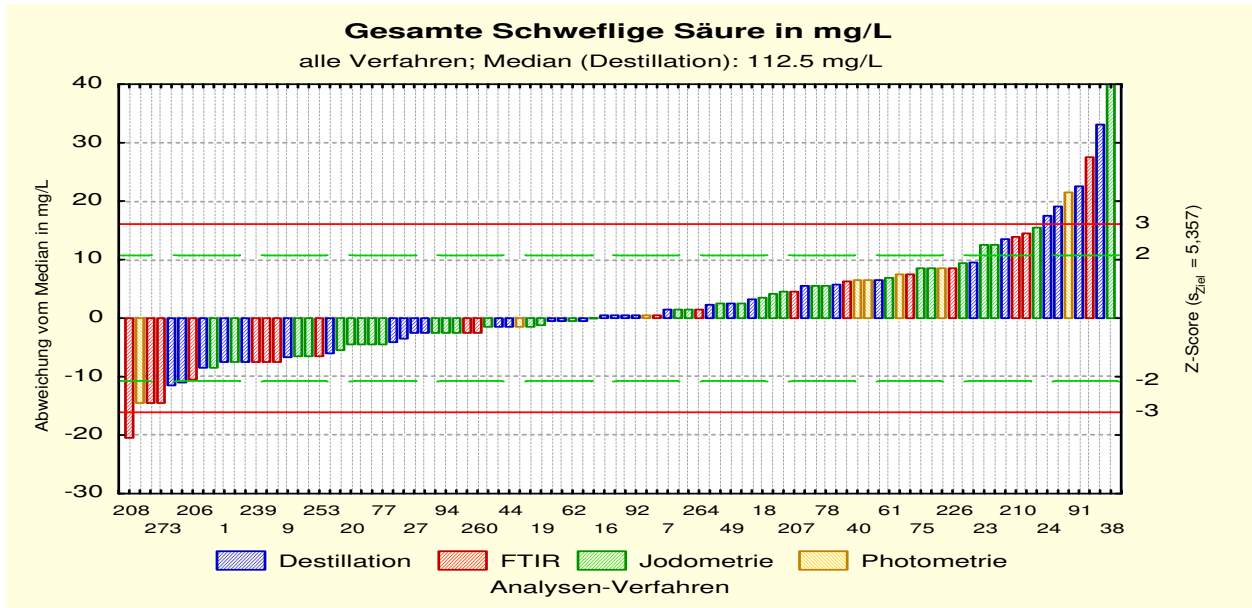
Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		incl. Reduktone	excl. Reduktone
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	33	32	33	22
Minimalwert	101,0	101,0	104,0	101,0
Mittelwert	114,58	113,61	113,96	108,38
Median	113,00	112,50	114,00	108,35
Maximalwert	145,6	135,0	128,0	122,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	9,843	8,247	6,323	5,622
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,713	1,458	1,101	1,199
Zielstandardabweichung				
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	8,875	8,842	8,942	8,564
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,11	0,93	0,71	0,66
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,84	1,54	1,18	1,05
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,19	0,16	0,12	0,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,32	0,27	0,21	0,22



**4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	108,40	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	116,61	13,887
LwK 7.3 m	modifiziert: 10 ml Probe, 5 ml 15%ige Phosphorsäure	1	135,04	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	5	110,08	6,227
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	111,90	4,306
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	130,00	
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	113,00	
	Destillationsverfahren	33	113,31	7,906
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	26	114,64	7,520
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	3	110,00	2,268
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Reduktonabzug	4	115,00	9,213
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	114,00	
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	34	114,19	7,176
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	18	108,50	6,106
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	105,50	2,406
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Reduktonabzug	2	108,00	8,019
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	22	108,15	5,797
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin (auch automatisiert)	2	117,00	6,415
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	116,92	12,998
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	111,54	11,849





## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P05

### 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	1,00457	0,000230	1,74	
02	LwK 8.1	1,00423	-0,000110	-0,83	
04	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
05	LwK 8.4	1,00431	-0,000030	-0,23	
06	LwK 8.4	1,00452	0,000180	1,36	
07	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
08	LwK 8.4	1,00428	-0,000060	-0,45	
09	LwK 8.1	1,00440	0,000060	0,45	
11	LwK 8.1	1,00440	0,000060	0,45	
12	LwK 8.4	1,00447	0,000130	0,98	
14	LwK 8.4	1,00431	-0,000030	-0,23	
15	LwK 8.4	1,00420	-0,000140	-1,06	
16	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
18	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
21	LwK 8.4	1,00433	-0,000010	-0,08	
22	LwK 8.4	1,00434	0,000000	0,00	
23	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
24	LwK 8.4	1,00434	0,000000	0,00	
25	LwK 8.4	1,00441	0,000070	0,53	
27	LwK 8.4	1,00438	0,000040	0,30	
28	LwK 8.4	1,00420	-0,000140	-1,06	
29	LwK 8.4	1,00434	0,000000	0,00	
31	LwK 8.2	1,00450	0,000160	1,21	
32	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
33	LwK 8.4	1,00448	0,000140	1,06	
36	LwK 8.4	1,00435	0,000010	0,08	
38	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
39	LwK 8.3	1,00422	-0,000120	-0,91	
40	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
41	LwK 8.4	1,00432	-0,000020	-0,15	
42	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
43	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
44	LwK 8.4	1,00434	0,000000	0,00	
46	LwK 8.4	1,00444	0,000100	0,76	
47	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
48	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
50	LwK 8.4	1,00431	-0,000030	-0,23	
52	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
54	LwK 8.4	1,00432	-0,000019	-0,14	
55	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
57	LwK 8.4	1,00380	-0,000540	-4,09	
58	LwK 8.4	1,00426	-0,000080	-0,61	
62	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
63	LwK 8.4	1,00440	0,000060	0,45	
66	LwK 8.4	1,00450	0,000160	1,21	
67	LwK 8.4	1,00410	-0,000240	-1,82	
69	LwK 8.1	1,00430	-0,000040	-0,30	
70	LwK 8.4	1,00435	0,000010	0,08	
71	LwK 8.1	1,00440	0,000060	0,45	
72	LwK 8.4	1,00446	0,000120	0,91	
78	LwK 8.4	1,00450	0,000160	1,21	
79	LwK 8.4	1,00497	0,000630	4,77	
80	LwK 8.4	1,00220	-0,002140	-16,21	(**)
86	LwK 8.4	1,00290	-0,001440	-10,91	(**)
95	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	
98	LwK 8.1	1,00427	-0,000070	-0,53	
99	LwK 8.4	1,00430	-0,000040	-0,30	

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

## 5.1.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
202	FTIR	1,00463	0,000290	2,20	
203	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
204	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
205	FTIR	1,00420	-0,000140	-1,06	
206	FTIR	1,00480	0,000460	3,48	
207	FTIR	1,00430	-0,000040	-0,30	
208	FTIR	1,00420	-0,000140	-1,06	
209	FTIR	1,00420	-0,000140	-1,06	
210	FTIR	1,00452	0,000180	1,36	
211	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
213	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
215	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
216	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
217	FTIR	1,00410	-0,000240	-1,82	
218	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
219	FTIR	1,00442	0,000080	0,61	
220	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
221	FTIR	1,00430	-0,000040	-0,30	
222	FTIR	1,00430	-0,000040	-0,30	
223	FTIR	1,00492	0,000580	4,39	
224	FTIR	1,00462	0,000280	2,12	
225	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
226	FTIR	1,00490	0,000560	4,24	
227	FTIR	1,00463	0,000290	2,20	
228	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
229	FTIR	1,00477	0,000430	3,26	
230	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
231	FTIR	1,00483	0,000490	3,71	
232	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
234	FTIR	1,00500	0,000660	5,00	(**)
236	FTIR	1,00454	0,000200	1,52	
238	FTIR	1,00490	0,000560	4,24	
239	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
242	FTIR	1,00462	0,000280	2,12	
243	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
244	FTIR	1,00448	0,000140	1,06	
245	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
246	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
247	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
248	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
249	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
251	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
252	FTIR	1,00420	-0,000140	-1,06	
253	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
254	FTIR	1,00480	0,000460	3,48	
256	FTIR	1,00500	0,000660	5,00	(**)
257	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
258	FTIR	1,00432	-0,000020	-0,15	
259	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
260	FTIR	1,00520	0,000860	6,52	(**)
261	FTIR	1,00410	-0,000240	-1,82	
262	FTIR	1,00452	0,000180	1,36	
263	FTIR	1,00480	0,000460	3,48	
264	FTIR	1,00520	0,000860	6,52	(**)
265	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
266	FTIR	1,00440	0,000060	0,45	
267	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
268	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
269	FTIR	1,00490	0,000560	4,24	
270	FTIR	1,00444	0,000100	0,76	
271	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
272	FTIR	1,00469	0,000350	2,65	
273	FTIR	1,00430	-0,000040	-0,30	

Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
275	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
276	FTIR	1,00494	0,000600	4,55	
277	FTIR	1,00430	-0,000040	-0,30	
278	FTIR	1,00709	0,002754	20,86	(**)
279	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
281	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
282	FTIR	1,00490	0,000560	4,24	
283	FTIR	1,00492	0,000580	4,39	
284	FTIR	1,00560	0,001260	9,55	(**)
285	FTIR	1,00140	-0,002940	-22,27	(**)
286	FTIR	1,00460	0,000260	1,97	
320	FTIR	1,00490	0,000560	4,24	
321	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
339	FTIR	1,00470	0,000360	2,73	
346	FTIR	1,00500	0,000660	5,00	(**)
351	FTIR	1,00450	0,000160	1,21	
366	FTIR	1,00420	-0,000140	-1,06	
371	FTIR	1,00480	0,000460	3,48	

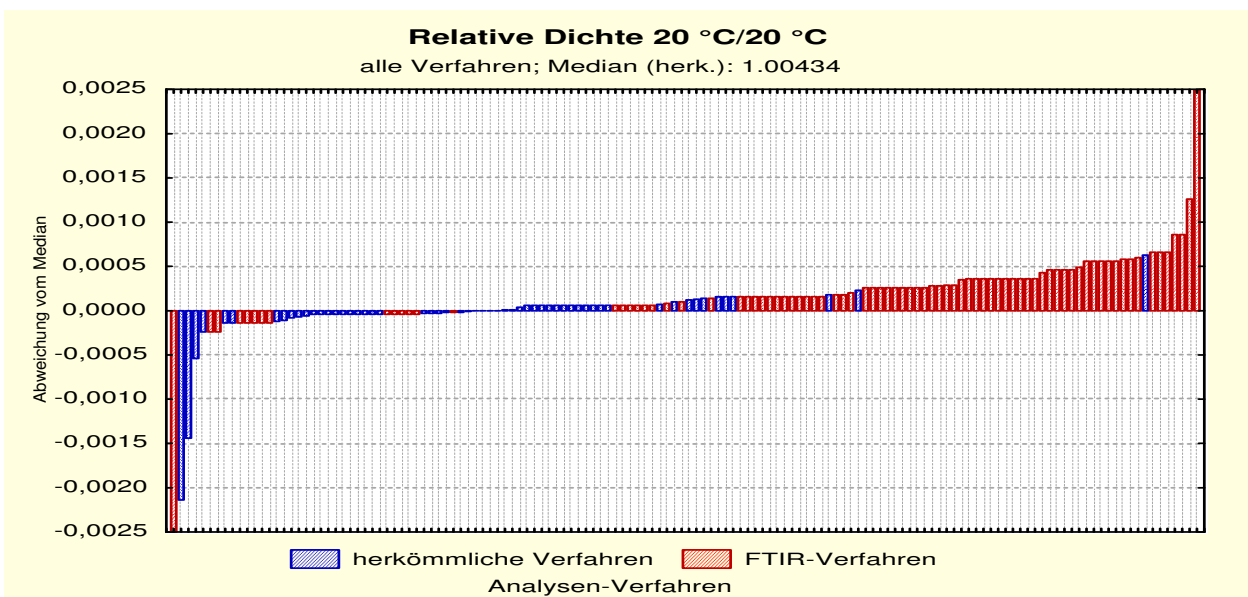
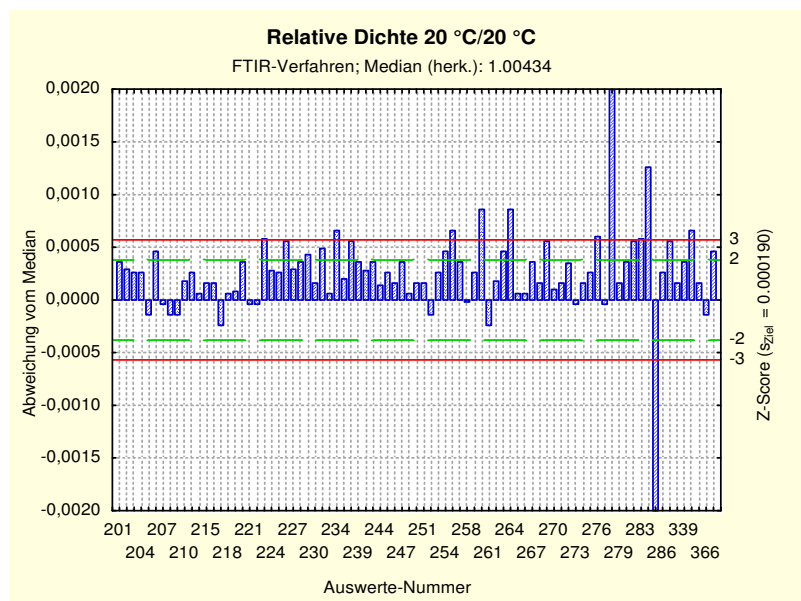
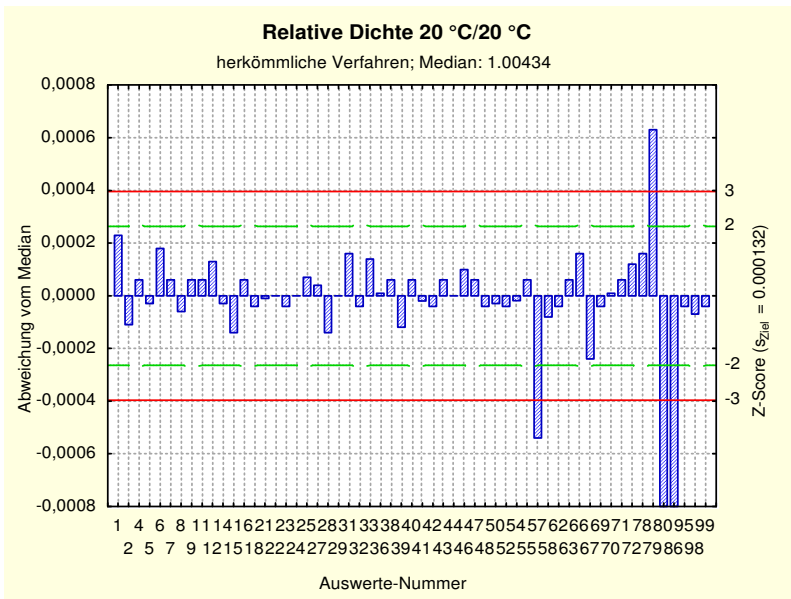
Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

**5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	57	55
Minimalwert	1,00220	1,00380
Mittelwert	1,004292	1,004355
Median	1,004340	1,004340
Maximalwert	1,00497	1,00497
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,000369	0,000143
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000049	0,000019
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 ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,80	1,08
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,94	0,75
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,37	0,15
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,26	0,10

**5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	7	1,00436	0,000120
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00450	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,00422	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	48	1,00435	0,000093
	herkömmliche Verfahren	57	1,00435	0,000100
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	1,00459	0,000264



## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	83,00	-0,600	-0,25	-1,12	
02	LwK 2.1	83,95	0,350	0,14	0,65	
04	LwK 2.9	84,24	0,640	0,26	1,20	
05	LwK 2.9	82,87	-0,730	-0,30	-1,36	
06	LwK 2.4	83,66	0,060	0,02	0,11	
07	LwK 2.4	83,00	-0,600	-0,25	-1,12	
08	LwK 2.4	83,39	-0,210	-0,09	-0,39	
09	LwK 2.4	82,87	-0,730	-0,30	-1,36	
11	LwK 2.1	83,74	0,138	0,06	0,26	
12	LwK 2.1	82,44	-1,160	-0,48	-2,17	
14	LwK 2.1	83,80	0,200	0,08	0,37	
15	LwK 2.9	83,70	0,100	0,04	0,19	
16	LwK 2.1	83,90	0,300	0,12	0,56	
18	LwK 2.9	84,10	0,500	0,21	0,93	
19	LwK 2.7	84,11	0,510	0,21	0,95	
21	LwK 2.7	83,76	0,160	0,07	0,30	
22	LwK 2.4	83,48	-0,120	-0,05	-0,22	
23	LwK 2.7	83,43	-0,170	-0,07	-0,32	
24	LwK 2.9	83,80	0,200	0,08	0,37	
25	LwK 2.5	82,60	-1,000	-0,41	-1,87	
27	LwK 2.1	83,25	-0,350	-0,14	-0,65	
28	LwK 2.4	84,20	0,600	0,25	1,12	
29	LwK 2.5	82,30	-1,300	-0,54	-2,43	
31	LwK 2.4	83,40	-0,200	-0,08	-0,37	
32	LwK 2.1	84,30	0,700	0,29	1,31	
33	LwK 2.9	83,90	0,300	0,12	0,56	
39	LwK 2.2	84,20	0,600	0,25	1,12	
40	LwK 2.9	83,90	0,300	0,12	0,56	
41	LwK 2.4	83,70	0,100	0,04	0,19	
42	LwK 2.4	83,35	-0,250	-0,10	-0,47	
43	LwK 2.5	82,97	-0,630	-0,26	-1,18	
44	LwK 2.4	83,60	0,000	0,00	0,00	
46	LwK 2.9	83,40	-0,200	-0,08	-0,37	
47	LwK 2.1	83,80	0,200	0,08	0,37	
48	LwK 2.5	83,70	0,100	0,04	0,19	
50	LwK 2.4	83,80	0,200	0,08	0,37	
52	LwK 2.9	84,00	0,400	0,16	0,75	
54	LwK 2.9	84,19	0,590	0,24	1,10	
55	LwK 2.9	83,00	-0,600	-0,25	-1,12	
57	LwK 2.1	83,53	-0,070	-0,03	-0,13	
58	LwK 2.9	83,94	0,340	0,14	0,64	
62	LwK 2.1	82,50	-1,100	-0,45	-2,06	
63	LwK 2.7	85,10	1,500	0,62	2,80	
66	LwK 2.5	82,60	-1,000	-0,41	-1,87	
69	LwK 2.1	83,80	0,200	0,08	0,37	
70	LwK 2.4	84,10	0,500	0,21	0,93	
71	LwK 2.4	83,80	0,200	0,08	0,37	
72	LwK 2.9	83,60	0,000	0,00	0,00	
75	LwK 2.3	86,20	2,600	1,07	4,86	
78	LwK 2.1	82,95	-0,650	-0,27	-1,21	
79	LwK 2.9	81,90	-1,700	-0,70	-3,18	
86	LwK 2.4	81,32	-2,281	-0,94	-4,26	
92	LwK 2.9	83,10	-0,500	-0,21	-0,93	
93	LwK 2.5	83,60	0,000	0,00	0,00	
94	LwK 2.9	83,70	0,100	0,04	0,19	
97	LwK 2.5	82,97	-0,630	-0,26	-1,18	
98	LwK 2.1	84,90	1,300	0,54	2,43	
99	LwK 2.9	83,50	-0,100	-0,04	-0,19	
103	LwK 2.1	83,60	0,000	0,00	0,00	
104	LwK 2.9	83,51	-0,090	-0,04	-0,17	
107	LwK 2.4	83,80	0,200	0,08	0,37	
108	LwK 2.1	82,50	-1,100	-0,45	-2,06	

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

## 5.2.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	83,22	-0,380	-0,16	-0,43	
202	LwK 2.8	84,09	0,490	0,20	0,55	
203	LwK 2.8	83,40	-0,200	-0,08	-0,23	
204	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
205	LwK 2.8	83,11	-0,493	-0,20	-0,56	
206	LwK 2.8	84,36	0,760	0,31	0,86	
207	LwK 2.8	83,70	0,100	0,04	0,11	
208	LwK 2.8	80,70	-2,900	-1,19	-3,27	
209	LwK 2.8	84,17	0,570	0,23	0,64	
210	LwK 2.8	83,36	-0,240	-0,10	-0,27	
211	LwK 2.8	82,30	-1,300	-0,54	-1,47	
213	LwK 2.8	84,80	1,200	0,49	1,35	
215	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
216	LwK 2.8	83,60	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 2.8	85,00	1,400	0,58	1,58	
218	LwK 2.8	85,10	1,500	0,62	1,69	
219	LwK 2.8	84,40	0,800	0,33	0,90	
220	LwK 2.8	81,60	-2,000	-0,82	-2,26	
221	LwK 2.8	82,00	-1,600	-0,66	-1,81	
222	LwK 2.8	82,34	-1,260	-0,52	-1,42	
223	LwK 2.8	83,36	-0,240	-0,10	-0,27	
224	LwK 2.8	84,30	0,700	0,29	0,79	
225	LwK 2.8	83,40	-0,200	-0,08	-0,23	
226	LwK 2.8	84,88	1,280	0,53	1,44	
227	LwK 2.8	84,29	0,690	0,28	0,78	
228	LwK 2.8	81,88	-1,720	-0,71	-1,94	
229	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
230	LwK 2.8	83,50	-0,100	-0,04	-0,11	
231	LwK 2.8	80,78	-2,820	-1,16	-3,18	
232	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
234	LwK 2.8	83,90	0,300	0,12	0,34	
236	LwK 2.8	82,70	-0,900	-0,37	-1,02	
238	LwK 2.8	83,90	0,300	0,12	0,34	
239	LwK 2.8	83,50	-0,100	-0,04	-0,11	
242	LwK 2.8	84,50	0,900	0,37	1,02	
243	LwK 2.8	82,30	-1,300	-0,54	-1,47	
244	LwK 2.8	84,46	0,860	0,35	0,97	
245	LwK 2.8	83,00	-0,600	-0,25	-0,68	
246	LwK 2.8	84,10	0,500	0,21	0,56	
247	LwK 2.8	83,74	0,140	0,06	0,16	
248	LwK 2.8	83,50	-0,100	-0,04	-0,11	
249	LwK 2.8	83,37	-0,230	-0,09	-0,26	
250	LwK 2.8	83,62	0,020	0,01	0,02	
251	LwK 2.8	82,70	-0,900	-0,37	-1,02	
252	LwK 2.8	82,97	-0,630	-0,26	-0,71	
253	LwK 2.8	83,30	-0,300	-0,12	-0,34	
254	LwK 2.8	85,00	1,400	0,58	1,58	
256	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
257	LwK 2.8	83,20	-0,400	-0,16	-0,45	
258	LwK 2.8	84,30	0,700	0,29	0,79	
259	LwK 2.8	83,20	-0,400	-0,16	-0,45	
260	LwK 2.8	84,10	0,500	0,21	0,56	
261	LwK 2.8	83,68	0,080	0,03	0,09	
262	LwK 2.8	81,43	-2,170	-0,89	-2,45	
263	LwK 2.8	82,90	-0,700	-0,29	-0,79	
264	LwK 2.8	84,10	0,500	0,21	0,56	
265	LwK 2.8	84,00	0,400	0,16	0,45	
266	LwK 2.8	83,20	-0,400	-0,16	-0,45	
267	LwK 2.8	83,23	-0,370	-0,15	-0,42	
268	LwK 2.8	84,09	0,490	0,20	0,55	
269	LwK 2.8	83,00	-0,600	-0,25	-0,68	
270	LwK 2.8	84,10	0,500	0,21	0,56	
271	LwK 2.8	83,70	0,100	0,04	0,11	
272	LwK 2.8	79,40	-4,200	-1,73	-4,74	
273	LwK 2.8	81,94	-1,660	-0,68	-1,87	



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

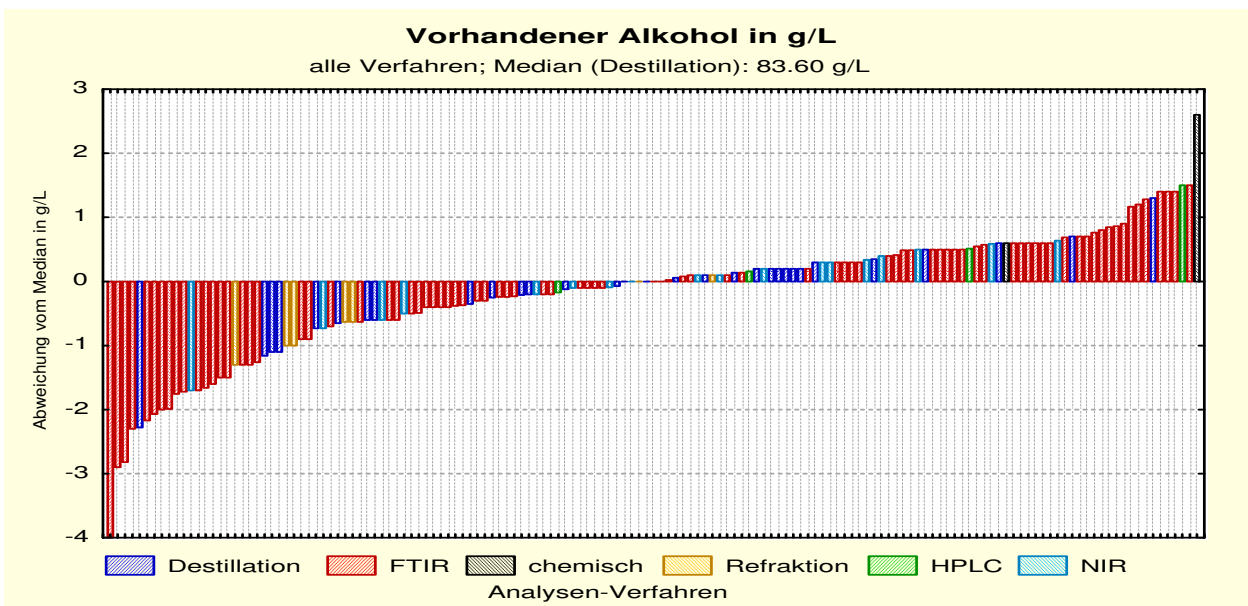
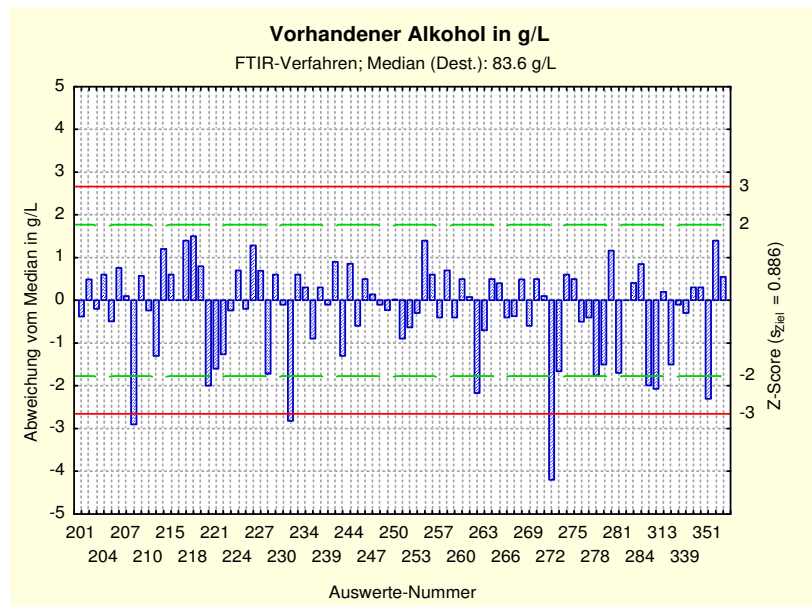
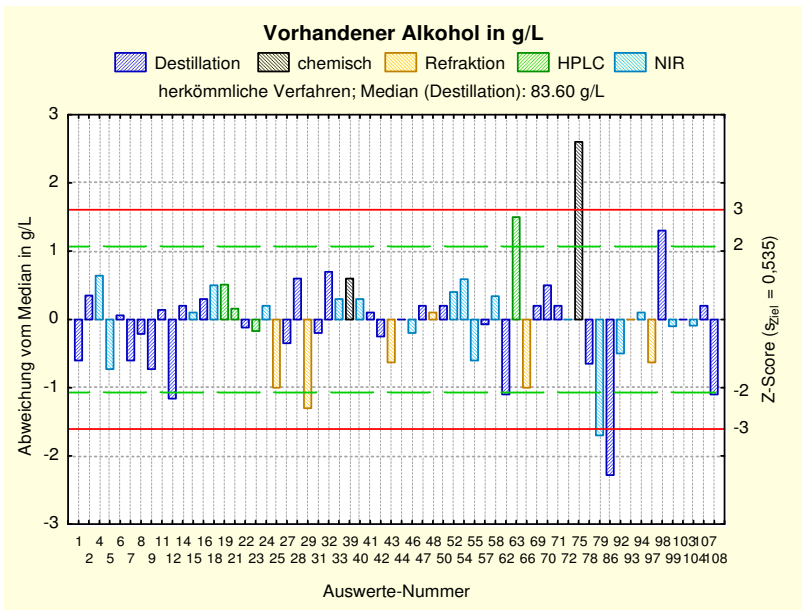
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 2.8	84,20	0,600	0,25	0,68	
275	LwK 2.8	84,10	0,500	0,21	0,56	
276	LwK 2.8	83,10	-0,500	-0,21	-0,56	
277	LwK 2.8	83,20	-0,400	-0,16	-0,45	
278	LwK 2.8	81,84	-1,756	-0,72	-1,98	
279	LwK 2.8	82,10	-1,500	-0,62	-1,69	
280	LwK 2.8	84,76	1,164	0,48	1,31	
281	LwK 2.8	81,90	-1,700	-0,70	-1,92	
282	LwK 2.8	83,60	0,000	0,00	0,00	
283	LwK 2.8	84,01	0,410	0,17	0,46	
284	LwK 2.8	84,45	0,849	0,35	0,96	
285	LwK 2.8	81,61	-1,990	-0,82	-2,25	
286	LwK 2.8	81,53	-2,072	-0,85	-2,34	
313	LwK 2.8	83,80	0,200	0,08	0,23	
320	LwK 2.8	82,10	-1,500	-0,62	-1,69	
321	LwK 2.8	83,50	-0,100	-0,04	-0,11	
339	LwK 2.8	83,30	-0,300	-0,12	-0,34	
345	LwK 2.8	83,90	0,300	0,12	0,34	
346	LwK 2.8	83,90	0,300	0,12	0,34	
351	LwK 2.8	81,30	-2,300	-0,95	-2,60	
366	LwK 2.8	85,00	1,400	0,58	1,58	
371	LwK 2.8	84,15	0,550	0,23	0,62	

**5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	31
Minimalwert	81,32
Mittelwert	83,465
Median	83,600
Maximalwert	84,90
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,674
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,121
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	2,429
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,886
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,28
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,26
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,76
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,05
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,23
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,14

**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	83,486	0,706
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	15 31	83,537 83,521	0,448 0,534
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	84,200	
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	86,200	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	7	82,963	0,595
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	4	84,054	0,723
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	83,461	1,038
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	18	83,633	0,487



### 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	47,95	0,00	0,00	0,00	
02	Biegeschwinger	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
04	LwK 3.3	48,40	0,45	0,30	0,76	
06	LwK 3.3	48,40	0,45	0,30	0,76	
07	LwK 3.3	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
08	LwK 3.3	47,10	-0,85	-0,56	-1,43	
09	LwK 3.1	47,95	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.2	48,10	0,15	0,10	0,25	
12	LwK 3.3	47,95	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
15	LwK 3.3	48,50	0,55	0,36	0,93	
16	LwK 3.3	48,20	0,25	0,17	0,42	
18	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
21	LwK 3.3	21,50	-26,45	-17,46	-44,53	(*)
22	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
23	LwK 3.3	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
24	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
25	LwK 3.3	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
27	LwK 3.2	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
28	LwK 3.3	49,00	1,05	0,70	1,77	
29	LwK 3.3	47,50	-0,45	-0,30	-0,76	
31	LwK 3.2	48,20	0,25	0,17	0,42	
32	LwK 3.2	48,00	0,05	0,03	0,08	
33	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
39	LwK 3.3	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
40	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
41	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
43	LwK 3.3	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
44	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
46	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
47	LwK 3.2	48,00	0,05	0,03	0,08	
50	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
52	LwK 3.3	48,20	0,25	0,17	0,42	
54	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
55	LwK 3.3	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
58	LwK 3.3	47,84	-0,11	-0,07	-0,19	
62	LwK 3.2	47,30	-0,65	-0,43	-1,09	
63	LwK 3.3	48,80	0,85	0,56	1,43	
69	LwK 3.3	47,60	-0,35	-0,23	-0,59	
70	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
71	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
79	LwK 3.3	49,10	1,15	0,76	1,94	
95	LwK 3.2	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
97	LwK 3.3	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
98	LwK 3.2	48,20	0,25	0,17	0,42	
99	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
108	LwK 3.3	49,40	1,45	0,96	2,44	

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

#### 5.3.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	47,950	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	9	48,000	0,168
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	37	47,998	0,324
		47	47,992	0,282
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	53	47,931	0,716
Biegeschwinger	ungenauere Verfahrensangabe; eigentliches Vorgehen ist nicht erkennbar	1	47,700	

## 5.3.3 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	46,37	-1,58	-1,04	-2,66	
202	FTIR	47,76	-0,19	-0,13	-0,32	
203	FTIR	48,50	0,55	0,36	0,93	
204	FTIR	48,50	0,55	0,36	0,93	
206	FTIR	52,09	4,14	2,73	6,97	(**)
209	FTIR	47,17	-0,78	-0,51	-1,31	
210	FTIR	48,00	0,05	0,03	0,08	
211	FTIR	48,60	0,65	0,43	1,09	
216	FTIR	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
217	FTIR	47,06	-0,89	-0,59	-1,50	
218	FTIR	47,30	-0,65	-0,43	-1,09	
219	FTIR	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
221	FTIR	47,60	-0,35	-0,23	-0,59	
223	FTIR	49,89	1,94	1,28	3,27	
225	FTIR	47,20	-0,75	-0,50	-1,26	
227	FTIR	47,43	-0,52	-0,34	-0,88	
228	LwK 3.3	48,10	0,15	0,10	0,25	
229	FTIR	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
230	FTIR	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
231	FTIR	46,94	-1,01	-0,67	-1,70	
232	FTIR	48,40	0,45	0,30	0,76	
234	FTIR	47,81	-0,14	-0,09	-0,24	
238	FTIR	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
239	FTIR	48,10	0,15	0,10	0,25	
242	FTIR	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
244	FTIR	48,60	0,65	0,43	1,09	
248	FTIR	47,40	-0,55	-0,36	-0,93	
249	FTIR	47,50	-0,45	-0,30	-0,76	
251	FTIR	47,60	-0,35	-0,23	-0,59	
253	FTIR	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
254	FTIR	49,60	1,65	1,09	2,78	
256	FTIR	48,50	0,55	0,36	0,93	
257	FTIR	48,00	0,05	0,03	0,08	
260	FTIR	47,30	-0,65	-0,43	-1,09	
261	FTIR	47,32	-0,63	-0,42	-1,06	
264	FTIR	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
265	FTIR	46,60	-1,35	-0,89	-2,27	
266	FTIR	48,60	0,65	0,43	1,09	
268	FTIR	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
269	FTIR	49,50	1,55	1,02	2,61	
270	FTIR	48,10	0,15	0,10	0,25	
271	FTIR	48,05	0,10	0,07	0,17	
272	FTIR	48,90	0,95	0,63	1,60	
273	FTIR	47,00	-0,95	-0,63	-1,60	
274	FTIR	49,06	1,11	0,73	1,87	
275	FTIR	48,30	0,35	0,23	0,59	
276	FTIR	47,70	-0,25	-0,17	-0,42	
279	FTIR	47,72	-0,23	-0,15	-0,39	
281	FTIR	47,90	-0,05	-0,03	-0,08	
282	FTIR	73,70	25,75	17,00	43,35	(*)
283	FTIR	47,80	-0,15	-0,10	-0,25	
321	FTIR	46,70	-1,25	-0,83	-2,10	
339	FTIR	48,10	0,15	0,10	0,25	
366	FTIR	48,60	0,65	0,43	1,09	

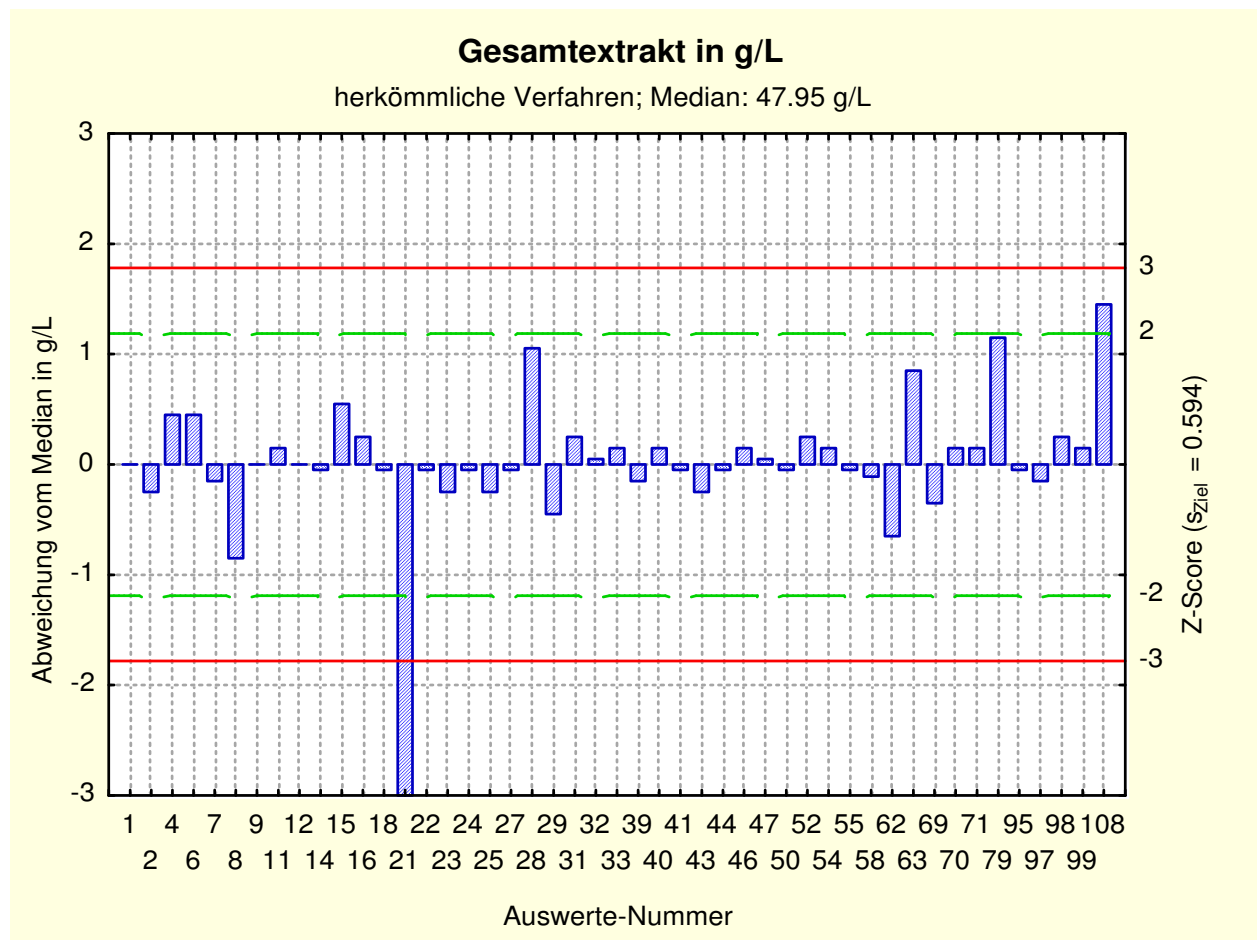
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich ermittelten Werte ab.

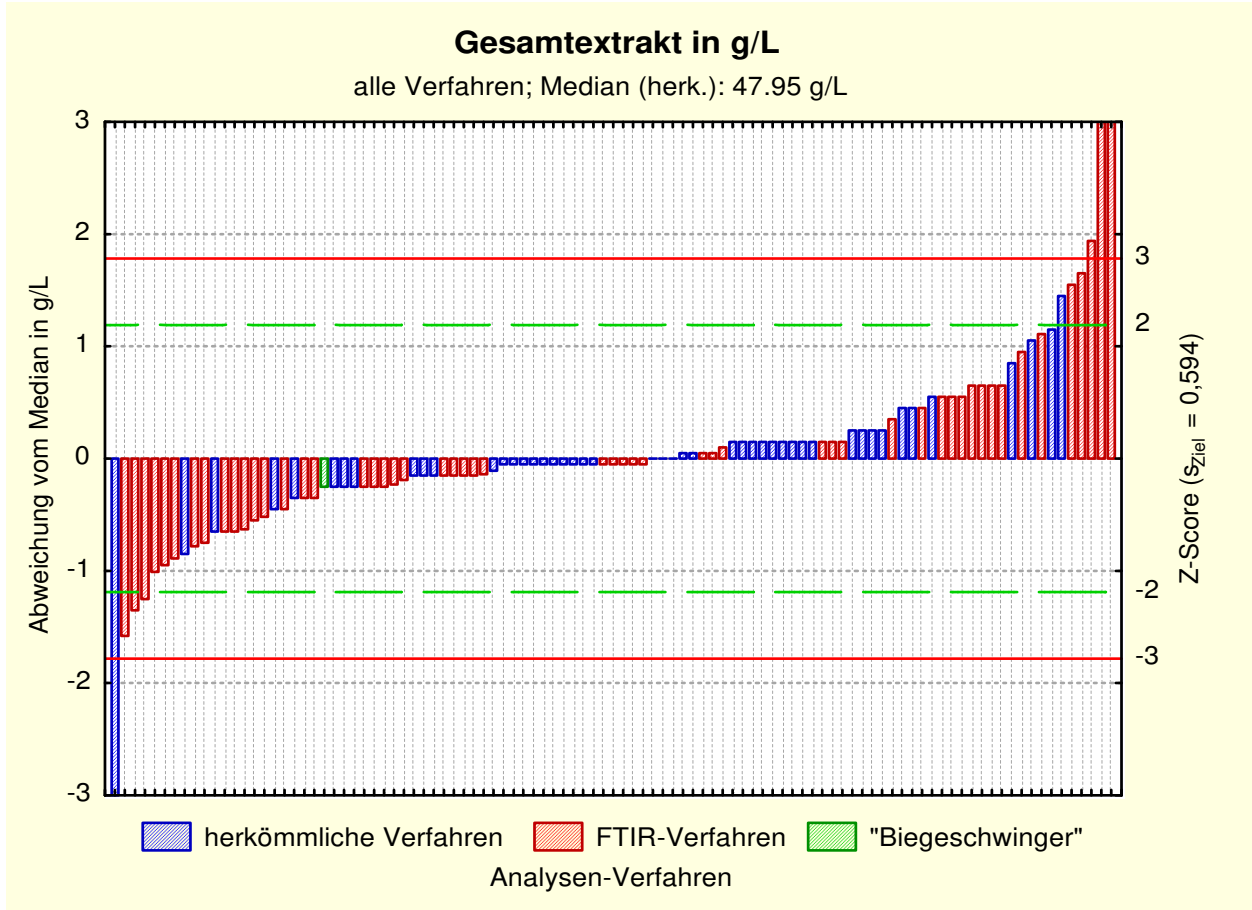
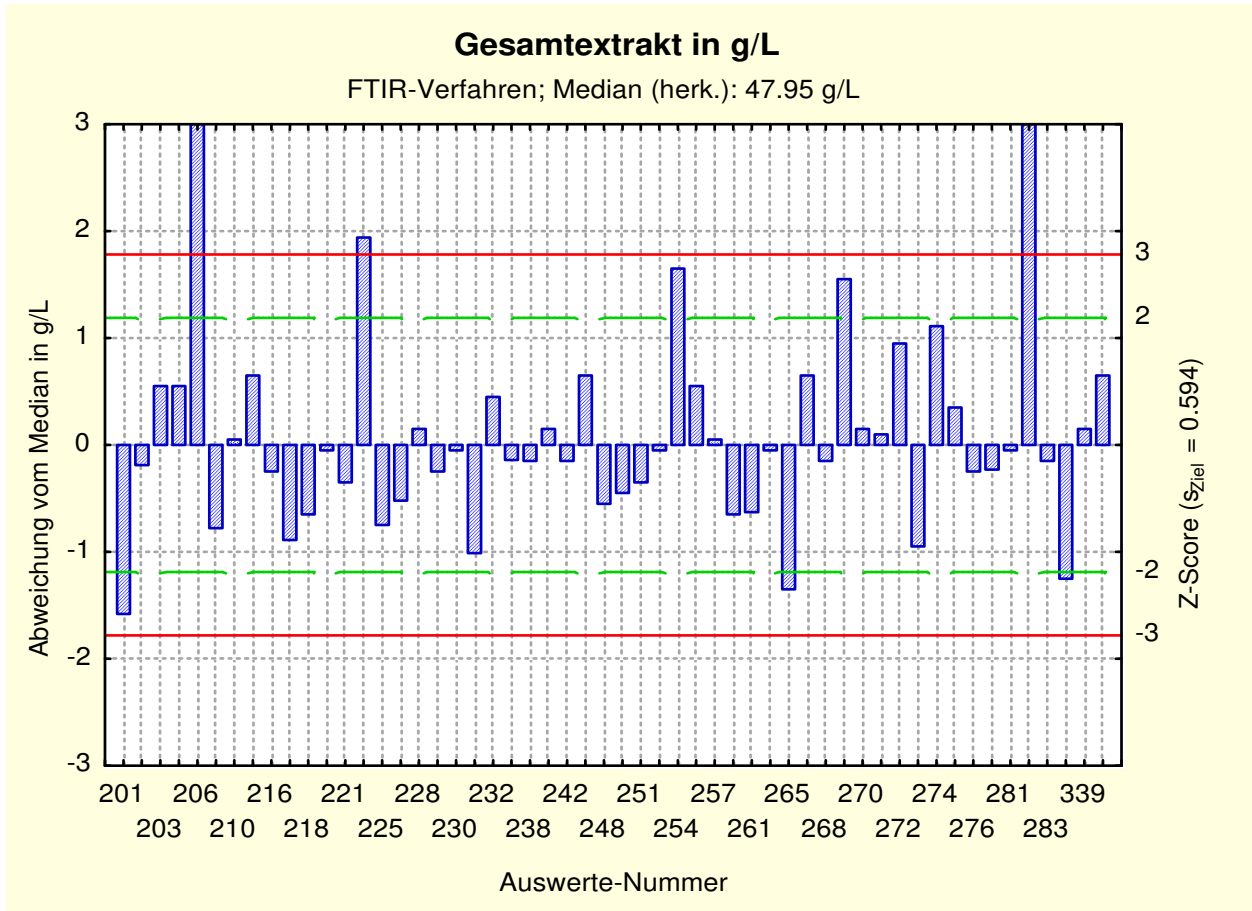
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**5.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	46
Minimalwert	47,1
Mittelwert	48,04
Median	47,95
Maximalwert	49,4
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,416
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,061
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,515
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,27
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,70
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,74)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,04
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,11)

<sup>1)</sup> 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	28,33	1,545	1,67	2,02	
04	LwK 4.7	26,84	0,055	0,06	0,07	
06	LwK 4.5	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
07	LwK 4.5	26,90	0,115	0,12	0,15	
08	LwK 4.5	27,10	0,315	0,34	0,41	
09	LwK 4.7	26,89	0,105	0,11	0,14	
11	LwK 4.5	25,97	-0,815	-0,88	-1,06	
12	LwK 4.5	25,36	-1,425	-1,54	-1,86	
14	LwK 4.7	27,17	0,385	0,42	0,50	
15	LwK 4.5	26,90	0,115	0,12	0,15	
16	LwK 4.5	26,60	-0,185	-0,20	-0,24	
18	LwK 4.8	27,60	0,815	0,88	1,06	
19	LwK 4.7	27,86	1,075	1,16	1,40	
21	LwK 4.7	26,41	-0,375	-0,41	-0,49	
22	LwK 4.5	26,91	0,125	0,14	0,16	
23	LwK 4.7	26,57	-0,215	-0,23	-0,28	
24	NMR	26,58	-0,205	-0,22	-0,27	
25	LwK 4.4	26,60	-0,185	-0,20	-0,24	
27	LwK 4.5	26,83	0,045	0,05	0,06	
28	LwK 4.7	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
29	LwK 4.4	27,70	0,915	0,99	1,19	
31	LwK 4.4	26,10	-0,685	-0,74	-0,89	
32	LwK 4.5	27,70	0,915	0,99	1,19	
33	LwK 4.7	27,20	0,415	0,45	0,54	
39	LwK 4.3	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
40	LwK 4.5	27,40	0,615	0,67	0,80	
41	LwK 4.7	25,86	-0,925	-1,00	-1,21	
42	LwK 4.5	26,52	-0,265	-0,29	-0,35	
43	LwK 4.5	26,13	-0,655	-0,71	-0,85	
44	LwK 4.7	27,27	0,485	0,53	0,63	
46	LwK 4.5	26,03	-0,755	-0,82	-0,99	
47	LwK 4.5	26,10	-0,685	-0,74	-0,89	
50	LwK 4.5	27,12	0,335	0,36	0,44	
52	LwK 4.7	27,00	0,215	0,23	0,28	
54	LwK 4.5	26,77	-0,015	-0,02	-0,02	
55	LwK 4.5	26,80	0,015	0,02	0,02	
57	LwK 4.5	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
58	LwK 4.5	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
62	LwK 4.4	28,30	1,515	1,64	1,98	
63	LwK 4.7	26,20	-0,585	-0,63	-0,76	
66	LwK 4.4	26,80	0,015	0,02	0,02	
69	LwK 4.4	24,60	-2,185	-2,37	-2,85	
70	LwK 4.1	26,67	-0,115	-0,12	-0,15	
71	LwK 4.4	25,60	-1,185	-1,28	-1,55	
72	LwK 4.5	26,25	-0,535	-0,58	-0,70	
78	LwK 4.4	27,70	0,915	0,99	1,19	
79	LwK 4.4	29,20	2,415	2,61	3,15	
81	LwK 4.4	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
86	LwK 4.4	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
95	LwK 4.5	26,05	-0,735	-0,80	-0,96	
97	LwK 4.7	27,03	0,245	0,27	0,32	

**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	26,73	-0,055	-0,06	-0,07	
203	LwK 4.8	26,57	-0,215	-0,23	-0,28	
204	LwK 4.8	27,12	0,335	0,36	0,44	
206	LwK 4.8	29,93	3,145	3,40	4,11	
207	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
208	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
209	LwK 4.8	25,16	-1,625	-1,76	-2,12	
210	LwK 4.8	26,71	-0,075	-0,08	-0,10	
211	LwK 4.8	28,20	1,415	1,53	1,85	
213	LwK 4.8	28,01	1,225	1,33	1,60	
215	LwK 4.8	26,80	0,015	0,02	0,02	
216	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
217	LwK 4.8	26,09	-0,695	-0,75	-0,91	
218	LwK 4.8	27,62	0,835	0,90	1,09	
219	LwK 4.8	26,94	0,155	0,17	0,20	
220	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
221	LwK 4.8	25,86	-0,925	-1,00	-1,21	
222	LwK 4.8	29,35	2,565	2,78	3,35	
223	LwK 4.8	28,11	1,325	1,43	1,73	
224	LwK 4.8	26,80	0,015	0,02	0,02	
225	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
226	LwK 4.8	28,09	1,305	1,41	1,70	
227	LwK 4.8	27,27	0,485	0,53	0,63	
228	LwK 4.8	24,50	-2,285	-2,47	-2,98	
229	LwK 4.8	27,68	0,895	0,97	1,17	
230	LwK 4.8	27,39	0,605	0,65	0,79	
231	LwK 4.8	25,69	-1,095	-1,19	-1,43	
232	LwK 4.8	26,10	-0,685	-0,74	-0,89	
234	LwK 4.8	25,53	-1,255	-1,36	-1,64	
236	LwK 4.8	27,48	0,695	0,75	0,91	
238	LwK 4.8	27,50	0,715	0,77	0,93	
239	LwK 4.8	27,60	0,815	0,88	1,06	
242	LwK 4.8	28,06	1,275	1,38	1,66	
243	LwK 4.8	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
244	LwK 4.8	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
245	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
246	LwK 4.8	26,30	-0,485	-0,53	-0,63	
247	LwK 4.8	27,31	0,525	0,57	0,69	
248	LwK 4.8	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
249	LwK 4.8	26,13	-0,655	-0,71	-0,85	
250	LwK 4.8	26,39	-0,395	-0,43	-0,52	
251	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
252	LwK 4.8	26,15	-0,635	-0,69	-0,83	
253	LwK 4.8	25,10	-1,685	-1,82	-2,20	
254	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
256	LwK 4.8	28,60	1,815	1,96	2,37	
257	LwK 4.8	27,40	0,615	0,67	0,80	
258	LwK 4.8	27,30	0,515	0,56	0,67	
259	LwK 4.8	27,89	1,105	1,20	1,44	
260	LwK 4.8	26,01	-0,775	-0,84	-1,01	
261	LwK 4.8	32,62	5,835	6,32	7,62	(**)
262	LwK 4.8	26,92	0,135	0,15	0,18	
263	LwK 4.8	27,70	0,915	0,99	1,19	
264	LwK 4.8	28,50	1,715	1,86	2,24	
265	LwK 4.8	26,00	-0,785	-0,85	-1,02	
266	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
267	LwK 4.8	25,94	-0,845	-0,91	-1,10	
268	LwK 4.8	25,23	-1,555	-1,68	-2,03	
269	LwK 4.8	27,10	0,315	0,34	0,41	
270	LwK 4.8	24,58	-2,205	-2,39	-2,88	
271	LwK 4.8	27,35	0,565	0,61	0,74	
272	LwK 4.8	26,77	-0,015	-0,02	-0,02	
273	LwK 4.8	28,30	1,515	1,64	1,98	

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



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	27,89	1,105	1,20	1,44	
275	LwK 4.8	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
276	LwK 4.8	28,08	1,295	1,40	1,69	
277	LwK 4.8	26,30	-0,485	-0,53	-0,63	
278	LwK 4.8	26,36	-0,425	-0,46	-0,55	
279	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
280	LwK 4.8	29,61	2,825	3,06	3,69	
281	LwK 4.8	27,19	0,405	0,44	0,53	
282	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
283	LwK 4.8	27,94	1,155	1,25	1,51	
284	LwK 4.8	25,75	-1,035	-1,12	-1,35	
285	LwK 4.8	22,61	-4,175	-4,52	-5,45	(**)
286	LwK 4.8	23,90	-2,885	-3,12	-3,77	
320	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
321	LwK 4.8	28,24	1,455	1,58	1,90	
339	LwK 4.8	27,60	0,815	0,88	1,06	
346	LwK 4.8	27,50	0,715	0,77	0,93	
351	LwK 4.8	25,30	-1,485	-1,61	-1,94	
366	LwK 4.8	27,70	0,915	0,99	1,19	
371	LwK 4.8	26,75	-0,035	-0,04	-0,05	

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

**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	26,60	-0,100	-0,11	-0,13	
29	LwK 4.4	27,70	1,000	1,09	1,31	
31	LwK 4.4	26,10	-0,600	-0,65	-0,79	
39	LwK 4.3	26,70	0,000	0,00	0,00	
62	LwK 4.4	28,30	1,600	1,74	2,09	
66	LwK 4.4	26,80	0,100	0,11	0,13	
69	LwK 4.4	24,60	-2,100	-2,28	-2,75	
70	LwK 4.1	26,67	-0,030	-0,03	-0,04	
71	LwK 4.4	25,60	-1,100	-1,19	-1,44	
78	LwK 4.4	27,70	1,000	1,09	1,31	
79	LwK 4.4	29,20	2,500	2,71	3,27	
81	LwK 4.4	26,70	0,000	0,00	0,00	
86	LwK 4.4	25,80	-0,900	-0,98	-1,18	

**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	26,73	0,030	0,03	0,04	
203	LwK 4.8	26,57	-0,130	-0,14	-0,17	
204	LwK 4.8	27,12	0,420	0,46	0,55	
206	LwK 4.8	29,93	3,230	3,51	4,23	
207	LwK 4.8	26,90	0,200	0,22	0,26	
208	LwK 4.8	27,20	0,500	0,54	0,65	
209	LwK 4.8	25,16	-1,540	-1,67	-2,02	
210	LwK 4.8	26,71	0,010	0,01	0,01	
211	LwK 4.8	28,20	1,500	1,63	1,96	
213	LwK 4.8	28,01	1,310	1,42	1,72	
215	LwK 4.8	26,80	0,100	0,11	0,13	
216	LwK 4.8	26,90	0,200	0,22	0,26	
217	LwK 4.8	26,09	-0,610	-0,66	-0,80	
218	LwK 4.8	27,62	0,920	1,00	1,20	
219	LwK 4.8	26,94	0,240	0,26	0,31	
220	LwK 4.8	26,90	0,200	0,22	0,26	
221	LwK 4.8	25,86	-0,840	-0,91	-1,10	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	LwK 4.8	29,35	2,650	2,88	3,47	
223	LwK 4.8	28,11	1,410	1,53	1,85	
224	LwK 4.8	26,80	0,100	0,11	0,13	
225	LwK 4.8	27,00	0,300	0,33	0,39	
226	LwK 4.8	28,09	1,390	1,51	1,82	
227	LwK 4.8	27,27	0,570	0,62	0,75	
228	LwK 4.8	24,50	-2,200	-2,39	-2,88	
229	LwK 4.8	27,68	0,980	1,06	1,28	
230	LwK 4.8	27,39	0,690	0,75	0,90	
231	LwK 4.8	25,69	-1,010	-1,10	-1,32	
232	LwK 4.8	26,10	-0,600	-0,65	-0,79	
234	LwK 4.8	25,53	-1,170	-1,27	-1,53	
236	LwK 4.8	27,48	0,780	0,85	1,02	
238	LwK 4.8	27,50	0,800	0,87	1,05	
239	LwK 4.8	27,60	0,900	0,98	1,18	
242	LwK 4.8	28,06	1,360	1,48	1,78	
243	LwK 4.8	25,80	-0,900	-0,98	-1,18	
244	LwK 4.8	25,80	-0,900	-0,98	-1,18	
245	LwK 4.8	27,20	0,500	0,54	0,65	
246	LwK 4.8	26,30	-0,400	-0,43	-0,52	
247	LwK 4.8	27,31	0,610	0,66	0,80	
248	LwK 4.8	26,40	-0,300	-0,33	-0,39	
249	LwK 4.8	26,13	-0,570	-0,62	-0,75	
250	LwK 4.8	26,39	-0,310	-0,34	-0,41	
251	LwK 4.8	27,00	0,300	0,33	0,39	
252	LwK 4.8	26,15	-0,550	-0,60	-0,72	
253	LwK 4.8	25,10	-1,600	-1,74	-2,09	
254	LwK 4.8	27,20	0,500	0,54	0,65	
256	LwK 4.8	28,60	1,900	2,06	2,49	
257	LwK 4.8	27,40	0,700	0,76	0,92	
258	LwK 4.8	27,30	0,600	0,65	0,79	
259	LwK 4.8	27,89	1,190	1,29	1,56	
260	LwK 4.8	26,01	-0,690	-0,75	-0,90	
261	LwK 4.8	32,62	5,920	6,43	7,75	(**)
262	LwK 4.8	26,92	0,220	0,24	0,29	
263	LwK 4.8	27,70	1,000	1,09	1,31	
264	LwK 4.8	28,50	1,800	1,95	2,36	
265	LwK 4.8	26,00	-0,700	-0,76	-0,92	
266	LwK 4.8	27,20	0,500	0,54	0,65	
267	LwK 4.8	25,94	-0,760	-0,82	-1,00	
268	LwK 4.8	25,23	-1,470	-1,60	-1,92	
269	LwK 4.8	27,10	0,400	0,43	0,52	
270	LwK 4.8	24,58	-2,120	-2,30	-2,78	
271	LwK 4.8	27,35	0,650	0,71	0,85	
272	LwK 4.8	26,77	0,070	0,08	0,09	
273	LwK 4.8	28,30	1,600	1,74	2,09	
274	LwK 4.8	27,89	1,190	1,29	1,56	
275	LwK 4.8	26,70	0,000	0,00	0,00	
276	LwK 4.8	28,08	1,380	1,50	1,81	
277	LwK 4.8	26,30	-0,400	-0,43	-0,52	
278	LwK 4.8	26,36	-0,340	-0,37	-0,45	
279	LwK 4.8	26,90	0,200	0,22	0,26	
280	LwK 4.8	29,61	2,910	3,16	3,81	
281	LwK 4.8	27,19	0,490	0,53	0,64	
282	LwK 4.8	26,90	0,200	0,22	0,26	
283	LwK 4.8	27,94	1,240	1,35	1,62	
284	LwK 4.8	25,75	-0,950	-1,03	-1,24	
285	LwK 4.8	22,61	-4,090	-4,44	-5,35	(**)
286	LwK 4.8	23,90	-2,800	-3,04	-3,67	
320	LwK 4.8	27,20	0,500	0,54	0,65	
321	LwK 4.8	28,24	1,540	1,67	2,02	
339	LwK 4.8	27,60	0,900	0,98	1,18	
346	LwK 4.8	27,50	0,800	0,87	1,05	
351	LwK 4.8	25,30	-1,400	-1,52	-1,83	
366	LwK 4.8	27,70	1,000	1,09	1,31	
371	LwK 4.8	26,75	0,050	0,05	0,07	

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

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	26,81	0,025	0,03	0,03	
202	LwK 4.8	26,73	-0,055	-0,06	-0,07	
203	LwK 4.8	26,91	0,125	0,14	0,16	
204	LwK 4.8	27,12	0,335	0,36	0,44	
205	LwK 4.8	26,88	0,095	0,10	0,12	
206	LwK 4.8	29,93	3,145	3,40	4,11	
207	LwK 4.8	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
208	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
209	LwK 4.8	25,16	-1,625	-1,76	-2,12	
210	LwK 4.8	26,71	-0,075	-0,08	-0,10	
211	LwK 4.8	27,30	0,515	0,56	0,67	
213	LwK 4.8	27,09	0,305	0,33	0,40	
215	LwK 4.8	25,90	-0,885	-0,96	-1,16	
216	LwK 4.8	26,90	0,115	0,12	0,15	
217	LwK 4.8	23,50	-3,285	-3,56	-4,29	
218	LwK 4.8	31,04	4,255	4,61	5,55	(**)
219	LwK 4.8	26,09	-0,695	-0,75	-0,91	
220	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
221	LwK 4.8	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
222	LwK 4.8	28,93	2,145	2,32	2,80	
223	LwK 4.8	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
224	LwK 4.8	26,80	0,015	0,02	0,02	
225	LwK 4.8	26,60	-0,185	-0,20	-0,24	
226	LwK 4.8	27,03	0,245	0,27	0,32	
227	LwK 4.8	26,60	-0,185	-0,20	-0,24	
228	LwK 4.8	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
229	LwK 4.8	26,34	-0,445	-0,48	-0,58	
230	LwK 4.8	25,26	-1,525	-1,65	-1,99	
231	LwK 4.8	26,13	-0,655	-0,71	-0,85	
232	LwK 4.8	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
234	LwK 4.8	25,53	-1,255	-1,36	-1,64	
236	LwK 4.8	26,17	-0,615	-0,67	-0,80	
238	LwK 4.8	26,13	-0,655	-0,71	-0,85	
239	LwK 4.8	26,50	-0,285	-0,31	-0,37	
242	LwK 4.8	26,05	-0,735	-0,80	-0,96	
243	LwK 4.8	27,40	0,615	0,67	0,80	
244	LwK 4.8	25,80	-0,985	-1,07	-1,29	
245	LwK 4.8	27,01	0,225	0,24	0,29	
246	LwK 4.8	26,30	-0,485	-0,53	-0,63	
247	LwK 4.8	27,34	0,555	0,60	0,72	
248	LwK 4.8	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	
249	LwK 4.8	26,92	0,135	0,15	0,18	
251	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
252	LwK 4.8	26,84	0,055	0,06	0,07	
253	LwK 4.8	25,10	-1,685	-1,82	-2,20	
254	LwK 4.8	27,53	0,745	0,81	0,97	
256	LwK 4.8	26,80	0,015	0,02	0,02	
257	LwK 4.8	26,50	-0,285	-0,31	-0,37	
258	LwK 4.8	25,60	-1,185	-1,28	-1,55	
259	LwK 4.8	26,68	-0,105	-0,11	-0,14	
260	LwK 4.8	25,90	-0,885	-0,96	-1,16	
261	LwK 4.8	33,18	6,395	6,92	8,35	(**)
262	LwK 4.8	25,85	-0,935	-1,01	-1,22	
263	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
264	LwK 4.8	25,90	-0,885	-0,96	-1,16	
265	LwK 4.8	26,00	-0,785	-0,85	-1,02	
266	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
267	LwK 4.8	26,51	-0,275	-0,30	-0,36	
268	LwK 4.8	26,70	-0,085	-0,09	-0,11	
269	LwK 4.8	26,60	-0,185	-0,20	-0,24	
270	LwK 4.8	27,03	0,245	0,27	0,32	
271	LwK 4.8	26,50	-0,285	-0,31	-0,37	
273	LwK 4.8	26,00	-0,785	-0,85	-1,02	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	25,48	-1,305	-1,41	-1,70	
275	LwK 4.8	27,70	0,915	0,99	1,19	
276	LwK 4.8	28,18	1,395	1,51	1,82	
277	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
279	LwK 4.8	27,70	0,915	0,99	1,19	
281	LwK 4.8	26,44	-0,345	-0,37	-0,45	
282	LwK 4.8	24,90	-1,885	-2,04	-2,46	
283	LwK 4.8	26,96	0,175	0,19	0,23	
284	LwK 4.8	25,75	-1,035	-1,12	-1,35	
285	LwK 4.8	22,61	-4,175	-4,52	-5,45	(**)
286	LwK 4.8	23,88	-2,905	-3,14	-3,79	
313	LwK 4.8	25,09	-1,695	-1,83	-2,21	
320	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
321	LwK 4.8	25,94	-0,845	-0,91	-1,10	
339	LwK 4.8	27,20	0,415	0,45	0,54	
345	LwK 4.8	26,49	-0,295	-0,32	-0,39	
346	LwK 4.8	24,60	-2,185	-2,37	-2,85	
351	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
366	LwK 4.8	27,00	0,215	0,23	0,28	
371	LwK 4.8	26,40	-0,385	-0,42	-0,50	

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

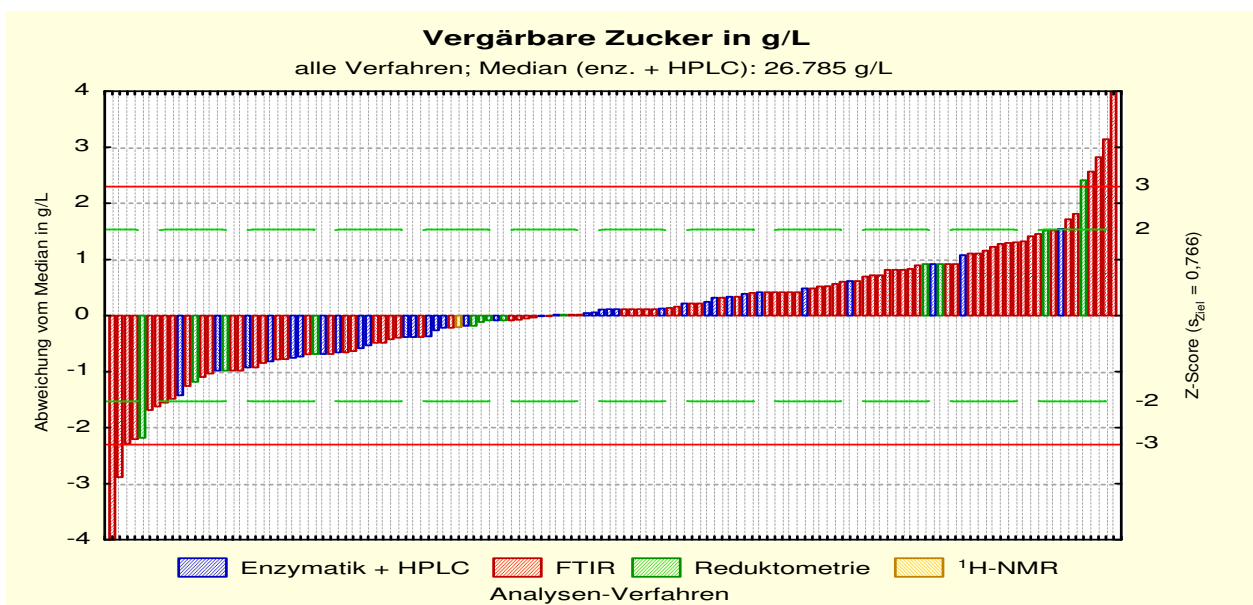
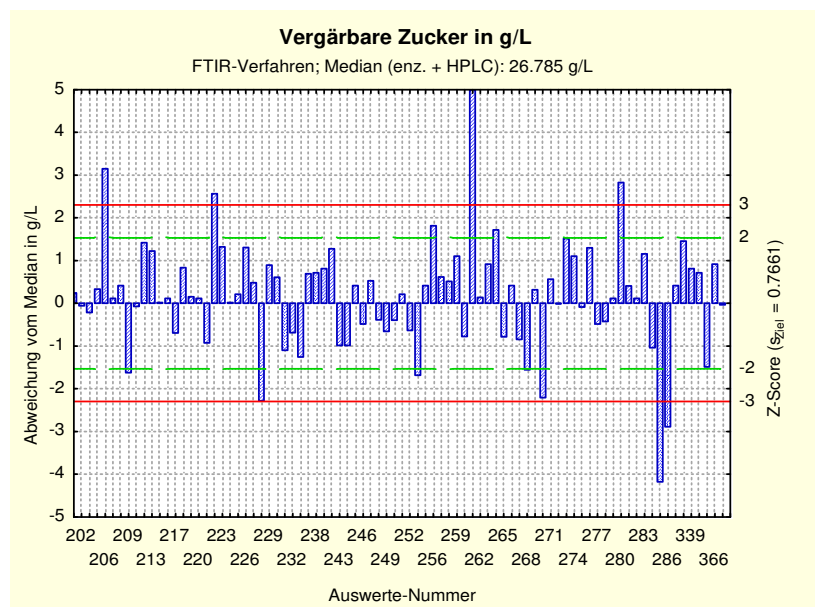
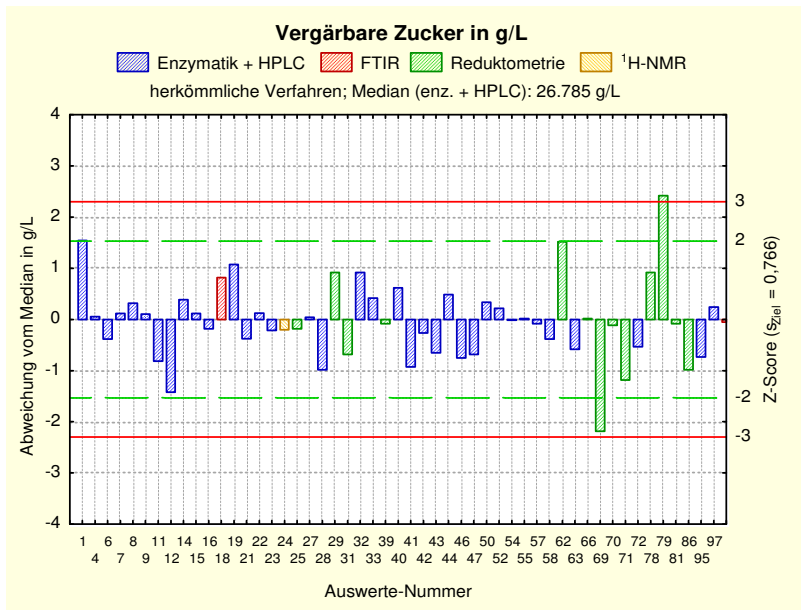
**5.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

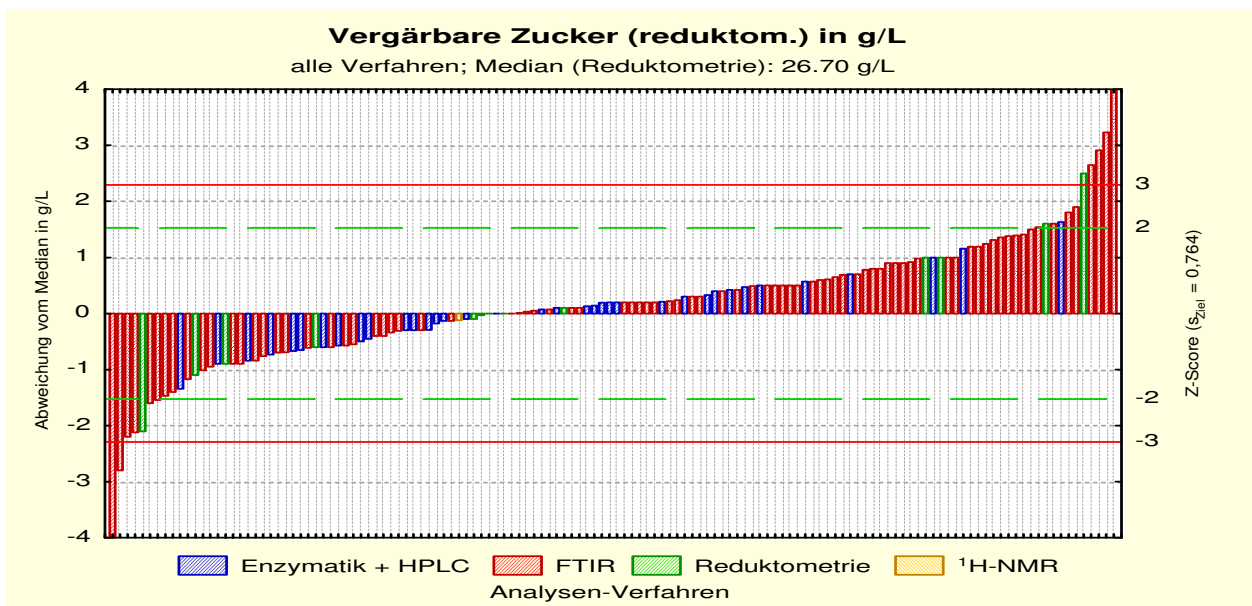
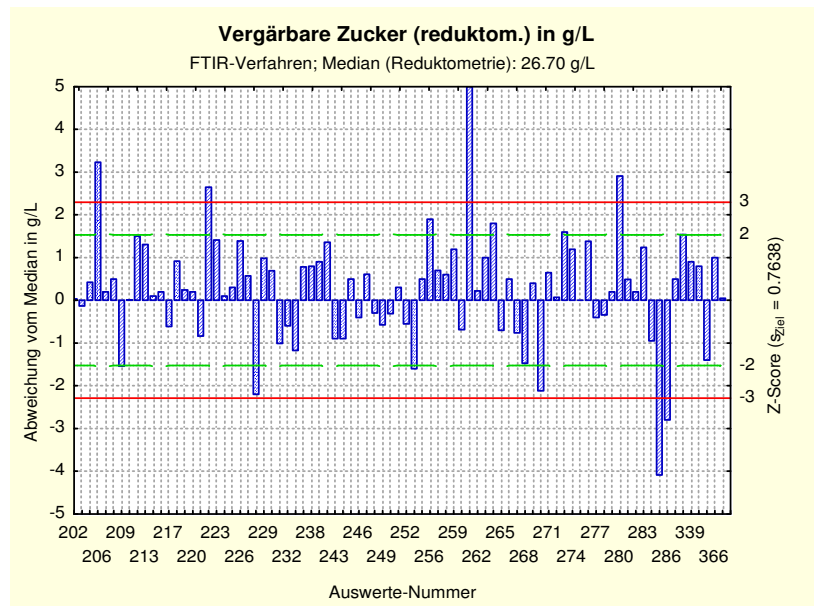
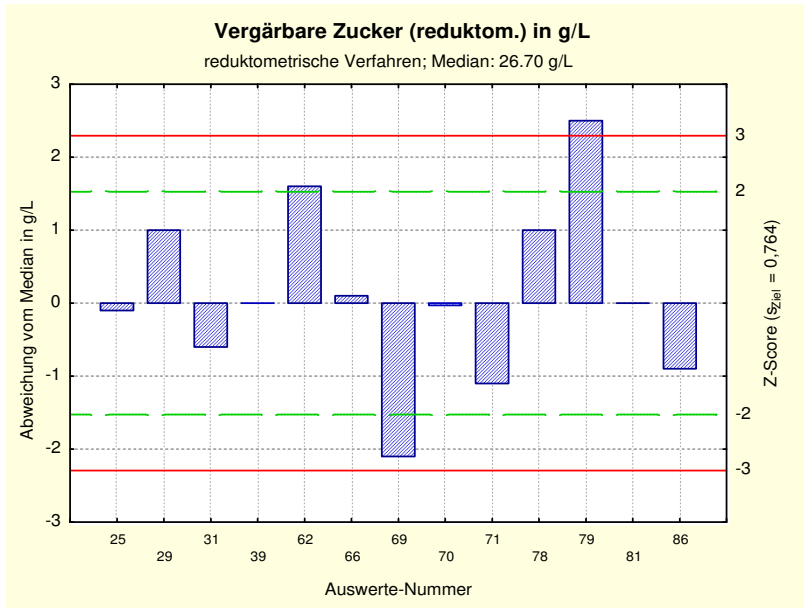
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten	reduktometrisch alle Daten
Gültige Werte	36	13
Minimalwert	25,36	24,60
Mittelwert	26,705	26,805
Median	26,785	26,700
Maximalwert	28,33	29,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,614	1,207
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,102	0,335
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,924	0,921
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,766	0,764
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,584)	(0,584)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,67	1,31
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,80	1,58
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(1,05)	(2,07)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,11	0,36
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,13	0,44
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,17)	(0,57)

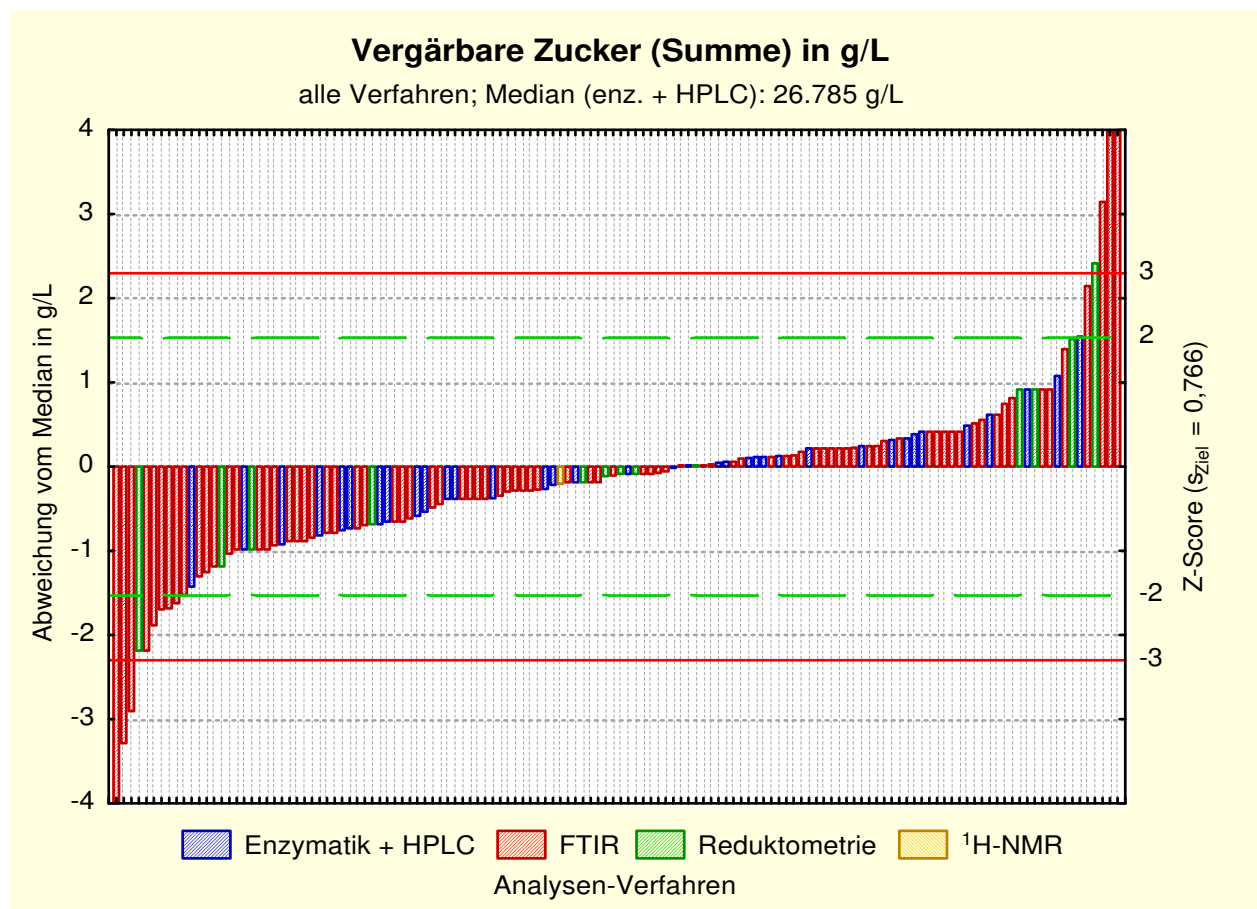
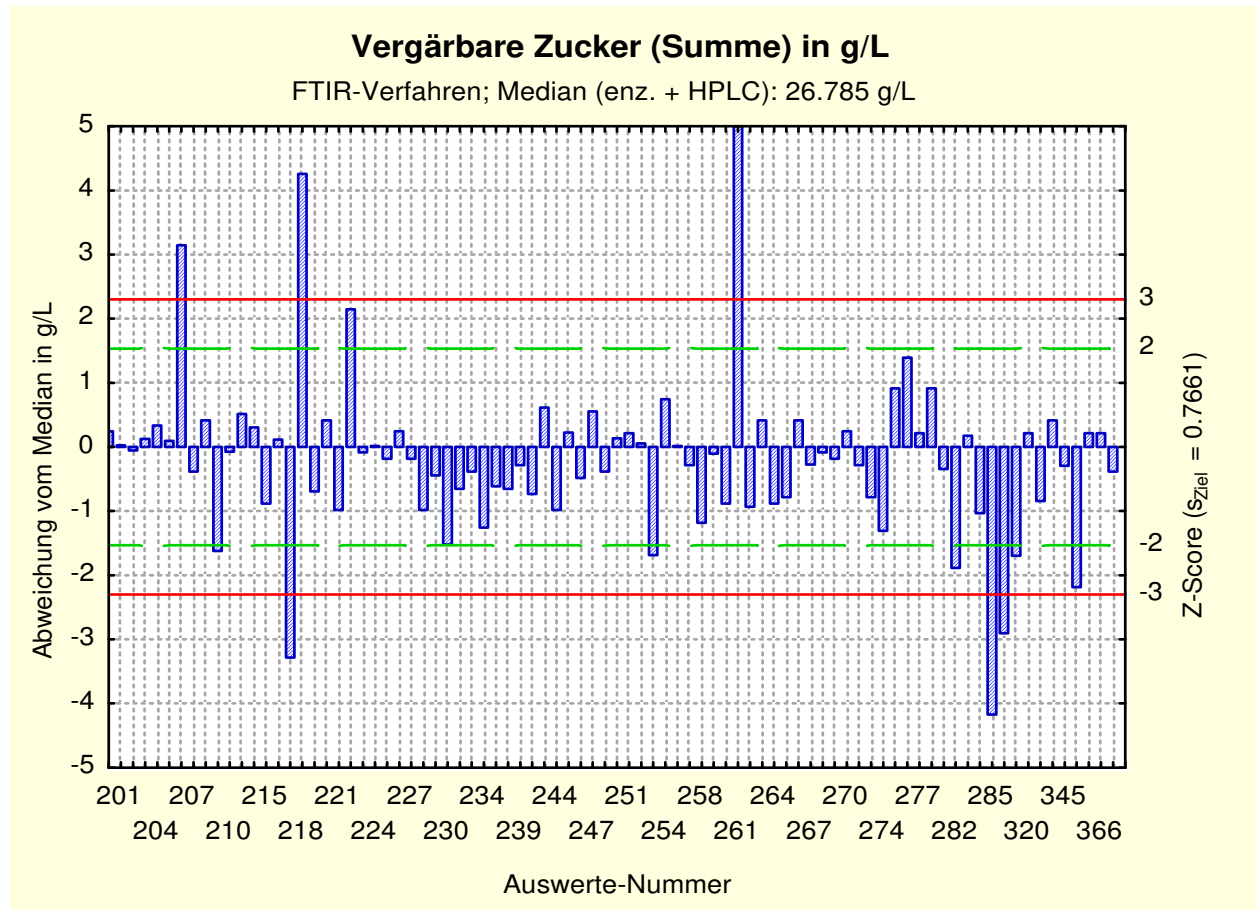
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk.}$  bewertet.

**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	26,670	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	26,700	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	11	26,809	1,444
	reduktometrische Verfahren	13	26,788	1,194
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	23	26,636	0,565
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	26,768	0,648
	enzymatische und HPLC-Verfahren	36	26,688	0,586
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (r)	84	26,969	1,045
	Basis: Vergärbare Zucker (S)	84	26,545	0,806
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	26,580	







## 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	7,03	0,880	3,32	4,21	
02	enzymat. Hand	6,22	0,070	0,26	0,34	
04	HPLC	5,85	-0,300	-1,13	-1,44	
05	enzymat., autom.	6,25	0,100	0,38	0,48	
06	enzymat., autom.	6,05	-0,100	-0,38	-0,48	
07	enzymat. Hand	6,15	0,000	0,00	0,00	
08	enzymat. Hand	6,00	-0,150	-0,57	-0,72	
09	HPLC	6,09	-0,060	-0,23	-0,29	
11	enzymat., autom.	5,69	-0,460	-1,74	-2,20	
12	enzymat., autom.	6,02	-0,130	-0,49	-0,62	
14	HPLC	6,22	0,070	0,26	0,34	
15	enzymat., autom.	6,16	0,010	0,04	0,05	
16	enzymat., autom.	6,10	-0,050	-0,19	-0,24	
19	HPLC	6,20	0,050	0,19	0,24	
21	HPLC	6,08	-0,070	-0,26	-0,34	
22	enzymat., autom.	6,14	-0,010	-0,04	-0,05	
23	HPLC	6,13	-0,020	-0,08	-0,10	
24	NMR	6,38	0,230	0,87	1,10	
27	enzymat., autom.	6,33	0,180	0,68	0,86	
28	HPLC	5,60	-0,550	-2,08	-2,63	
32	enzymat., autom.	6,10	-0,050	-0,19	-0,24	
33	HPLC	6,08	-0,070	-0,26	-0,34	
40	enzymat., autom.	6,30	0,150	0,57	0,72	
41	HPLC	5,96	-0,190	-0,72	-0,91	
42	enzymat., autom.	6,21	0,060	0,23	0,29	
43	enzymat., autom.	5,92	-0,230	-0,87	-1,10	
44	HPLC	6,49	0,340	1,28	1,63	
46	enzymat., autom.	6,26	0,110	0,42	0,53	
47	enzymat., autom.	6,20	0,050	0,19	0,24	
50	enzymat., autom.	6,43	0,280	1,06	1,34	
52	HPLC	6,20	0,050	0,19	0,24	
54	enzymat., autom.	6,24	0,090	0,34	0,43	
55	enzymat., autom.	6,16	0,010	0,04	0,05	
57	enzymat., autom.	6,10	-0,050	-0,19	-0,24	
58	enzymat., autom.	6,28	0,130	0,49	0,62	
63	HPLC	6,14	-0,008	-0,03	-0,04	
66	enzymat. Hand	8,65	2,500	9,45	11,96	(**)
70	enzymat., autom.	6,44	0,290	1,10	1,39	
72	enzymat., autom.	6,05	-0,100	-0,38	-0,48	
79	enzymat. Hand	6,15	0,000	0,00	0,00	
95	enzymat., autom.	5,52	-0,630	-2,38	-3,02	
97	HPLC	6,36	0,210	0,79	1,01	
99	enzymat., autom.	6,00	-0,150	-0,57	-0,72	

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

### 5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,04	-0,110	-0,42	-0,27	
202	FTIR	6,05	-0,100	-0,38	-0,25	
203	FTIR	6,28	0,130	0,49	0,32	
204	FTIR	5,97	-0,180	-0,68	-0,44	
205	FTIR	6,93	0,780	2,95	1,91	
206	FTIR	7,62	1,470	5,55	3,60	
207	FTIR	5,70	-0,450	-1,70	-1,10	
208	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
209	FTIR	6,36	0,210	0,79	0,51	
210	FTIR	6,16	0,010	0,04	0,02	
211	FTIR	6,90	0,750	2,83	1,84	
213	FTIR	6,12	-0,030	-0,11	-0,07	
215	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
216	FTIR	6,36	0,210	0,79	0,51	
217	FTIR	5,35	-0,800	-3,02	-1,96	
218	FTIR	6,79	0,640	2,42	1,57	



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

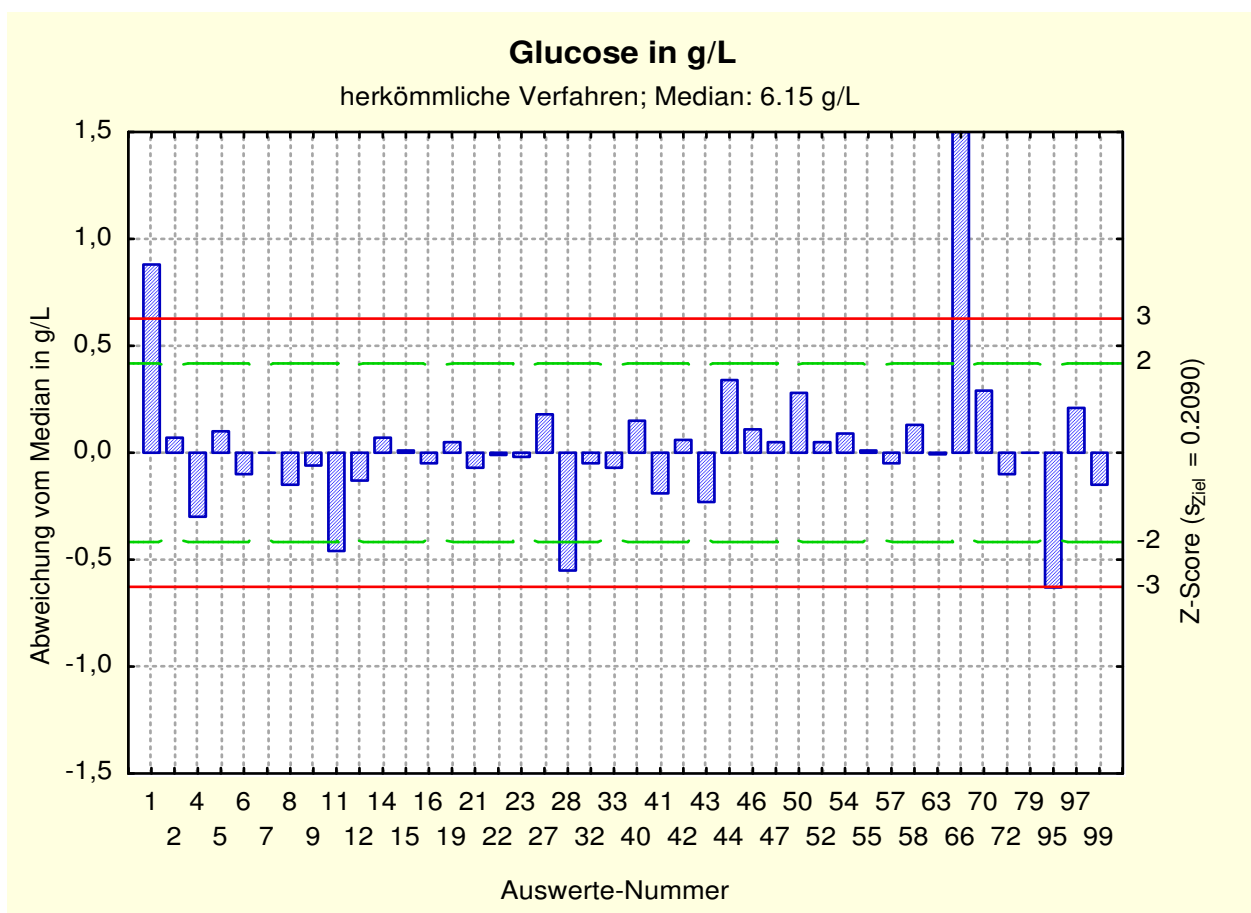
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	5,69	-0,460	-1,74	-1,13	
220	FTIR	6,80	0,650	2,46	1,59	
221	FTIR	5,85	-0,300	-1,13	-0,74	
222	FTIR	6,62	0,470	1,78	1,15	
223	FTIR	6,54	0,390	1,47	0,96	
224	FTIR	6,60	0,450	1,70	1,10	
225	FTIR	6,30	0,150	0,57	0,37	
226	FTIR	6,50	0,350	1,32	0,86	
227	FTIR	6,25	0,100	0,38	0,25	
228	FTIR	6,20	0,050	0,19	0,12	
229	FTIR	6,52	0,370	1,40	0,91	
230	FTIR	5,92	-0,230	-0,87	-0,56	
231	FTIR	4,87	-1,280	-4,84	-3,14	
232	FTIR	5,60	-0,550	-2,08	-1,35	
234	FTIR	5,75	-0,400	-1,51	-0,98	
236	FTIR	6,22	0,070	0,26	0,17	
238	FTIR	6,56	0,410	1,55	1,00	
239	FTIR	8,00	1,850	6,99	4,53	
242	FTIR	5,70	-0,450	-1,70	-1,10	
243	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
244	FTIR	5,70	-0,450	-1,70	-1,10	
245	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
246	FTIR	6,10	-0,050	-0,19	-0,12	
247	FTIR	6,18	0,030	0,11	0,07	
248	FTIR	5,70	-0,450	-1,70	-1,10	
249	FTIR	6,25	0,100	0,38	0,25	
251	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
252	FTIR	6,25	0,100	0,38	0,25	
253	FTIR	6,09	-0,060	-0,23	-0,15	
254	FTIR	6,58	0,430	1,62	1,05	
256	FTIR	6,20	0,050	0,19	0,12	
257	FTIR	6,70	0,550	2,08	1,35	
258	FTIR	5,70	-0,450	-1,70	-1,10	
259	FTIR	6,02	-0,130	-0,49	-0,32	
260	FTIR	6,16	0,010	0,04	0,02	
261	FTIR	12,16	6,010	22,71	14,73	(*)
262	FTIR	6,25	0,100	0,38	0,25	
263	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	
264	FTIR	7,20	1,050	3,97	2,57	
265	FTIR	6,70	0,550	2,08	1,35	
266	FTIR	6,00	-0,150	-0,57	-0,37	
267	FTIR	6,38	0,230	0,87	0,56	
268	FTIR	6,02	-0,130	-0,49	-0,32	
269	FTIR	6,70	0,550	2,08	1,35	
270	FTIR	5,65	-0,500	-1,89	-1,23	
271	FTIR	6,05	-0,100	-0,38	-0,25	
273	FTIR	6,70	0,550	2,08	1,35	
274	FTIR	5,75	-0,400	-1,51	-0,98	
275	FTIR	5,80	-0,350	-1,32	-0,86	
276	FTIR	6,19	0,040	0,15	0,10	
277	FTIR	6,20	0,050	0,19	0,12	
279	FTIR	7,00	0,850	3,21	2,08	
281	FTIR	5,57	-0,580	-2,19	-1,42	
282	FTIR	5,80	-0,350	-1,32	-0,86	
283	FTIR	6,07	-0,080	-0,30	-0,20	
284	FTIR	5,90	-0,250	-0,94	-0,61	
285	FTIR	4,90	-1,250	-4,72	-3,06	
286	FTIR	6,30	0,150	0,57	0,37	
313	FTIR	4,94	-1,210	-4,57	-2,97	
320	FTIR	6,70	0,550	2,08	1,35	
321	FTIR	5,72	-0,430	-1,62	-1,05	
339	FTIR	6,50	0,350	1,32	0,86	
345	FTIR	6,35	0,200	0,76	0,49	
346	FTIR	5,40	-0,750	-2,83	-1,84	
351	FTIR	6,50	0,350	1,32	0,86	
366	FTIR	5,50	-0,650	-2,46	-1,59	
371	FTIR	6,40	0,250	0,94	0,61	

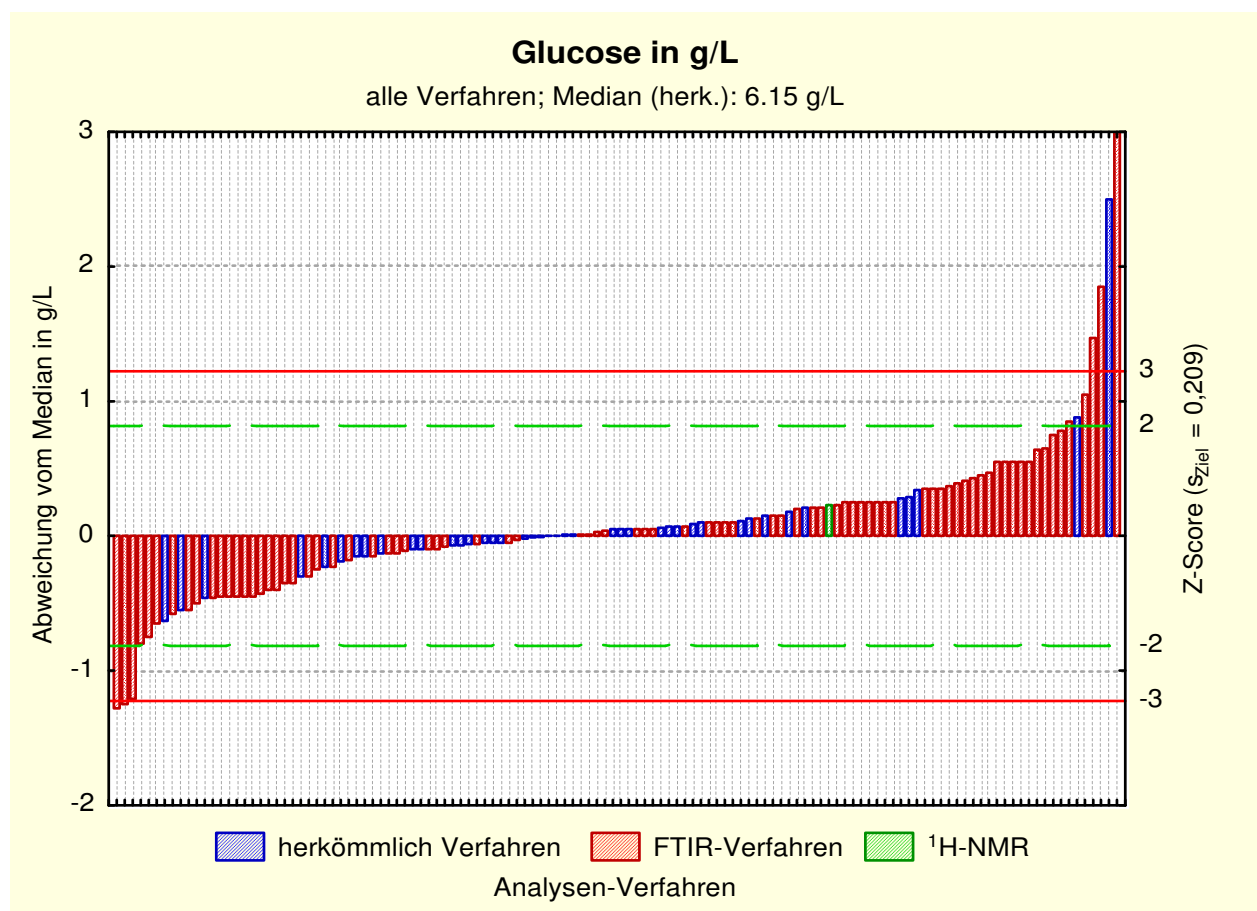
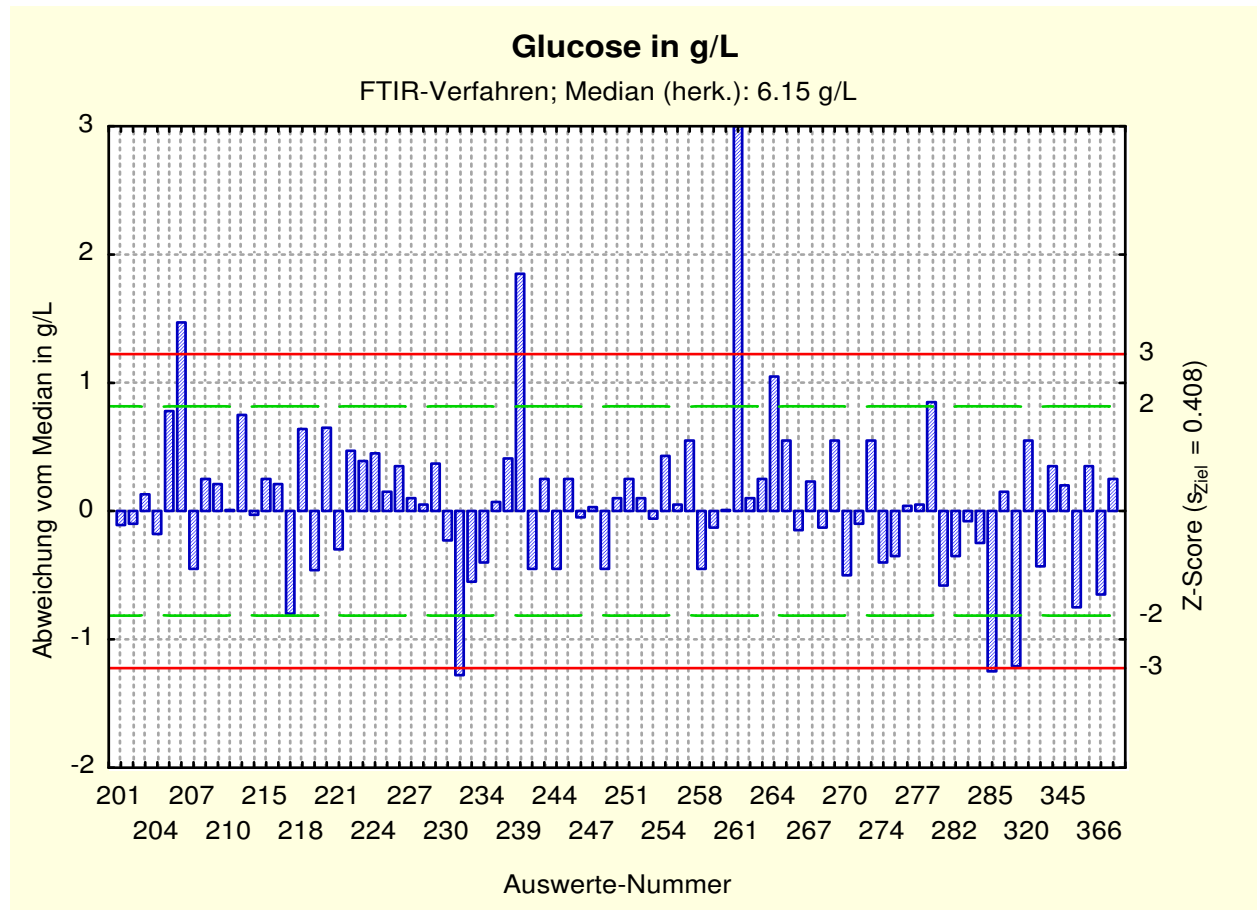
### 5.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	42	41
Minimalwert	5,52	5,52
Mittelwert	6,204	6,144
Median	6,150	6,150
Maximalwert	8,65	7,03
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,456	0,246
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,070	0,038
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,265	0,265
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,209	0,209
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,408	0,408
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,72	0,93
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,18	1,18
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,12	0,60
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,27	0,14
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,34	0,18
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,17	0,09

### 5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	6,119	0,187
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiert	23	6,151	0,168
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, manuell	6	6,473	0,639
	herkömmliche Verfahren	42	6,155	0,175
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,205	0,468
NMR	$^1H$ -Kernresonanzspektroskopie	1	6,380	





## 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	21,30	0,755	1,02	1,26	
02	enzymat. Hand	20,56	0,015	0,02	0,03	
04	HPLC	20,99	0,445	0,60	0,74	
05	enzymat., autom.	21,08	0,535	0,73	0,90	
06	enzymat., autom.	20,33	-0,215	-0,29	-0,36	
07	enzymat. Hand	19,80	-0,745	-1,01	-1,25	
08	enzymat. Hand	21,10	0,555	0,75	0,93	
09	HPLC	20,80	0,255	0,35	0,43	
11	enzymat., autom.	20,28	-0,265	-0,36	-0,44	
12	enzymat., autom.	19,34	-1,208	-1,64	-2,02	
14	HPLC	20,95	0,404	0,55	0,68	
15	enzymat., autom.	20,70	0,155	0,21	0,26	
16	enzymat., autom.	20,40	-0,145	-0,20	-0,24	
19	HPLC	21,66	1,115	1,51	1,87	
21	HPLC	20,33	-0,215	-0,29	-0,36	
22	enzymat., autom.	20,77	0,225	0,31	0,38	
23	HPLC	20,44	-0,105	-0,14	-0,18	
24	NMR	20,20	-0,345	-0,47	-0,58	
27	enzymat., autom.	20,50	-0,045	-0,06	-0,08	
28	HPLC	20,37	-0,175	-0,24	-0,29	
32	enzymat., autom.	21,60	1,055	1,43	1,77	
33	HPLC	21,11	0,565	0,77	0,95	
40	enzymat., autom.	21,10	0,555	0,75	0,93	
41	HPLC	19,90	-0,645	-0,87	-1,08	
42	enzymat., autom.	20,31	-0,235	-0,32	-0,39	
43	enzymat., autom.	20,21	-0,335	-0,45	-0,56	
44	HPLC	20,78	0,236	0,32	0,39	
46	enzymat., autom.	19,77	-0,775	-1,05	-1,30	
47	enzymat., autom.	19,90	-0,645	-0,87	-1,08	
50	enzymat., autom.	20,69	0,145	0,20	0,24	
52	HPLC	20,75	0,205	0,28	0,34	
54	enzymat., autom.	20,53	-0,015	-0,02	-0,03	
55	enzymat., autom.	20,59	0,045	0,06	0,08	
57	enzymat., autom.	20,50	-0,045	-0,06	-0,08	
58	enzymat., autom.	20,12	-0,425	-0,58	-0,71	
63	HPLC	20,07	-0,473	-0,64	-0,79	
66	enzymat. Hand	28,28	7,735	10,49	12,94	(**)
70	enzymat., autom.	22,25	1,705	2,31	2,85	
72	enzymat., autom.	20,20	-0,345	-0,47	-0,58	
79	enzymat. Hand	20,69	0,145	0,20	0,24	
95	enzymat., autom.	20,53	-0,015	-0,02	-0,03	
97	HPLC	20,67	0,125	0,17	0,21	

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

### 5.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	20,77	0,225	0,31	0,38	
202	FTIR	20,68	0,135	0,18	0,23	
203	FTIR	20,63	0,085	0,12	0,14	
204	FTIR	21,15	0,605	0,82	1,01	
205	FTIR	19,95	-0,595	-0,81	-1,00	
206	FTIR	22,31	1,765	2,39	2,95	
207	FTIR	20,70	0,155	0,21	0,26	
208	FTIR	20,80	0,255	0,35	0,43	
209	FTIR	18,80	-1,745	-2,37	-2,92	
210	FTIR	20,55	0,005	0,01	0,01	
211	FTIR	20,40	-0,145	-0,20	-0,24	
213	FTIR	20,97	0,425	0,58	0,71	
215	FTIR	19,50	-1,045	-1,42	-1,75	
216	FTIR	20,54	-0,005	-0,01	-0,01	
217	FTIR	18,15	-2,395	-3,25	-4,01	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	24,25	3,705	5,02	6,20	(**)
219	FTIR	20,40	-0,145	-0,20	-0,24	
220	FTIR	20,40	-0,145	-0,20	-0,24	
221	FTIR	19,95	-0,595	-0,81	-1,00	
222	FTIR	22,31	1,765	2,39	2,95	
223	FTIR	20,16	-0,385	-0,52	-0,64	
224	FTIR	20,20	-0,345	-0,47	-0,58	
225	FTIR	20,30	-0,245	-0,33	-0,41	
226	FTIR	20,53	-0,015	-0,02	-0,03	
227	FTIR	20,35	-0,195	-0,26	-0,33	
228	FTIR	19,60	-0,945	-1,28	-1,58	
229	FTIR	19,82	-0,725	-0,98	-1,21	
230	FTIR	19,34	-1,205	-1,63	-2,02	
231	FTIR	21,26	0,715	0,97	1,20	
232	FTIR	20,80	0,255	0,35	0,43	
234	FTIR	19,78	-0,765	-1,04	-1,28	
236	FTIR	19,95	-0,595	-0,81	-1,00	
238	FTIR	19,57	-0,975	-1,32	-1,63	
239	FTIR	18,50	-2,045	-2,77	-3,42	
242	FTIR	20,35	-0,195	-0,26	-0,33	
243	FTIR	21,00	0,455	0,62	0,76	
244	FTIR	20,10	-0,445	-0,60	-0,74	
245	FTIR	20,61	0,065	0,09	0,11	
246	FTIR	20,20	-0,345	-0,47	-0,58	
247	FTIR	21,16	0,615	0,83	1,03	
248	FTIR	20,70	0,155	0,21	0,26	
249	FTIR	20,67	0,125	0,17	0,21	
251	FTIR	20,60	0,055	0,07	0,09	
252	FTIR	20,59	0,045	0,06	0,08	
253	FTIR	19,01	-1,535	-2,08	-2,57	
254	FTIR	20,95	0,405	0,55	0,68	
256	FTIR	20,60	0,055	0,07	0,09	
257	FTIR	19,80	-0,745	-1,01	-1,25	
258	FTIR	19,90	-0,645	-0,87	-1,08	
259	FTIR	20,66	0,115	0,16	0,19	
260	FTIR	19,74	-0,805	-1,09	-1,35	
261	FTIR	21,02	0,475	0,64	0,79	
262	FTIR	19,60	-0,945	-1,28	-1,58	
263	FTIR	20,80	0,255	0,35	0,43	
264	FTIR	18,70	-1,845	-2,50	-3,09	
265	FTIR	19,30	-1,245	-1,69	-2,08	
266	FTIR	21,20	0,655	0,89	1,10	
267	FTIR	20,13	-0,415	-0,56	-0,69	
268	FTIR	20,68	0,135	0,18	0,23	
269	FTIR	19,90	-0,645	-0,87	-1,08	
270	FTIR	21,38	0,835	1,13	1,40	
271	FTIR	20,45	-0,095	-0,13	-0,16	
273	FTIR	19,30	-1,245	-1,69	-2,08	
274	FTIR	19,73	-0,815	-1,11	-1,36	
275	FTIR	21,90	1,355	1,84	2,27	
276	FTIR	21,99	1,445	1,96	2,42	
277	FTIR	20,80	0,255	0,35	0,43	
279	FTIR	20,70	0,155	0,21	0,26	
281	FTIR	20,87	0,325	0,44	0,54	
282	FTIR	19,10	-1,445	-1,96	-2,42	
283	FTIR	20,89	0,345	0,47	0,58	
284	FTIR	19,85	-0,695	-0,94	-1,16	
285	FTIR	17,71	-2,835	-3,84	-4,74	
286	FTIR	17,58	-2,965	-4,02	-4,96	
313	FTIR	20,15	-0,395	-0,54	-0,66	
320	FTIR	20,30	-0,245	-0,33	-0,41	
321	FTIR	20,22	-0,325	-0,44	-0,54	
339	FTIR	20,70	0,155	0,21	0,26	
345	FTIR	20,14	-0,405	-0,55	-0,68	
346	FTIR	19,20	-1,345	-1,82	-2,25	

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

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
351	FTIR	20,50	-0,045	-0,06	-0,08	
366	FTIR	21,50	0,955	1,30	1,60	
371	FTIR	20,00	-0,545	-0,74	-0,91	

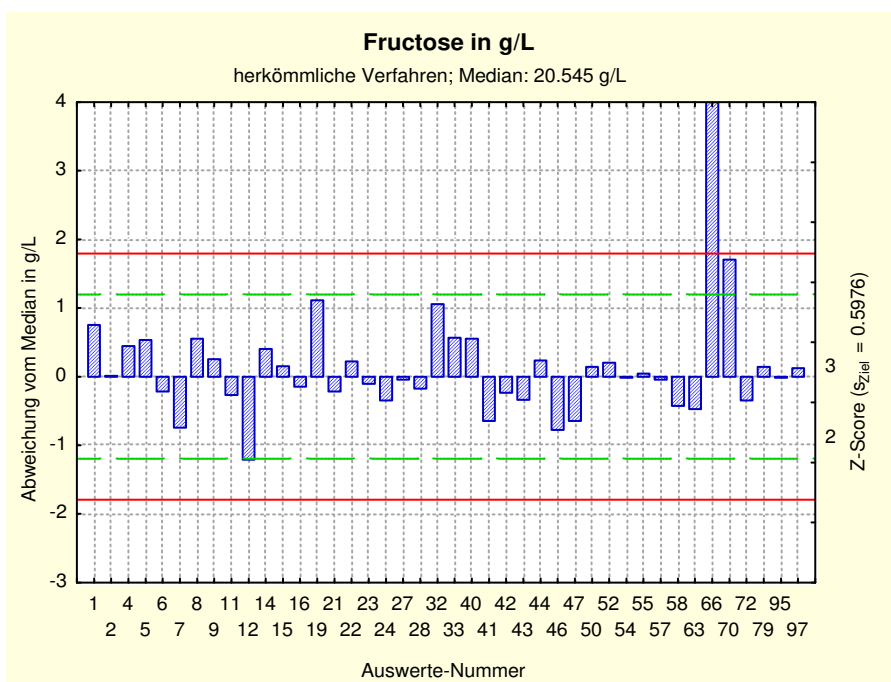
**5.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

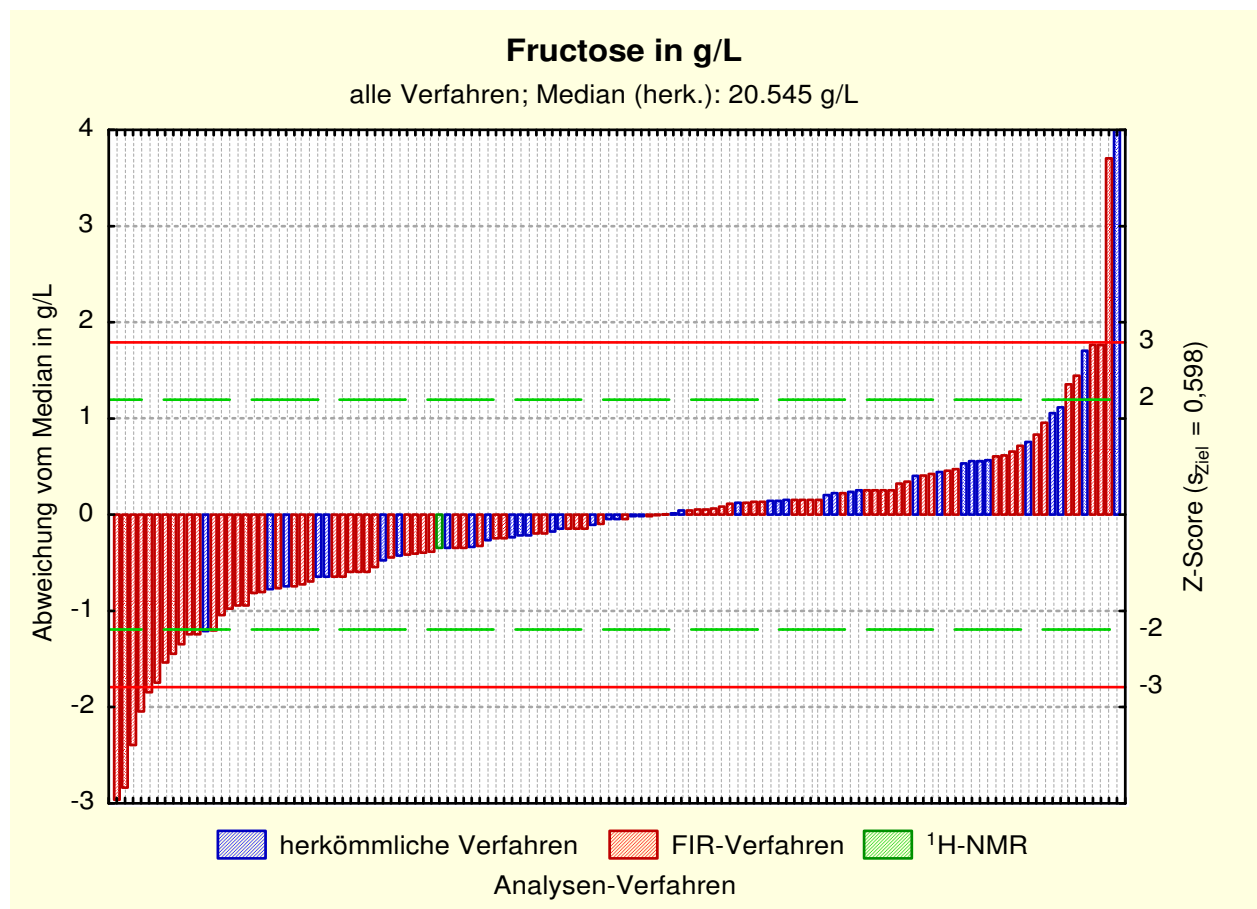
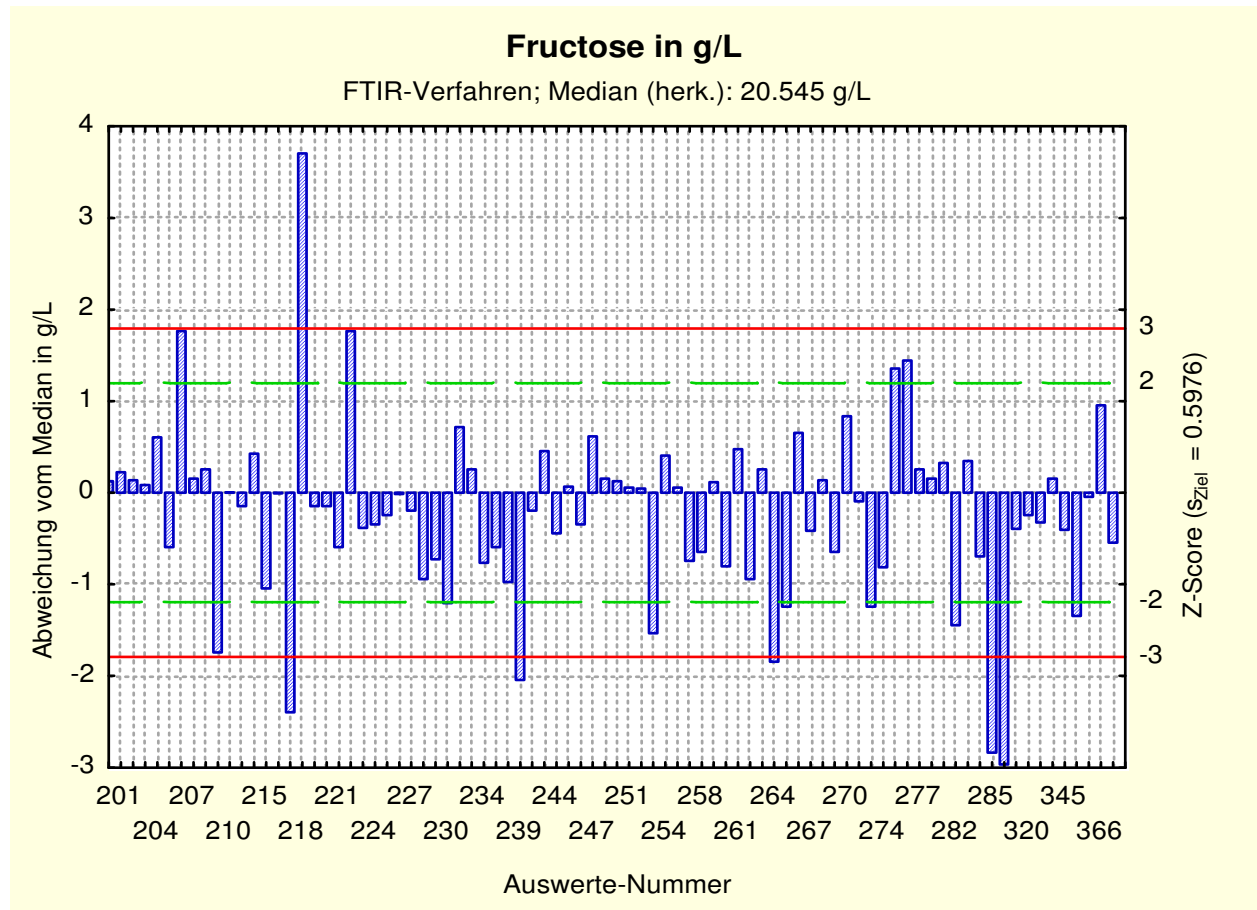
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	41	40
Minimalwert	19,34	19,34
Mittelwert	20,787	20,599
Median	20,560	20,545
Maximalwert	28,28	22,25
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,318	0,554
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,206	0,088
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,738	0,737
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,598	0,598
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,330)	(0,330)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,79	0,75
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,20	0,93
Quotient ( $s_L/s_{exp\ FTIR}$ )	(3,99)	(1,68)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,28	0,12
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,34	0,15
Quotient ( $u_M/s_{\bar{u}\ FTIR}$ )	(0,62)	(0,27)

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

**5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	13	20,661	0,461
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, automatisiert	22	20,486	0,459
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	6	21,008	0,987
	herkömmliche Verfahren	41	20,599	0,514
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	20,326	0,751
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	20,200	





## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,41	0,42	1,88	
02	enzymat. Hand	4,64	-0,35	-1,59	
03	enzymat. Hand	4,96	-0,03	-0,15	
04	HPLC	5,01	0,02	0,08	
05	enzymat. autom.	4,94	-0,05	-0,24	
06	enzymat. autom.	5,04	0,05	0,21	
07	enzymat. Hand	5,00	0,01	0,03	
08	enzymat. Hand	5,14	0,15	0,67	
09	HPLC	5,32	0,33	1,48	
11	enzymat. autom.	4,89	-0,10	-0,46	
12	enzymat. autom.	5,96	0,97	4,39	
14	HPLC	5,00	0,00	0,01	
21	HPLC	4,92	-0,07	-0,33	
22	HPLC	6,22	1,23	5,54	(**)
23	HPLC	4,94	-0,05	-0,24	
24	NMR	4,98	-0,01	-0,06	
27	HPLC	5,05	0,06	0,26	
28	HPLC	4,80	-0,19	-0,87	
33	HPLC	4,90	-0,09	-0,42	
41	HPLC	4,97	-0,02	-0,10	
44	HPLC	4,97	-0,03	-0,12	
47	enzymat. autom.	5,00	0,01	0,03	
52	HPLC	5,05	0,06	0,26	
63	HPLC	5,00	0,00	0,01	
70	enzymat. Hand	4,99	-0,00	-0,01	
79	enzymat. Hand	4,91	-0,08	-0,37	

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

### 5.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	25	24
Minimalwert	4,6	4,6
Mittelwert	5,08	5,03
Median	5,00	4,99
Maximalwert	6,2	6,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,340	0,248
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,068	0,051
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,222	0,222
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,348	0,348
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,53	1,12
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,98	0,71
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,31	0,23
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,20	0,15

### 5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	13	4,995	0,099
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	5,045	0,207
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	7	5,005	0,255
	herkömmliche Verfahren	25	5,001	0,118
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	5,186	0,574
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	1	4,980	



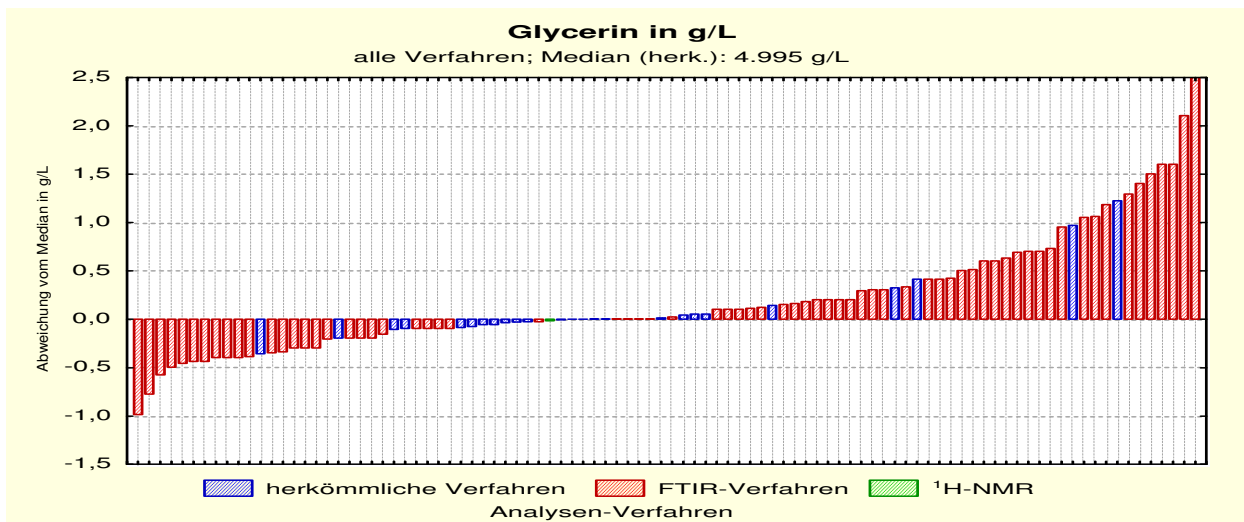
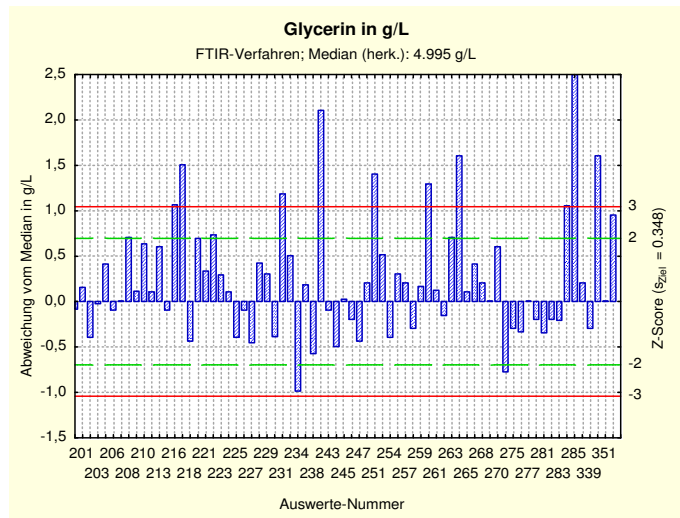
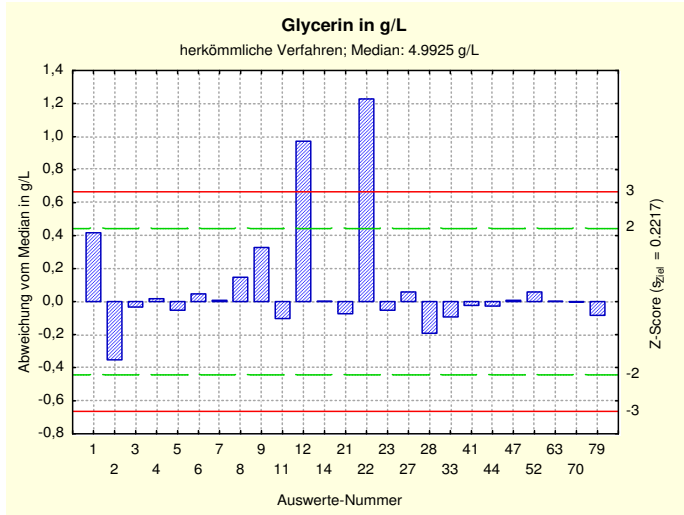
**5.7.4 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,15	0,16	0,70	0,45	
202	FTIR	4,60	-0,40	-1,78	-1,14	
203	FTIR	4,97	-0,03	-0,11	-0,07	
204	FTIR	5,41	0,42	1,87	1,19	
206	FTIR	4,90	-0,09	-0,43	-0,27	
207	FTIR	5,00	0,00	0,02	0,01	
208	FTIR	5,70	0,71	3,18	2,03	
209	FTIR	5,11	0,12	0,52	0,33	
210	FTIR	5,63	0,63	2,86	1,82	
211	FTIR	5,10	0,10	0,47	0,30	
213	FTIR	5,60	0,60	2,73	1,74	
215	FTIR	4,90	-0,09	-0,43	-0,27	
216	FTIR	6,06	1,06	4,80	3,06	
217	FTIR	6,50	1,50	6,79	4,32	
218	FTIR	4,56	-0,44	-1,96	-1,25	
219	FTIR	5,69	0,70	3,13	2,00	
221	FTIR	5,33	0,33	1,51	0,96	
222	FTIR	5,73	0,74	3,31	2,11	
223	FTIR	5,29	0,29	1,33	0,85	
224	FTIR	5,10	0,10	0,47	0,30	
225	FTIR	4,60	-0,40	-1,78	-1,14	
226	FTIR	4,90	-0,09	-0,43	-0,27	
227	FTIR	4,54	-0,46	-2,05	-1,31	
228	FTIR	5,42	0,42	1,92	1,22	
229	FTIR	5,30	0,30	1,38	0,88	
230	FTIR	4,61	-0,38	-1,74	-1,11	
231	FTIR	6,18	1,18	5,34	3,41	
232	FTIR	5,50	0,50	2,28	1,45	
234	FTIR	4,01	-0,99	-4,44	-2,83	
236	FTIR	5,18	0,18	0,83	0,53	
238	FTIR	4,42	-0,58	-2,59	-1,65	
239	FTIR	7,10	2,10	9,49	6,05	(**)
243	FTIR	4,90	-0,09	-0,43	-0,27	
244	FTIR	4,50	-0,50	-2,23	-1,42	
245	FTIR	5,02	0,02	0,11	0,07	
246	FTIR	4,80	-0,20	-0,88	-0,56	
247	FTIR	4,56	-0,44	-1,96	-1,25	
248	FTIR	5,20	0,21	0,92	0,59	
251	FTIR	6,40	1,41	6,33	4,04	
252	FTIR	5,51	0,51	2,32	1,48	
254	FTIR	4,60	-0,40	-1,78	-1,14	
256	FTIR	5,30	0,30	1,38	0,88	
257	FTIR	5,20	0,21	0,92	0,59	
258	FTIR	4,70	-0,29	-1,33	-0,85	
259	FTIR	5,16	0,17	0,74	0,47	
260	FTIR	6,29	1,29	5,84	3,72	
261	FTIR	5,12	0,13	0,56	0,36	
262	FTIR	4,84	-0,16	-0,70	-0,45	
263	FTIR	5,70	0,71	3,18	2,03	
264	FTIR	6,60	1,60	7,24	4,61	
265	FTIR	5,10	0,10	0,47	0,30	
267	FTIR	5,41	0,42	1,87	1,19	
268	FTIR	5,20	0,21	0,92	0,59	
269	FTIR	5,00	0,00	0,02	0,01	
270	FTIR	5,60	0,60	2,73	1,74	
274	FTIR	4,22	-0,78	-3,49	-2,23	
275	FTIR	4,70	-0,29	-1,33	-0,85	
276	FTIR	4,66	-0,33	-1,51	-0,96	
277	FTIR	5,00	0,00	0,02	0,01	
279	FTIR	4,80	-0,20	-0,88	-0,56	
281	FTIR	4,65	-0,34	-1,56	-0,99	
282	FTIR	4,80	-0,20	-0,88	-0,56	
283	FTIR	4,79	-0,21	-0,92	-0,59	
284	FTIR	6,05	1,05	4,76	3,03	
285	FTIR	10,02	5,02	22,66	14,44	(*)

Diese Werte weichen mehr als 50 % (\*) bzw. mehr als 5 Z-Score-Einheiten (\*\*) vom herkömmlichen Median ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
321	FTIR	5,20	0,21	0,92	0,59	
339	FTIR	4,70	-0,29	-1,33	-0,85	
346	FTIR	6,60	1,60	7,24	4,61	
351	FTIR	5,00	0,00	0,02	0,01	
371	FTIR	5,95	0,96	4,31	2,74	



## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
02	elektrom.	3,24	0,005	0,11	
03	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
04	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
05	elektrom.	3,29	0,055	1,16	
06	elektrom.	3,22	-0,015	-0,32	
07	elektrom.	3,23	-0,005	-0,11	
09	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
11	elektrom.	3,31	0,075	1,58	
12	elektrom.	3,25	0,010	0,21	
14	elektrom.	3,22	-0,015	-0,32	
15	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
16	elektrom.	3,18	-0,055	-1,16	
19	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
21	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
22	elektrom.	3,20	-0,035	-0,74	
23	elektrom.	3,20	-0,035	-0,74	
24	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
25	elektrom.	3,29	0,055	1,16	
27	elektrom.	3,23	-0,005	-0,11	
28	elektrom.	3,30	0,065	1,37	
29	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
32	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
33	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
39	elektrom.	3,48	0,245	5,15	(**)
40	elektrom.	3,36	0,125	2,63	
41	elektrom.	3,22	-0,015	-0,32	
42	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
43	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
44	elektrom.	3,10	-0,135	-2,84	
46	elektrom.	3,29	0,055	1,16	
47	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
50	elektrom.	3,17	-0,065	-1,37	
52	elektrom.	3,22	-0,019	-0,40	
57	elektrom.	3,18	-0,055	-1,16	
58	elektrom.	3,25	0,015	0,32	
62	elektrom.	3,20	-0,035	-0,74	
63	elektrom.	3,00	-0,235	-4,94	(**)
66	elektrom.	3,16	-0,075	-1,58	
69	elektrom.	3,10	-0,135	-2,84	
70	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
72	elektrom.	3,48	0,245	5,15	(**)
78	elektrom.	3,26	0,025	0,53	
79	elektrom.	3,21	-0,025	-0,53	
81	elektrom.	3,27	0,035	0,74	
83	elektrom.	3,19	-0,045	-0,95	
86	elektrom.	3,28	0,045	0,95	

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

### 5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	47	3,237	0,0553
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	3,316	0,0936

## 5.8.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,32	0,080	1,62	
202	FTIR	3,42	0,180	3,65	
203	FTIR	3,35	0,110	2,23	
204	FTIR	3,32	0,080	1,62	
205	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
206	FTIR	3,17	-0,070	-1,42	
207	FTIR	3,26	0,020	0,41	
208	FTIR	3,32	0,080	1,62	
209	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
210	FTIR	3,26	0,020	0,41	
211	FTIR	3,24	0,000	0,00	
213	FTIR	3,27	0,030	0,61	
215	FTIR	3,36	0,120	2,43	
216	FTIR	3,35	0,110	2,23	
217	FTIR	3,49	0,250	5,07	(**)
218	FTIR	3,29	0,050	1,01	
219	FTIR	3,34	0,100	2,03	
220	FTIR	2,94	-0,300	-6,09	(**)
221	FTIR	3,40	0,160	3,25	
222	FTIR	3,41	0,170	3,45	
223	FTIR	3,29	0,050	1,01	
224	FTIR	3,18	-0,060	-1,22	
225	FTIR	3,28	0,040	0,81	
226	FTIR	3,28	0,040	0,81	
227	FTIR	3,32	0,080	1,62	
228	FTIR	3,19	-0,050	-1,01	
229	FTIR	3,40	0,160	3,25	
230	FTIR	3,38	0,140	2,84	
231	FTIR	3,32	0,080	1,62	
232	FTIR	3,30	0,060	1,22	
234	FTIR	3,41	0,170	3,45	
236	FTIR	3,40	0,160	3,25	
238	FTIR	3,33	0,090	1,83	
239	FTIR	3,48	0,240	4,87	
242	FTIR	3,39	0,150	3,04	
243	FTIR	3,43	0,190	3,85	
244	FTIR	3,28	0,040	0,81	
245	FTIR	3,33	0,090	1,83	
246	FTIR	3,38	0,140	2,84	
247	FTIR	3,20	-0,040	-0,81	
248	FTIR	3,38	0,140	2,84	
249	FTIR	3,31	0,070	1,42	
251	FTIR	3,36	0,120	2,43	
252	FTIR	3,48	0,240	4,87	
253	FTIR	3,27	0,030	0,61	
254	FTIR	3,29	0,050	1,01	
256	FTIR	3,38	0,140	2,84	
257	FTIR	3,41	0,170	3,45	
258	FTIR	3,33	0,090	1,83	
259	FTIR	3,39	0,150	3,04	
260	FTIR	3,28	0,040	0,81	
261	FTIR	3,19	-0,050	-1,01	
262	FTIR	3,40	0,160	3,25	
263	FTIR	3,11	-0,130	-2,64	
264	FTIR	3,49	0,250	5,07	(**)
265	FTIR	3,26	0,020	0,41	
266	FTIR	3,33	0,090	1,83	
267	FTIR	3,27	0,030	0,61	
268	FTIR	3,24	0,000	0,00	
269	FTIR	3,36	0,120	2,43	
270	FTIR	3,16	-0,080	-1,62	
271	FTIR	3,32	0,080	1,62	
272	FTIR	3,21	-0,030	-0,61	
273	FTIR	3,34	0,100	2,03	
274	FTIR	3,49	0,250	5,07	(**)

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

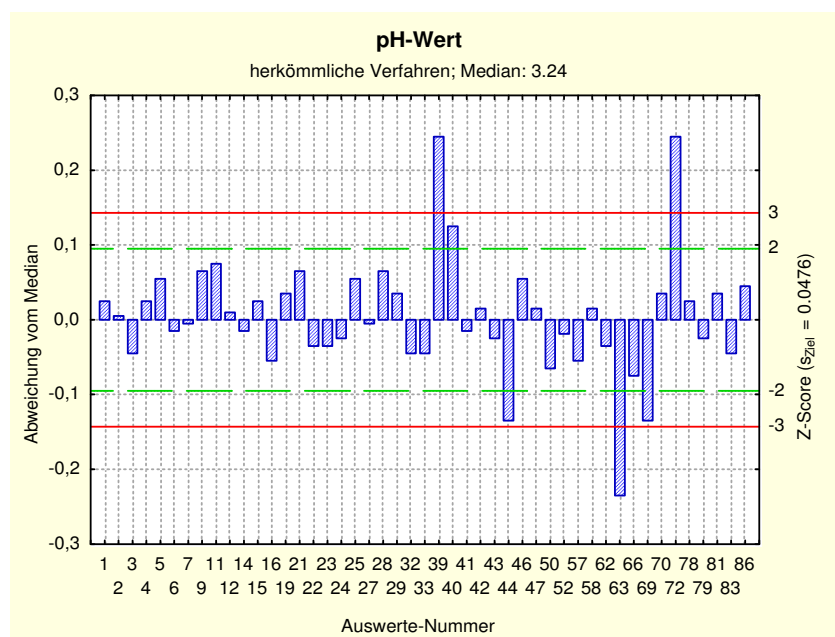
**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

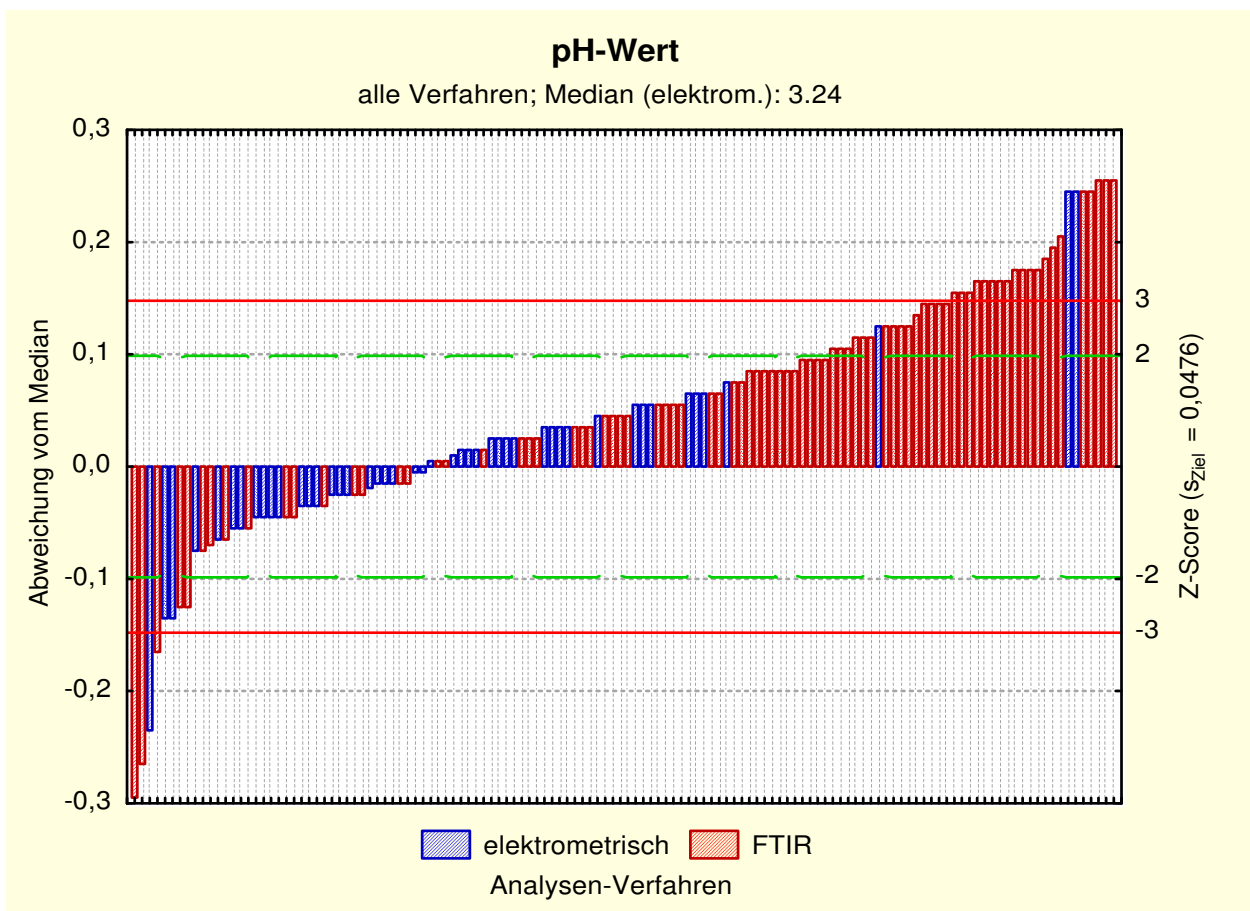
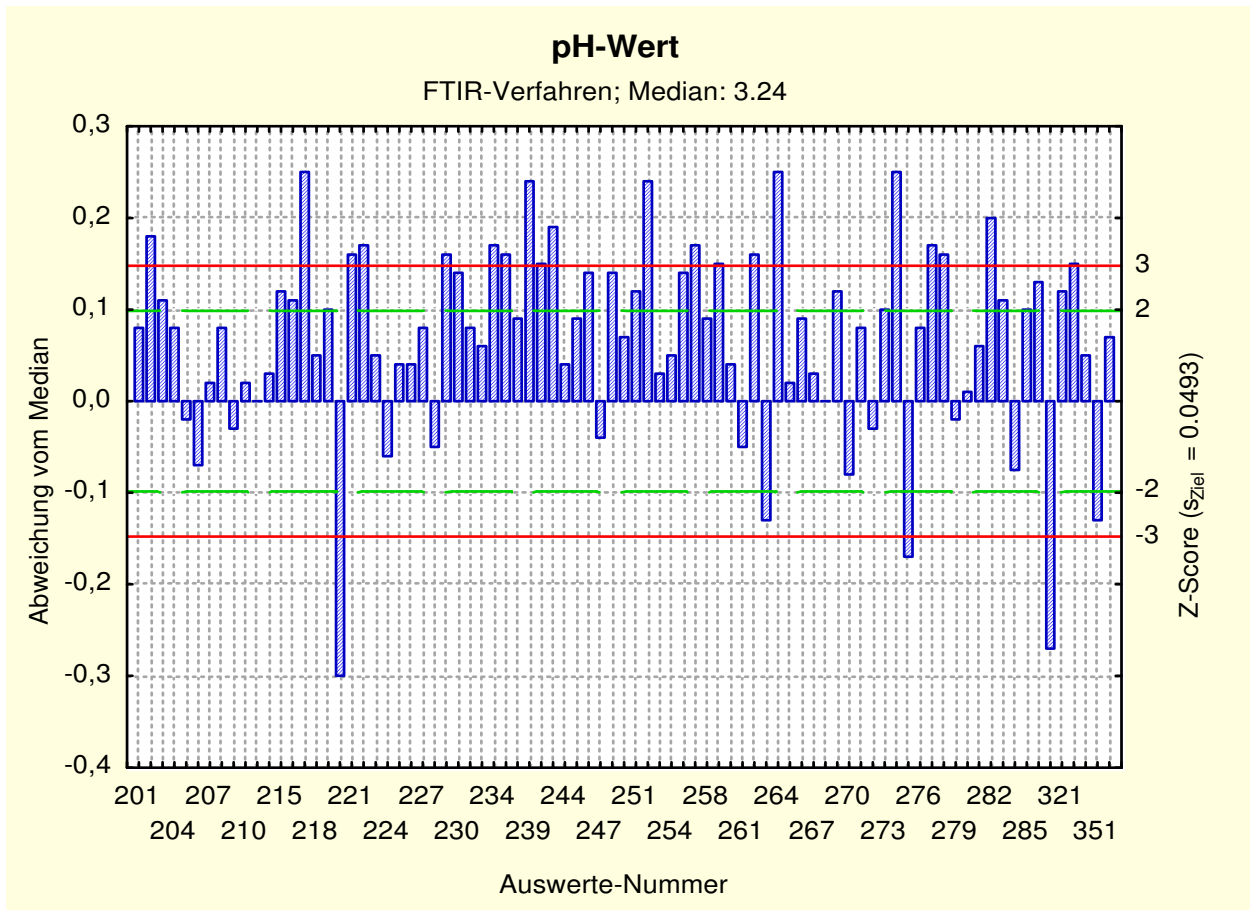
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	3,07	-0,170	-3,45	
276	FTIR	3,32	0,080	1,62	
277	FTIR	3,41	0,170	3,45	
278	FTIR	3,40	0,160	3,25	
279	FTIR	3,22	-0,020	-0,41	
280	FTIR	3,25	0,010	0,20	
281	FTIR	3,30	0,060	1,22	
282	FTIR	3,44	0,200	4,06	
283	FTIR	3,35	0,110	2,23	
284	FTIR	3,17	-0,075	-1,52	
285	FTIR	3,34	0,100	2,03	
286	FTIR	3,37	0,130	2,64	
320	FTIR	2,97	-0,270	-5,48	(**)
321	FTIR	3,36	0,120	2,43	
339	FTIR	3,39	0,150	3,04	
346	FTIR	3,29	0,050	1,01	
351	FTIR	3,11	-0,130	-2,64	
366	FTIR	3,31	0,070	1,42	

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

**5.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	47	44
Minimalwert	3,00	3,10
Mittelwert	3,239	3,234
Median	3,240	3,235
Maximalwert	3,48	3,36
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0800	0,0529
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0117	0,0080
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,68	1,11
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,62	1,07
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25	0,17
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,24	0,16





## 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	5,53	-0,105	-0,43	-0,98	
02	LwK 5.2.1	5,64	0,005	0,02	0,05	
03	LwK 5.2.1	5,62	-0,015	-0,06	-0,14	
05	LwK 5.2.1	5,56	-0,075	-0,31	-0,70	
06	LwK 5.1	5,53	-0,105	-0,43	-0,98	
07	LwK 5.1	5,58	-0,055	-0,22	-0,51	
08	LwK 5.2.1	5,86	0,225	0,92	2,10	
09	LwK 5.2.1	5,58	-0,055	-0,22	-0,51	
11	LwK 5.1	5,43	-0,205	-0,83	-1,91	
12	LwK 5.2.1	5,53	-0,110	-0,45	-1,03	
14	LwK 5.1	5,72	0,085	0,35	0,79	
15	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
16	LwK 5.2.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
18	LwK 5.2.2	5,70	0,065	0,26	0,61	
19	LwK 5.2.1	5,77	0,135	0,55	1,26	
21	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
22	LwK 5.1	5,53	-0,105	-0,43	-0,98	
23	LwK 5.1	5,80	0,165	0,67	1,54	
24	LwK 5.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
27	LwK 5.1	5,69	0,055	0,22	0,51	
28	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
29	LwK 5.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
32	LwK 5.2.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
33	LwK 5.1	5,69	0,055	0,22	0,51	
39	LwK 5.1	5,65	0,015	0,06	0,14	
40	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
41	LwK 5.2.1	5,71	0,075	0,31	0,70	
42	LwK 5.1	5,56	-0,075	-0,31	-0,70	
43	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
44	LwK 5.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
46	LwK 5.1	5,62	-0,015	-0,06	-0,14	
47	LwK 5.1	5,63	-0,005	-0,02	-0,05	
50	LwK 5.1	5,66	0,025	0,10	0,23	
52	LwK 5.1	5,61	-0,025	-0,10	-0,23	
54	LwK 5.2.1	5,80	0,165	0,67	1,54	
55	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
57	LwK 5.2.2	6,20	0,565	2,30	5,27	(**)
58	LwK 5.2.1	5,62	-0,015	-0,06	-0,14	
62	LwK 5.2.1	5,59	-0,045	-0,18	-0,42	
63	LwK 5.2.2	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
66	LwK 5.1	5,56	-0,075	-0,31	-0,70	
69	LwK 5.2.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
70	LwK 5.1	5,46	-0,175	-0,71	-1,63	
71	LwK 5.1	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
72	LwK 5.2.1	5,87	0,235	0,96	2,19	
78	LwK 5.1	5,94	0,305	1,24	2,85	
79	LwK 5.1	5,72	0,085	0,35	0,79	
81	LwK 5.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
83	LwK 5.2.1	5,70	0,065	0,26	0,61	
86	LwK 5.2.2	5,60	-0,035	-0,14	-0,33	
90	LwK 5.2.1	5,71	0,075	0,31	0,70	

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

### 5.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	29	5,643	0,083
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01,			
	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	18	5,660	0,109
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	4	5,763	0,300
	herkömmliche Verfahren	51	5,650	0,093
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	86	5,684	0,179

## 5.9.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,63	-0,010	-0,04	-0,07	
202	LwK 5.3	5,62	-0,020	-0,08	-0,14	
203	LwK 5.3	5,58	-0,060	-0,24	-0,41	
204	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
205	LwK 5.3	5,84	0,200	0,81	1,38	
206	LwK 5.3	5,69	0,050	0,20	0,34	
207	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
208	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
209	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
210	LwK 5.3	5,61	-0,030	-0,12	-0,21	
211	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
213	LwK 5.3	5,66	0,020	0,08	0,14	
215	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
216	LwK 5.3	5,85	0,210	0,85	1,45	
217	LwK 5.3	5,72	0,080	0,33	0,55	
218	LwK 5.3	5,46	-0,180	-0,73	-1,24	
219	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
220	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
221	LwK 5.3	5,47	-0,170	-0,69	-1,17	
222	LwK 5.3	5,73	0,090	0,37	0,62	
223	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
224	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
225	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
226	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
227	LwK 5.3	5,58	-0,060	-0,24	-0,41	
228	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
229	LwK 5.3	5,78	0,140	0,57	0,97	
230	LwK 5.3	5,43	-0,210	-0,85	-1,45	
231	LwK 5.3	5,33	-0,310	-1,26	-2,14	
232	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
234	LwK 5.3	5,91	0,270	1,10	1,86	
236	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
238	LwK 5.3	5,55	-0,090	-0,37	-0,62	
239	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
242	LwK 5.3	5,78	0,140	0,57	0,97	
243	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
244	LwK 5.3	5,54	-0,100	-0,41	-0,69	
245	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
246	LwK 5.3	6,10	0,460	1,87	3,17	
247	LwK 5.3	5,82	0,180	0,73	1,24	
248	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
249	LwK 5.3	5,65	0,010	0,04	0,07	
250	LwK 5.3	5,72	0,080	0,33	0,55	
251	LwK 5.3	5,70	0,060	0,24	0,41	
252	LwK 5.3	5,54	-0,100	-0,41	-0,69	
253	LwK 5.3	5,99	0,350	1,42	2,41	
254	LwK 5.3	6,01	0,370	1,50	2,55	
256	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
257	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
258	LwK 5.3	5,55	-0,090	-0,37	-0,62	
259	LwK 5.3	5,74	0,100	0,41	0,69	
260	LwK 5.3	5,96	0,320	1,30	2,21	
261	LwK 5.3	5,82	0,180	0,73	1,24	
262	LwK 5.3	5,24	-0,400	-1,63	-2,76	
263	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
264	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
265	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
266	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
267	LwK 5.3	5,68	0,040	0,16	0,28	
268	LwK 5.3	5,56	-0,080	-0,33	-0,55	
269	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
270	LwK 5.3	5,66	0,020	0,08	0,14	
271	LwK 5.3	5,54	-0,105	-0,43	-0,72	
272	LwK 5.3	5,81	0,170	0,69	1,17	
273	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	



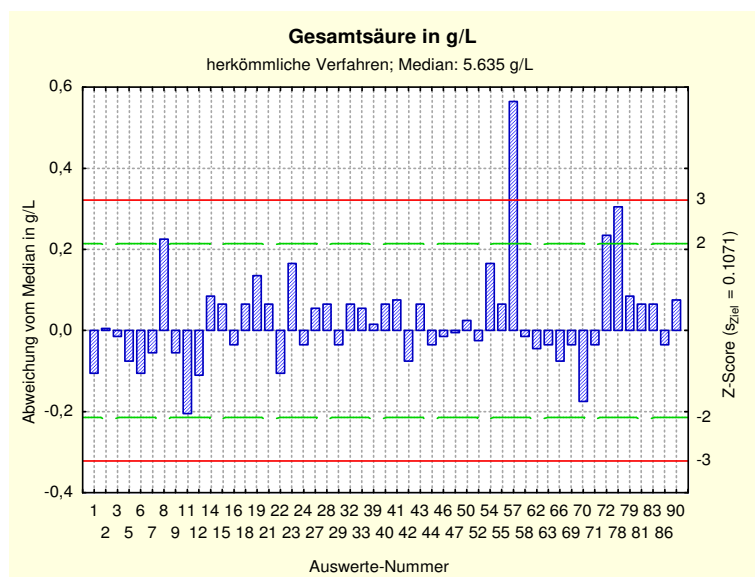
**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

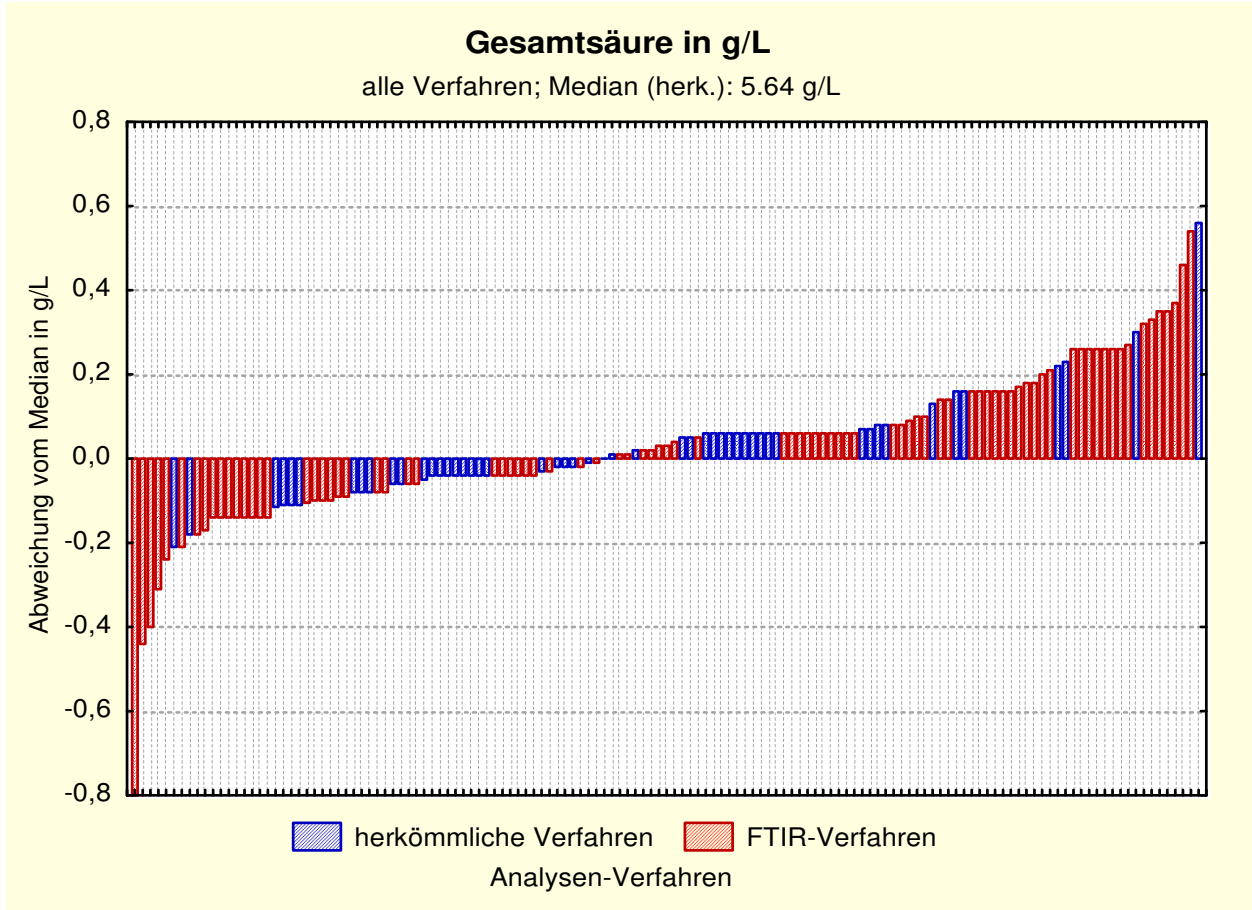
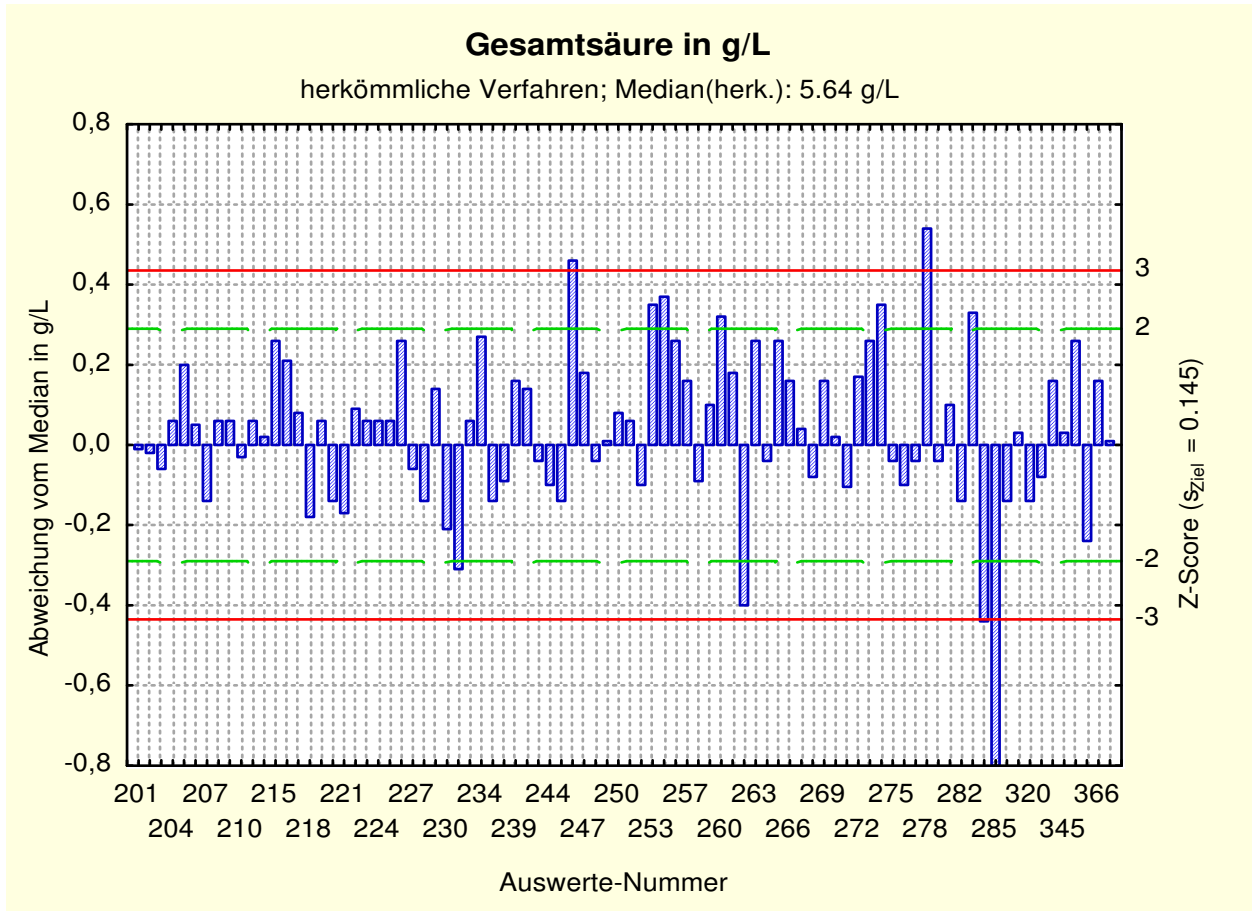
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 5.3	5,99	0,350	1,42	2,41	
275	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
276	LwK 5.3	5,54	-0,100	-0,41	-0,69	
277	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
278	LwK 5.3	6,18	0,540	2,20	3,72	
279	LwK 5.3	5,60	-0,040	-0,16	-0,28	
281	LwK 5.3	5,74	0,100	0,41	0,69	
282	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
283	LwK 5.3	5,97	0,330	1,34	2,28	
284	LwK 5.3	5,20	-0,440	-1,79	-3,03	
285	LwK 5.3	4,39	-1,250	-5,08	-8,62	(**)
286	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
313	LwK 5.3	5,67	0,030	0,12	0,21	
320	LwK 5.3	5,50	-0,140	-0,57	-0,97	
321	LwK 5.3	5,56	-0,080	-0,33	-0,55	
339	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
345	LwK 5.3	5,67	0,030	0,12	0,21	
346	LwK 5.3	5,90	0,260	1,06	1,79	
351	LwK 5.3	5,40	-0,240	-0,98	-1,66	
366	LwK 5.3	5,80	0,160	0,65	1,10	
371	LwK 5.3	5,65	0,010	0,04	0,07	

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

**5.9.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	51	50
Minimalwert	5,43	5,43
Mittelwert	5,662	5,651
Median	5,640	5,635
Maximalwert	6,20	5,94
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,125	0,100
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,018	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,246	0,246
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,145	0,145
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,51	0,41
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,17	0,93
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,86	0,68
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,07	0,06
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,16	0,13
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,12	0,10





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,85	-0,050	-0,51	
02	IC	1,84	-0,065	-0,67	
05	photometr.	1,66	-0,240	-2,46	
06	HPLC	1,86	-0,040	-0,41	
07	HPLC	1,78	-0,120	-1,23	
08	HPLC	1,77	-0,130	-1,33	
09	IC	1,82	-0,080	-0,82	
11	photometr., autom.	2,03	0,130	1,33	
12	photometr., autom.	1,68	-0,224	-2,30	
16	photometr., autom.	2,20	0,300	3,07	
19	IC	1,90	0,000	0,00	
22	HPLC	1,91	0,010	0,10	
23	HPLC	2,02	0,120	1,23	
24	NMR	1,95	0,050	0,51	
27	photometr., autom.	1,66	-0,240	-2,46	
28	HPLC	1,93	0,025	0,26	
32	photometr., autom.	2,30	0,400	4,10	
33	photometr.	2,20	0,300	3,07	
40	photometr., autom.	1,69	-0,210	-2,15	
43	photometr.	1,85	-0,050	-0,51	
47	photometr., autom.	2,10	0,200	2,05	
50	photometr., autom.	1,56	-0,340	-3,48	
52	HPLC	2,60	0,700	7,17	(**)
57	photometr., autom.	2,10	0,200	2,05	
58	photometr., autom.	2,06	0,161	1,65	
63	photometr.	2,30	0,400	4,10	
70	photometr.	2,03	0,130	1,33	
72	photometr., autom.	1,41	-0,490	-5,02	(**)
79	photometr.	1,85	-0,050	-0,51	
90	HPLC	1,92	0,020	0,20	
95	photometr., autom.	1,66	-0,240	-2,46	
102	IC	1,96	0,060	0,61	

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

**5.10.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
202	FTIR	2,37	0,470	4,82	2,07	
203	FTIR	2,41	0,510	5,23	2,25	
204	FTIR	2,29	0,390	4,00	1,72	
205	FTIR	2,15	0,250	2,56	1,10	
206	FTIR	2,59	0,690	7,07	3,04	
208	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
209	FTIR	2,38	0,480	4,92	2,11	
210	FTIR	2,17	0,270	2,77	1,19	
211	FTIR	2,60	0,700	7,17	3,08	
213	FTIR	1,82	-0,080	-0,82	-0,35	
215	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
216	FTIR	2,36	0,460	4,71	2,03	
217	FTIR	2,45	0,550	5,64	2,42	
218	FTIR	3,69	1,790	18,34	7,89	(*)
219	FTIR	2,26	0,360	3,69	1,59	
220	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
221	FTIR	2,57	0,670	6,87	2,95	
222	FTIR	2,06	0,160	1,64	0,70	
223	FTIR	1,13	-0,770	-7,89	-3,39	
224	FTIR	2,17	0,270	2,77	1,19	
225	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
226	FTIR	2,13	0,230	2,36	1,01	

(\*) 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
227	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
228	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
229	FTIR	2,48	0,580	5,94	2,56	
230	FTIR	2,21	0,310	3,18	1,37	
231	FTIR	2,17	0,270	2,77	1,19	
232	FTIR	2,00	0,100	1,02	0,44	
234	FTIR	2,36	0,460	4,71	2,03	
236	FTIR	2,74	0,840	8,61	3,70	
238	FTIR	2,26	0,360	3,69	1,59	
239	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
242	FTIR	2,47	0,570	5,84	2,51	
243	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
244	FTIR	1,88	-0,020	-0,20	-0,09	
245	FTIR	1,56	-0,340	-3,48	-1,50	
246	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
247	FTIR	2,66	0,760	7,79	3,35	
248	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
249	FTIR	1,93	0,030	0,31	0,13	
251	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
252	FTIR	2,74	0,840	8,61	3,70	
254	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
256	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
257	FTIR	2,60	0,700	7,17	3,08	
258	FTIR	2,91	1,010	10,35	4,45	
259	FTIR	1,68	-0,220	-2,25	-0,97	
260	FTIR	2,70	0,800	8,20	3,52	
261	FTIR	2,16	0,260	2,66	1,15	
262	FTIR	2,33	0,430	4,41	1,89	
263	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
264	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
267	FTIR	2,86	0,960	9,84	4,23	
268	FTIR	2,06	0,160	1,64	0,70	
269	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
270	FTIR	2,03	0,130	1,33	0,57	
271	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
272	FTIR	2,68	0,780	7,99	3,44	
273	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
274	FTIR	2,28	0,380	3,89	1,67	
275	FTIR	2,00	0,100	1,02	0,44	
276	FTIR	2,38	0,480	4,92	2,11	
277	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
278	FTIR	1,46	-0,440	-4,51	-1,94	
279	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
280	FTIR	5,78	3,880	39,76	17,09	(*)
281	FTIR	2,31	0,410	4,20	1,81	
282	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
283	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
284	FTIR	2,40	0,505	5,18	2,22	
285	FTIR	0,00	-1,900	-19,47	-8,37	(*)
286	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
320	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
321	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
339	FTIR	1,50	-0,400	-4,10	-1,76	
346	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
351	FTIR	2,60	0,700	7,17	3,08	

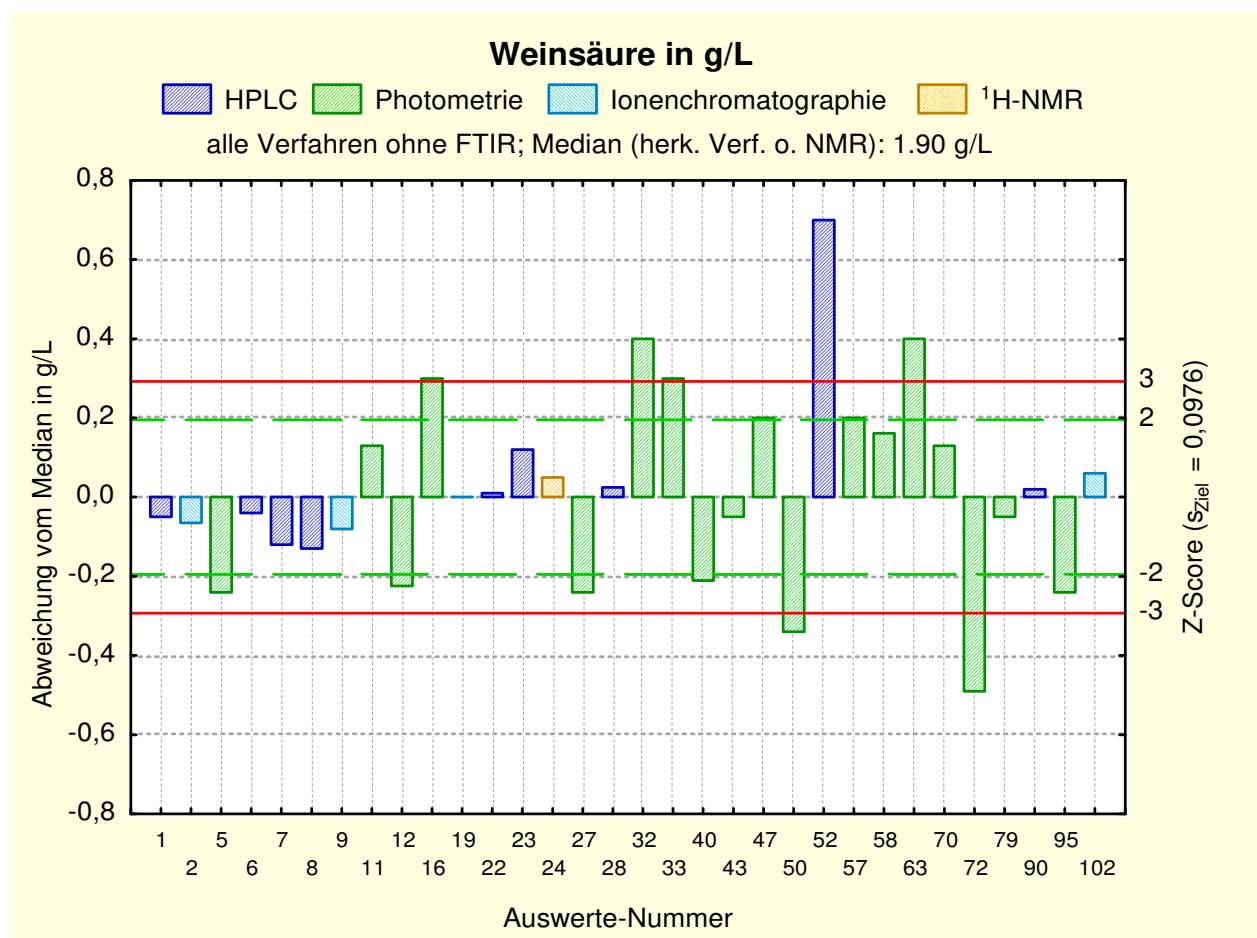
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

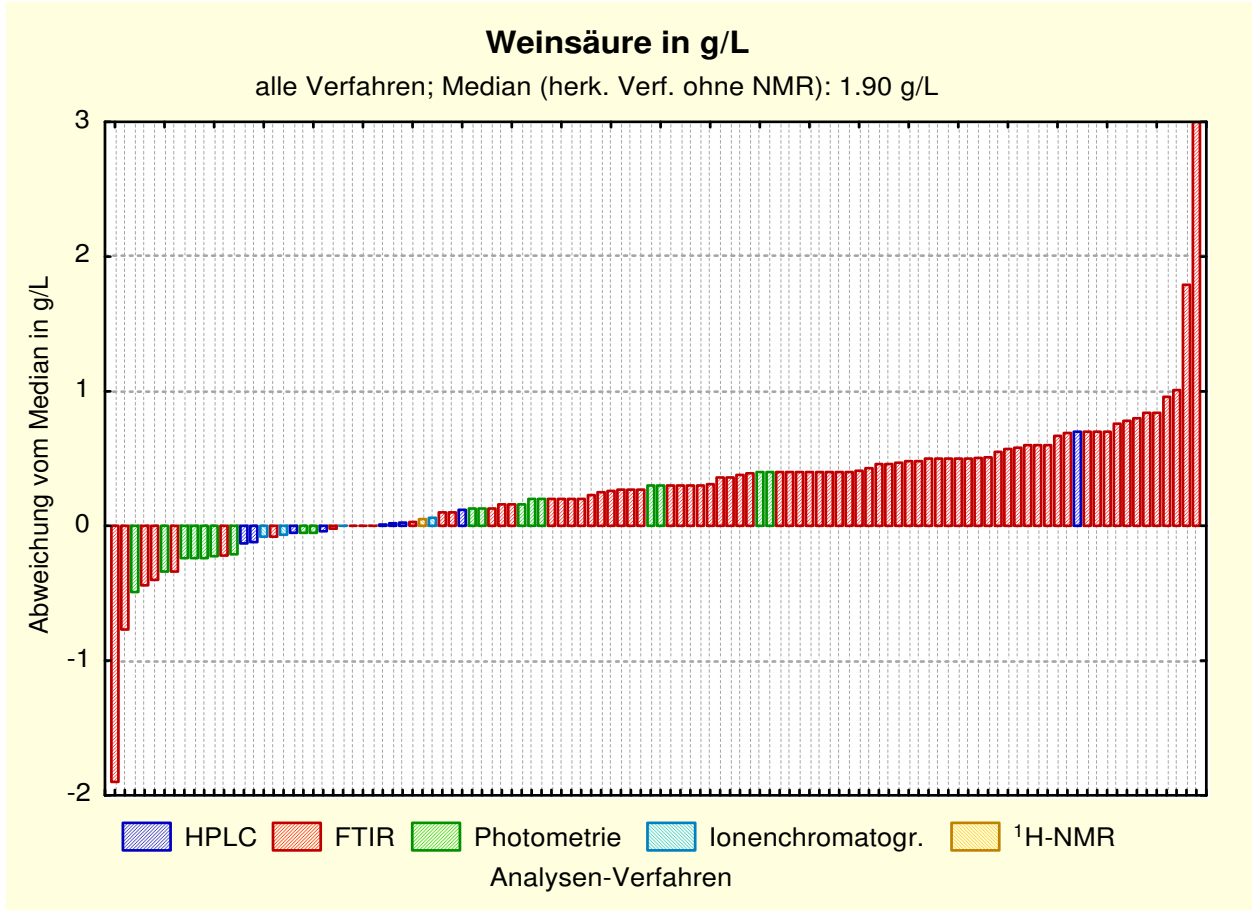
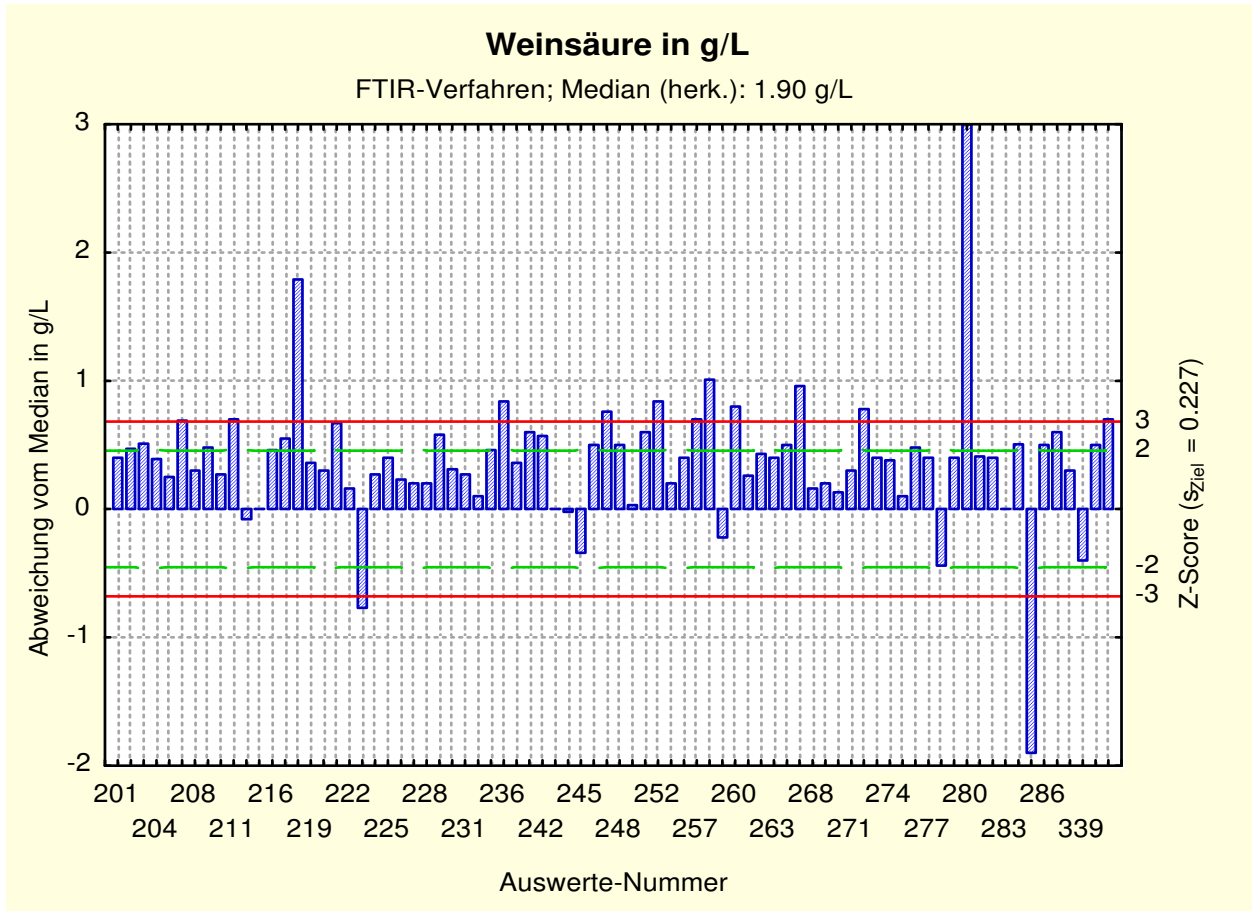
**5.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	31	29
Minimalwert	1,41	1,56
Mittelwert	1,919	1,913
Median	1,900	1,900
Maximalwert	2,60	2,30
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,246	0,197
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,044	0,037
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,098	0,098
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227	0,227
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,52	2,02
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,08	0,87
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,45	0,38
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,19	0,16

**5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	1,901	0,112
photometr.	photometrisch n. Rebelein	6	1,982	0,273
phot. autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	12	1,871	0,329
IC	Ionenchromatographie	4	1,878	0,071
	herkömmliche Verfahren	31	1,090	0,232
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	2,282	0,291
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	1,950	





## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,460	0,1134	4,93	3,97	
02	OIV SO2-korr.	0,362	0,0154	0,67	0,54	
03	OIV SO2-korr.	0,164	-0,1826	-7,94	-6,39	(*)
05	Österreich, SO2 korr.	0,410	0,0634	2,76	2,22	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,350	0,0034	0,15	0,12	
07	Halbmikro SO2 korr.	0,456	0,1094	4,76	3,83	
08	OIV o. SO2-korr.	0,460	0,1134	4,93	3,97	
09	OIV SO2-korr.	0,230	-0,1166	-5,07	-4,08	
11	OIV SO2-korr.	0,280	-0,0666	-2,90	-2,33	
12	Halbmikro SO2 korr.	0,370	0,0234	1,02	0,82	
14	Gerhardt SO2 korr.	0,366	0,0194	0,84	0,68	
21	Gerhardt SO2 unber.	0,546	0,1994	8,67	6,98	(**)
23	Halbmikro SO2 unber.	0,440	0,0934	4,06	3,27	
29	Halbmikro SO2 korr.	0,287	-0,0596	-2,59	-2,09	
32	Gerhardt SO2 korr.	0,310	-0,0366	-1,59	-1,28	
33	Gerhardt SO2 korr.	0,270	-0,0766	-3,33	-2,68	
39	Halbmikro SO2 unber.	0,528	0,1814	7,89	6,35	(**)
40	Gerhardt SO2 korr.	0,360	0,0134	0,58	0,47	
41	Gerhardt SO2 korr.	0,410	0,0634	2,76	2,22	
43	Gerhardt SO2 ausg.	0,400	0,0534	2,32	1,87	
44	Halbmikro SO2 unber.	0,400	0,0534	2,32	1,87	
47	Gerhardt SO2 korr.	0,400	0,0534	2,32	1,87	
52	Halbmikro SO2 korr.	0,295	-0,0516	-2,24	-1,81	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,400	0,0534	2,32	1,87	
58	Rentschler mod. korr.	0,307	-0,0396	-1,72	-1,39	
62	Wädenswil SO2 korr.	0,294	-0,0526	-2,29	-1,84	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,320	-0,0266	-1,16	-0,93	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,565	0,2184	9,50	7,64	(**)
68	Wädenswil SO2 unber.	0,470	0,1234	5,37	4,32	
69	Halbmikro SO2 unber.	0,410	0,0634	2,76	2,22	
70	Halbmikro SO2 unber.	0,430	0,0834	3,63	2,92	
71	Wädenswil SO2 korr.	0,343	-0,0034	-0,15	-0,12	
72	Gerhardt SO2 korr.	0,310	-0,0366	-1,59	-1,28	
79	Halbmikro SO2 korr.	0,310	-0,0366	-1,59	-1,28	
98	Halbmikro SO2 unber.	0,487	0,1404	6,11	4,91	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte nach SO<sub>2</sub>-Korrektur ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte nach SO<sub>2</sub>-Korrektur ab.

### 5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,465	0,1218	5,34	1,37	
202	FTIR	0,390	0,0468	2,05	0,53	
203	FTIR	0,490	0,1468	6,44	1,65	
204	FTIR	0,400	0,0568	2,49	0,64	
205	FTIR	0,300	-0,0432	-1,89	-0,48	
206	FTIR	0,400	0,0568	2,49	0,64	
208	FTIR	0,030	-0,3132	-13,73	-3,52	
209	FTIR	0,380	0,0368	1,61	0,41	
210	FTIR	0,265	-0,0782	-3,43	-0,88	
211	FTIR	0,560	0,2168	9,51	2,43	
215	FTIR	0,420	0,0768	3,37	0,86	
216	FTIR	0,380	0,0368	1,61	0,41	
217	FTIR	0,320	-0,0232	-1,02	-0,26	
218	FTIR	0,160	-0,1832	-8,03	-2,06	
219	FTIR	0,330	-0,0132	-0,58	-0,15	
220	FTIR	0,310	-0,0332	-1,46	-0,37	
221	FTIR	0,300	-0,0432	-1,89	-0,48	
222	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	0,300	-0,0432	-1,89	-0,48	
225	FTIR	0,450	0,1068	4,68	1,20	
226	FTIR	0,290	-0,0532	-2,33	-0,60	
227	FTIR	0,610	0,2668	11,70	2,99	
228	FTIR	0,340	-0,0032	-0,14	-0,04	
229	FTIR	0,530	0,1868	8,19	2,10	
230	FTIR	0,210	-0,1332	-5,84	-1,49	
231	FTIR	0,290	-0,0532	-2,33	-0,60	
232	FTIR	0,390	0,0468	2,05	0,53	
234	FTIR	0,390	0,0468	2,05	0,53	
236	FTIR	0,320	-0,0232	-1,02	-0,26	
238	FTIR	0,490	0,1468	6,44	1,65	
239	FTIR	0,510	0,1668	7,31	1,87	
242	FTIR	0,500	0,1568	6,88	1,76	
243	FTIR	0,350	0,0068	0,30	0,08	
244	FTIR	0,380	0,0368	1,61	0,41	
245	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
246	FTIR	0,360	0,0168	0,74	0,19	
247	FTIR	0,420	0,0768	3,37	0,86	
248	FTIR	0,470	0,1268	5,56	1,42	
249	FTIR	0,410	0,0668	2,93	0,75	
251	FTIR	0,470	0,1268	5,56	1,42	
252	FTIR	0,000	-0,3432	-15,05	-3,85	
253	FTIR	0,440	0,0968	4,24	1,09	
254	FTIR	0,350	0,0068	0,30	0,08	
256	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
257	FTIR	0,450	0,1068	4,68	1,20	
259	FTIR	0,500	0,1568	6,88	1,76	
260	FTIR	0,340	-0,0032	-0,14	-0,04	
261	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
262	FTIR	0,360	0,0168	0,74	0,19	
263	FTIR	0,320	-0,0232	-1,02	-0,26	
264	FTIR	0,260	-0,0832	-3,65	-0,93	
265	FTIR	0,450	0,1068	4,68	1,20	
266	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
267	FTIR	0,260	-0,0832	-3,65	-0,93	
268	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
269	FTIR	0,460	0,1168	5,12	1,31	
270	FTIR	0,420	0,0768	3,37	0,86	
271	FTIR	0,380	0,0368	1,61	0,41	
272	FTIR	0,510	0,1668	7,31	1,87	
273	FTIR	0,420	0,0768	3,37	0,86	
274	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
275	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
276	FTIR	0,430	0,0868	3,81	0,97	
277	FTIR	0,480	0,1368	6,00	1,54	
278	FTIR	0,440	0,0968	4,24	1,09	
279	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
280	FTIR	0,253	-0,0902	-3,96	-1,01	
281	FTIR	0,350	0,0068	0,30	0,08	
282	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
286	FTIR	0,360	0,0168	0,74	0,19	
320	FTIR	0,340	-0,0032	-0,14	-0,04	
321	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
339	FTIR	0,370	0,0268	1,18	0,30	
346	FTIR	0,640	0,2968	13,01	3,33	
351	FTIR	0,350	0,0068	0,30	0,08	
366	FTIR	0,410	0,0668	2,93	0,75	
371	FTIR	0,335	-0,0082	-0,36	-0,09	

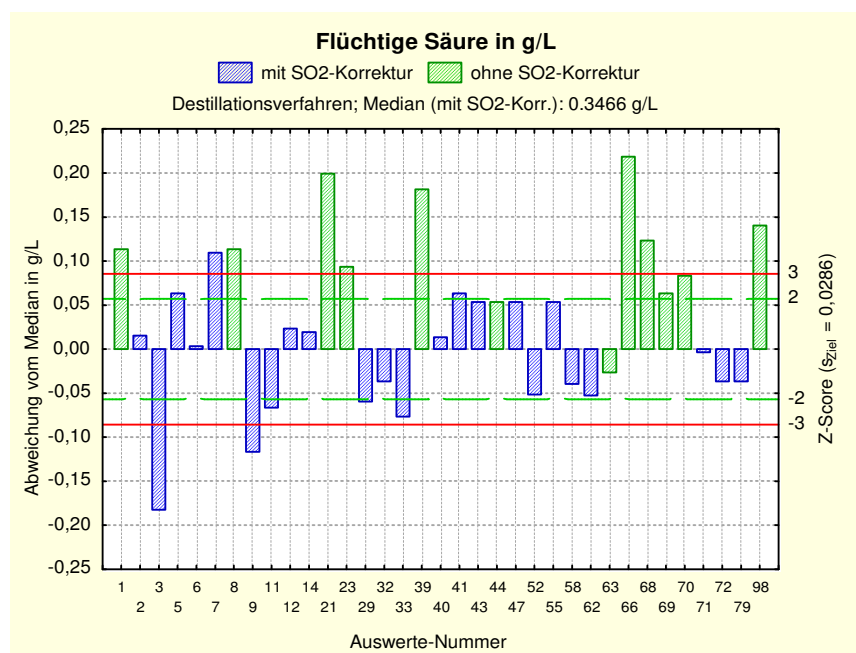


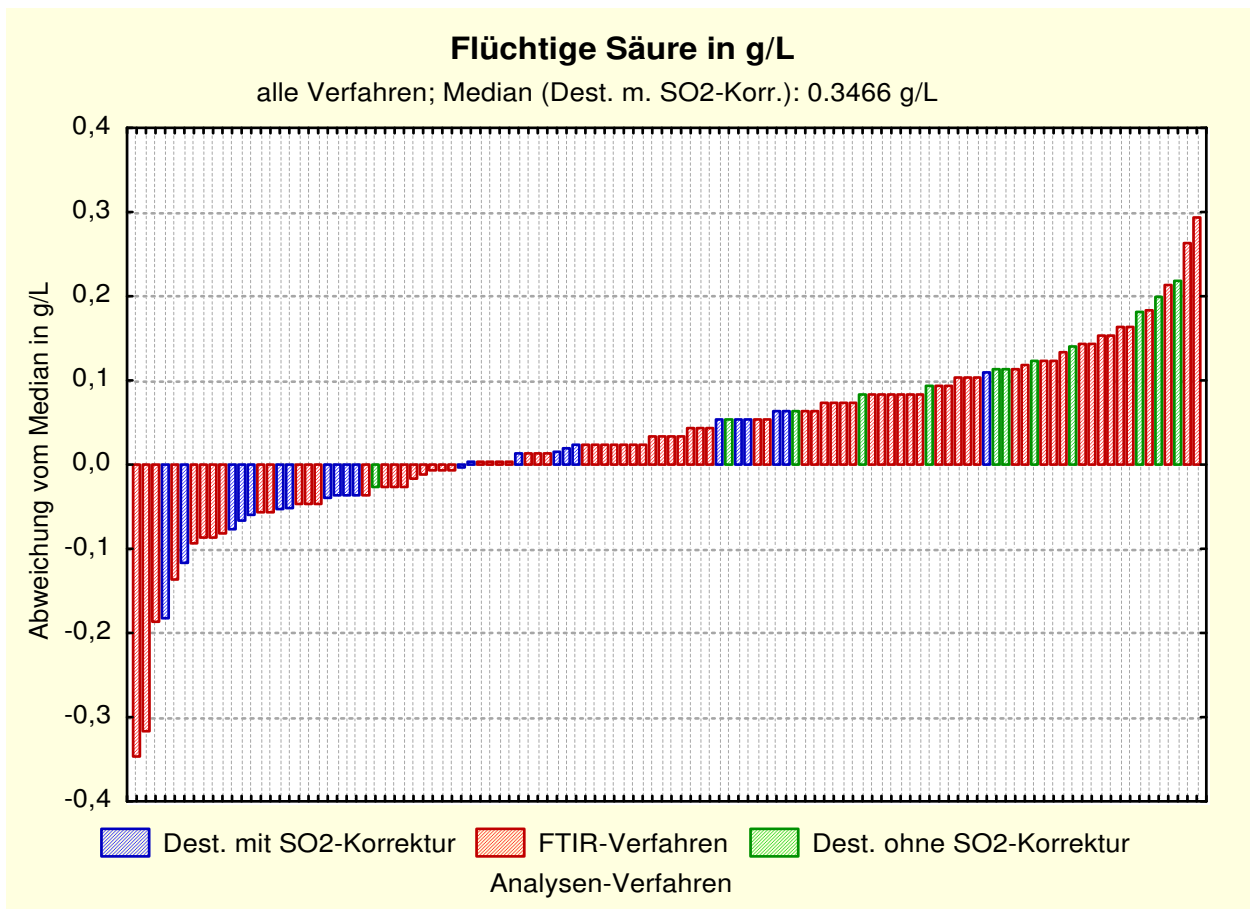
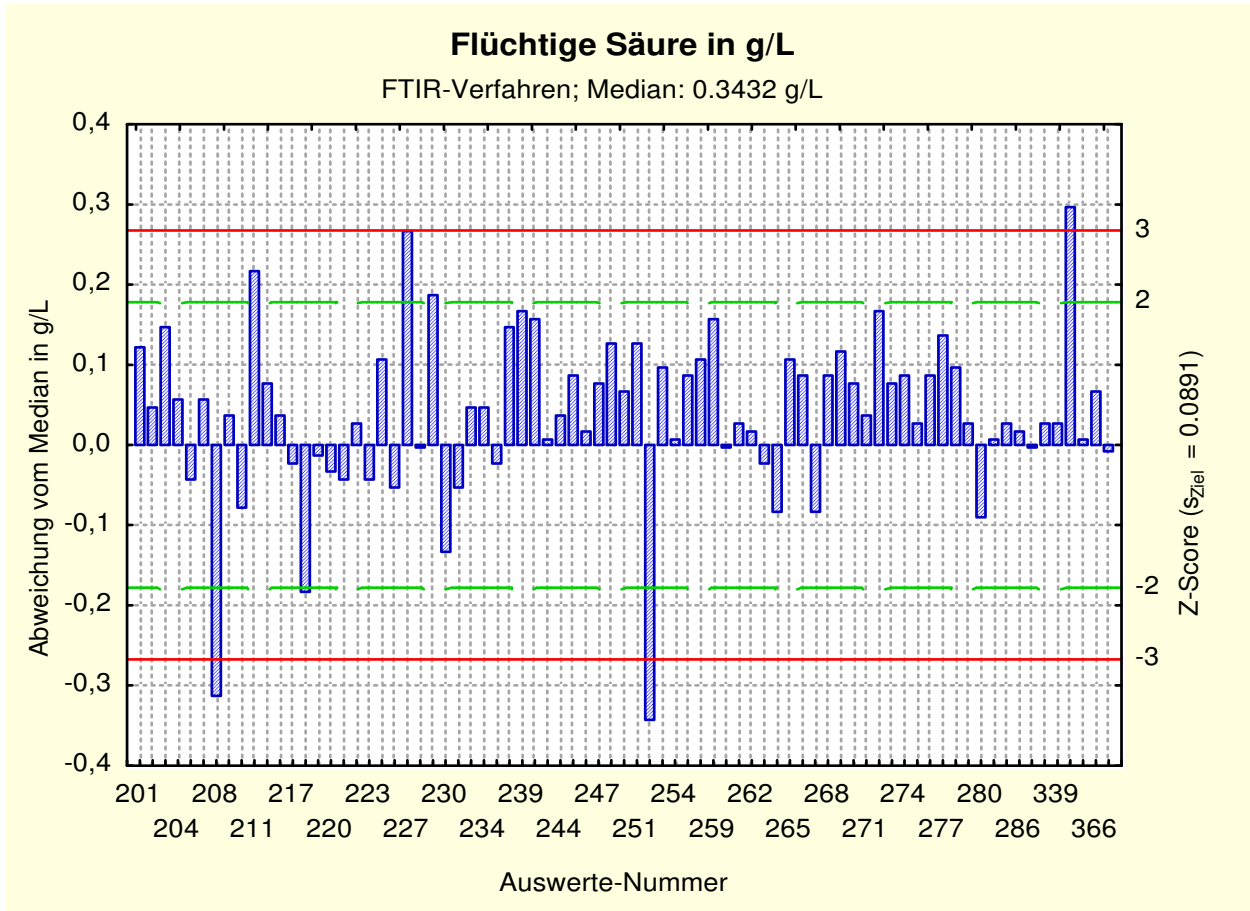
### 5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	0,230
Mittelwert	0,3418
Median	0,3466
Maximalwert	0,456
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,057
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,023
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,47
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,99
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,64
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,53
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,42
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,14

### 5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	9	0,4500	0,0796
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	5	0,3412	0,0780
Wädenswil SO2	Wädenswil-Verfahren,			
unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,4700	
korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	2	0,3186	0,0395
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO2 unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss unberücksichtigt	1	0,5460	
SO2 ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	1	0,4000	
SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	9	0,3531	0,0540
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02			
einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur		4	0,2590	0,0947
ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur		1	0,4600	
OIV o. SO2-korr.				
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO2-korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,3070	
Österreich, SO2 korr.	Erläuterung siehe Teil 1 Abschnitt 6.18.4	1	0,4100	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	23	0,3369	0,0643
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,3867	0,0833





## 5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,144	-0,106	-6,08	(**)
06	enzymat. autom.	0,268	0,018	1,03	
07	HPLC	0,231	-0,019	-1,09	
11	enzymat. autom.	0,270	0,020	1,15	
15	enzymat. autom.	0,300	0,050	2,87	
16	enzymat. autom.	0,250	0,000	0,00	
19	IC	0,400	0,150	8,61	(*)
22	HPLC	0,219	-0,031	-1,78	
24	NMR	0,210	-0,040	-2,30	
27	enzymat. autom.	0,260	0,010	0,57	
28	HPLC	0,220	-0,030	-1,72	
32	enzymat. autom.	0,380	0,130	7,46	(**)
40	enzymat. autom.	0,240	-0,010	-0,57	
41	HPLC	<0,3			
42	enzymat. autom.	0,270	0,020	1,15	
43	enzymat. autom.	0,270	0,020	1,15	
47	enzymat. autom.	0,240	-0,010	-0,57	
50	enzymat. autom.	0,270	0,020	1,15	
52	enzymat. Hand	0,241	-0,009	-0,52	
57	enzymat. autom.	0,260	0,010	0,57	
58	enzymat. autom.	0,259	0,009	0,52	
70	enzymat. autom.	0,290	0,040	2,30	
72	enzymat. autom.	0,240	-0,010	-0,57	
79	enzymat. Hand	0,205	-0,045	-2,58	
90	HPLC	0,213	-0,037	-2,12	
95	enzymat. autom.	0,250	0,000	0,00	
105	enzymat. autom.	0,360	0,110	6,31	(**)
213	FTIR	0,370	0,120	6,89	(**)
224	FTIR	0,270	0,020	1,15	
243	FTIR	0,350	0,100	5,74	(**)
258	FTIR	0,360	0,110	6,31	(**)
262	FTIR	0,470	0,220	12,63	(*)
283	FTIR	0,368	0,118	6,77	(**)
284	FTIR	0,492	0,242	13,92	(*)
285	FTIR	0,270	0,020	1,15	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.  
Herkömmliche Werte bleiben bei Berechnungen unberücksichtigt.

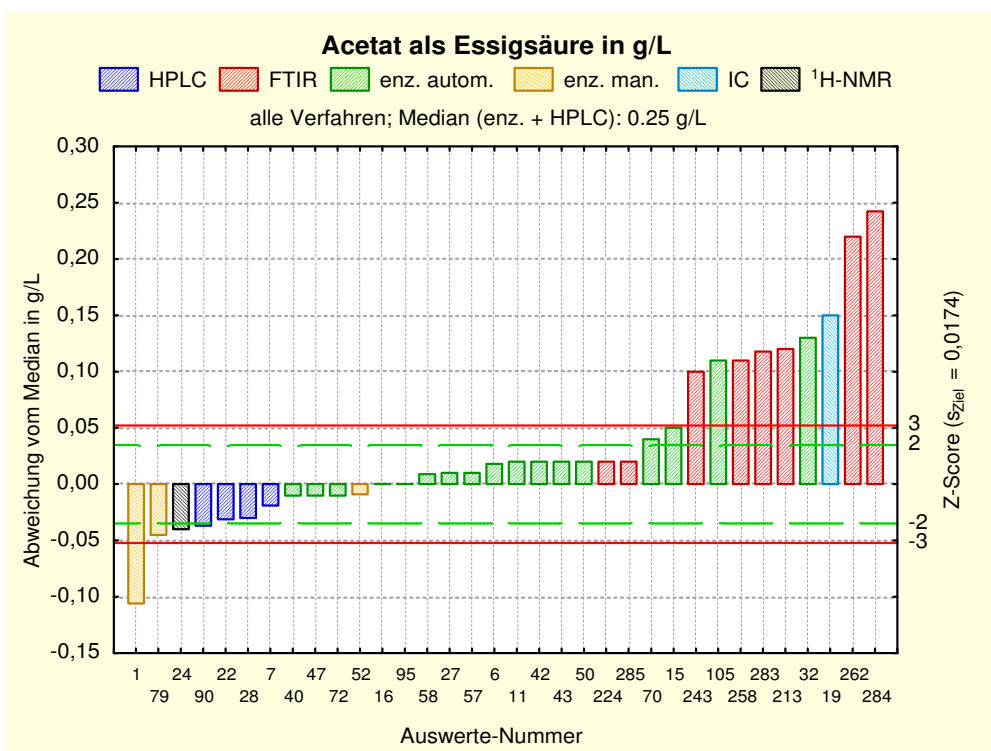
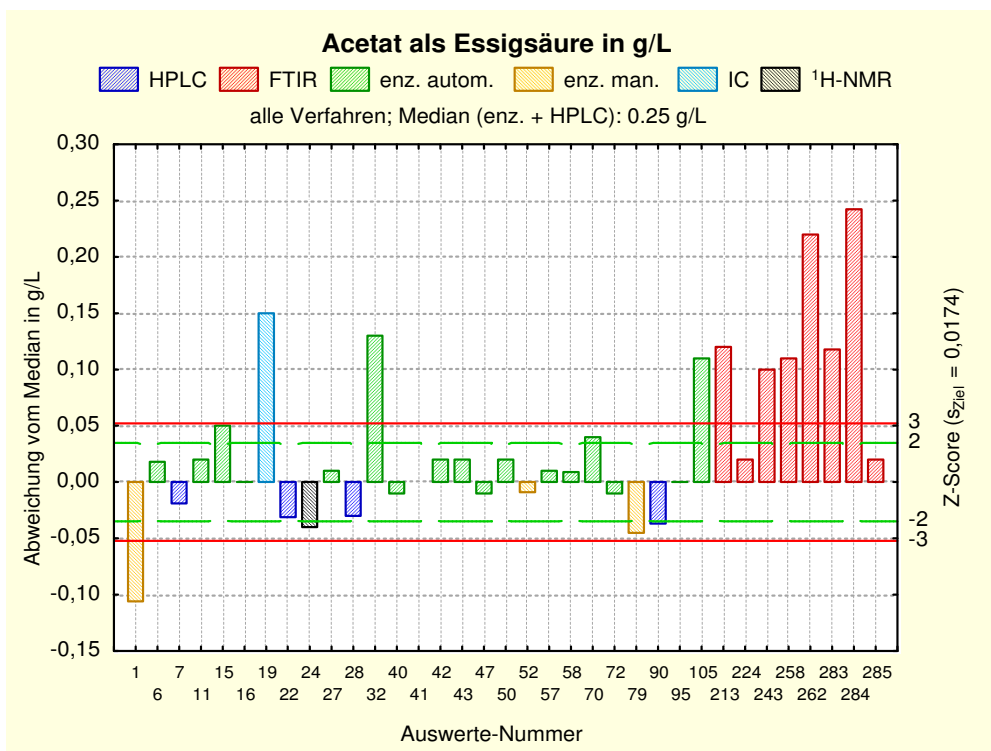
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.  
Herkömmliche Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	21
Minimalwert	0,144	0,205
Mittelwert	0,256	0,251
Median	0,255	0,250
Maximalwert	0,380	0,300
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,047	0,025
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,010	0,005
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,018	0,017
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,68	1,42
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,55	0,31
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	4	0,2204	0,0079
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	17	0,2673	0,0241
enzymat. Hand	Enzymatisch, manuell	3	0,1967	0,0556
	herkömmliche Verfahren	24	0,2534	0,0324
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	8	0,3678	0,0894
IC	Ionenchromatographie	1	0,4000	
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,2100	



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

### 5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,13	-0,064	-0,58	-0,87	
02	enzymat. Hand	2,11	-0,081	-0,74	-1,10	
06	HPLC	2,19	0,000	0,00	0,00	
07	HPLC	2,24	0,050	0,45	0,68	
08	HPLC	1,99	-0,200	-1,82	-2,72	
11	enzymat. autom.	2,25	0,063	0,57	0,86	
19	IC	2,72	0,530	4,81	7,21	(**)
22	HPLC	2,31	0,120	1,09	1,63	
23	HPLC	2,14	-0,050	-0,45	-0,68	
24	NMR	1,73	-0,460	-4,18	-6,26	(**)
28	HPLC	2,23	0,045	0,41	0,61	
41	HPLC	2,31	0,120	1,09	1,63	
52	HPLC	2,44	0,250	2,27	3,40	
72	enzymat. autom.	2,01	-0,180	-1,63	-2,45	
90	HPLC	2,11	-0,080	-0,73	-1,09	

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

### 5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,13	0,001	0,01	0,02	
02	enz.(L-) Hand	2,05	-0,074	-0,69	-1,02	
05	enz.(L-), autom.	1,96	-0,165	-1,53	-2,29	
06	enz.(L-), autom.	2,11	-0,011	-0,10	-0,15	
09	enz.(L-), autom.	2,18	0,055	0,52	0,77	
10	enz.(L-) Hand	2,09	-0,035	-0,32	-0,48	
11	enz.(L-), autom.	2,17	0,043	0,41	0,61	
12	enz.(L-), autom.	1,87	-0,253	-2,36	-3,52	
16	enz.(L-), autom.	1,90	-0,225	-2,09	-3,12	
22	enz.(L-), autom.	2,10	-0,025	-0,23	-0,34	
27	enz.(L-), autom.	2,38	0,255	2,38	3,56	
32	enz.(L-), autom.	2,40	0,275	2,57	3,83	
40	enz.(L-), autom.	2,40	0,275	2,57	3,83	
42	enz.(L-), autom.	2,12	-0,005	-0,04	-0,06	
47	enz.(L-), autom.	2,14	0,015	0,14	0,22	
50	enz.(L-), autom.	2,26	0,135	1,26	1,89	
57	enz.(L-), autom.	2,40	0,275	2,57	3,83	
58	enz.(L-), autom.	2,12	-0,002	-0,01	-0,02	
66	enz.(L-) Hand	2,14	0,015	0,14	0,22	
70	enz.(L-), autom.	2,21	0,085	0,80	1,19	
72	enz.(L-), autom.	1,95	-0,175	-1,63	-2,43	
79	enz.(L-) Hand	1,99	-0,135	-1,25	-1,87	
90	enz.(L-), autom.	2,13	0,005	0,05	0,08	
95	enz.(L-), autom.	2,07	-0,055	-0,51	-0,76	

### 5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,36	0,170	1,54	0,78	
202	FTIR	2,13	-0,060	-0,54	-0,28	
203	FTIR	2,04	-0,150	-1,36	-0,69	
204	FTIR	2,25	0,060	0,54	0,28	
205	FTIR	2,49	0,300	2,72	1,38	
206	FTIR	2,19	0,000	0,00	0,00	
208	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
209	FTIR	2,01	-0,180	-1,63	-0,83	
210	FTIR	1,97	-0,220	-2,00	-1,01	
211	FTIR	2,00	-0,190	-1,73	-0,87	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
213	FTIR	2,21	0,020	0,18	0,09	
215	FTIR	3,20	1,010	9,17	4,63	
216	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
217	FTIR	2,16	-0,030	-0,27	-0,14	
218	FTIR	3,97	1,780	16,17	8,17	(*)
219	FTIR	2,29	0,100	0,91	0,46	
220	FTIR	2,50	0,310	2,82	1,42	
221	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
222	FTIR	3,23	1,040	9,45	4,77	
223	FTIR	2,32	0,130	1,18	0,60	
224	FTIR	1,88	-0,310	-2,82	-1,42	
225	FTIR	2,40	0,210	1,91	0,96	
226	FTIR	1,73	-0,460	-4,18	-2,11	
227	FTIR	2,24	0,050	0,45	0,23	
228	FTIR	1,92	-0,270	-2,45	-1,24	
229	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
230	FTIR	2,57	0,380	3,45	1,74	
231	FTIR	2,79	0,600	5,45	2,75	
232	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
234	FTIR	2,43	0,240	2,18	1,10	
236	FTIR	2,38	0,190	1,73	0,87	
238	FTIR	2,43	0,240	2,18	1,10	
239	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
242	FTIR	2,36	0,170	1,54	0,78	
243	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
244	FTIR	2,70	0,510	4,63	2,34	
245	FTIR	2,15	-0,040	-0,36	-0,18	
246	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
247	FTIR	2,37	0,180	1,63	0,83	
248	FTIR	2,50	0,310	2,82	1,42	
249	FTIR	2,39	0,200	1,82	0,92	
251	FTIR	1,90	-0,290	-2,63	-1,33	
252	FTIR	2,01	-0,180	-1,63	-0,83	
254	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
256	FTIR	2,50	0,310	2,82	1,42	
257	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
258	FTIR	2,33	0,140	1,27	0,64	
259	FTIR	2,34	0,150	1,36	0,69	
260	FTIR	2,16	-0,030	-0,27	-0,14	
261	FTIR	1,98	-0,210	-1,91	-0,96	
262	FTIR	1,75	-0,440	-4,00	-2,02	
263	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
264	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
266	FTIR	1,50	-0,690	-6,27	-3,17	
267	FTIR	2,08	-0,110	-1,00	-0,50	
268	FTIR	1,95	-0,240	-2,18	-1,10	
269	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
270	FTIR	2,50	0,310	2,82	1,42	
271	FTIR	2,25	0,060	0,54	0,28	
272	FTIR	1,87	-0,320	-2,91	-1,47	
273	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
274	FTIR	2,01	-0,180	-1,63	-0,83	
275	FTIR	2,80	0,610	5,54	2,80	
276	FTIR	2,21	0,020	0,18	0,09	
277	FTIR	2,70	0,510	4,63	2,34	
278	FTIR	3,77	1,580	14,35	7,25	(*)
279	FTIR	1,90	-0,290	-2,63	-1,33	
280	FTIR	2,57	0,380	3,45	1,74	
281	FTIR	2,53	0,340	3,09	1,56	
282	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
283	FTIR	1,97	-0,220	-2,00	-1,01	
284	FTIR	1,10	-1,090	-9,90	-5,00	(**)
286	FTIR	2,00	-0,190	-1,73	-0,87	
320	FTIR	2,60	0,410	3,72	1,88	

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

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
321	FTIR	2,24	0,050	0,45	0,23	
339	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
346	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
351	FTIR	2,00	-0,190	-1,73	-0,87	
366	FTIR	1,10	-1,090	-9,90	-5,00	(**)

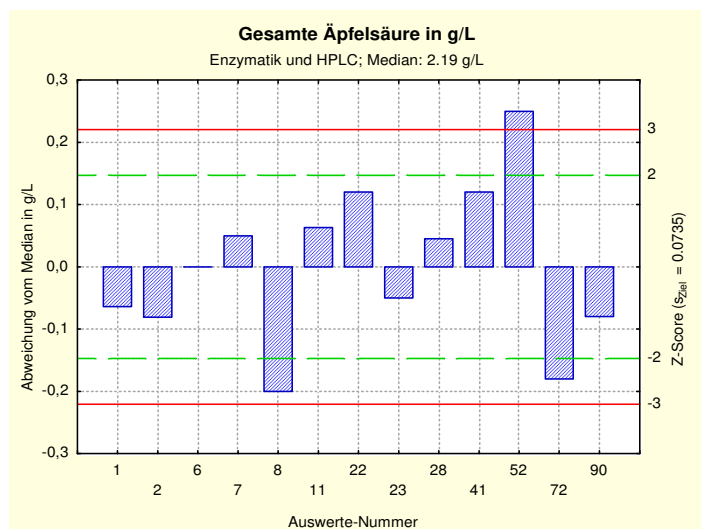
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der enzymatischen und HPLC- Werte ab.

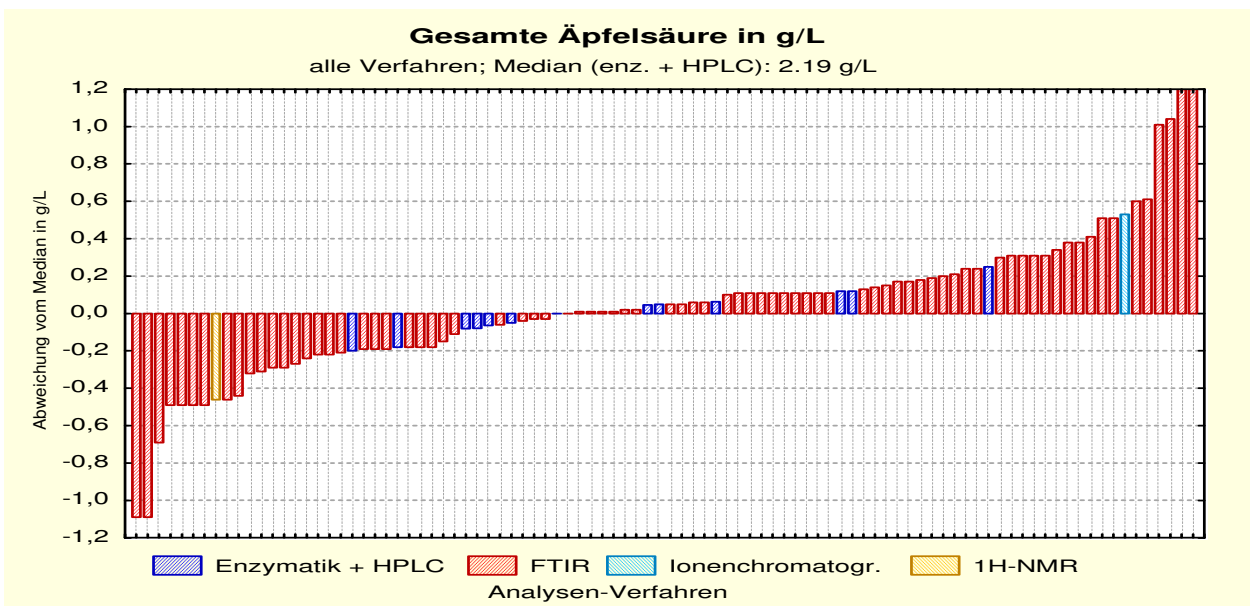
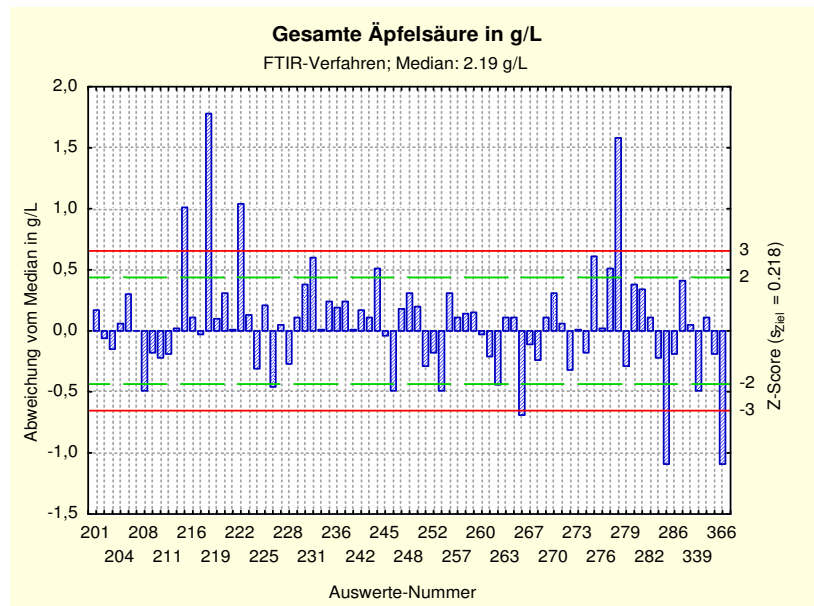
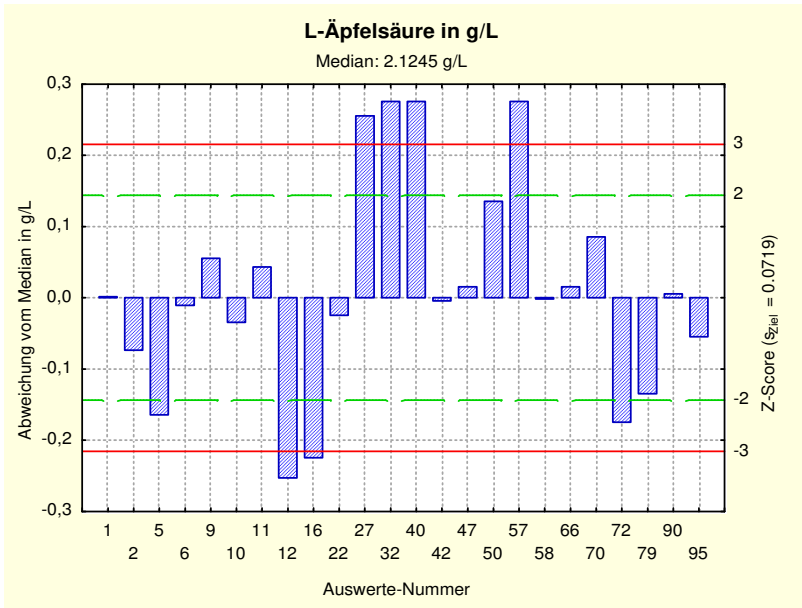
**5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	13	24
Minimalwert	1,99	1,87
Mittelwert	2,189	2,136
Median	2,190	2,125
Maximalwert	2,44	2,40
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,126	0,150
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,035	0,031
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,110	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,074	0,072
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,15	1,40
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,72	2,09
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,58	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,32	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,48	0,43
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,16	

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	2,219	0,145
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	2	2,132	0,195
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch manuell	2	2,117	0,014
IC	Ionenchromatographie	1	2,720	
	herkömmliche Verfahren ohne IC: Gesamte Äpfelsäure	13	2,186	0,133
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	2,223	0,322
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	1,730	
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	2,149	0,180
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	2,082	0,063
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	24	2,135	0,160







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

### 5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,140	-0,060	-4,16	
02	enzymat. Hand	0,215	0,015	1,04	
05	enzymat. autom.	0,180	-0,020	-1,39	
06	enzymat. autom.	0,221	0,021	1,46	
07	HPLC	0,198	-0,002	-0,14	
09	enzymat. autom.	0,200	0,000	0,00	
10	enzymat. Hand	0,210	0,010	0,69	
11	enzymat. autom.	0,231	0,031	2,15	
12	enzymat. autom.	0,172	-0,028	-1,91	
19	IC	0,210	0,010	0,69	
22	enzymat. autom.	0,314	0,114	7,91	(*)
23	HPLC	0,360	0,160	11,10	(*)
24	NMR	0,200	0,000	0,00	
28	HPLC	0,200	0,000	0,00	
41	HPLC	<0,2			
52	HPLC	0,040	-0,160	-11,10	(*)
66	enzymat. Hand	0,230	0,030	2,08	
72	enzymat. autom.	3,160	2,960	205,34	(*)
90	HPLC	0,170	-0,030	-2,08	
95	enzymat. autom.	0,190	-0,010	-0,69	

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

### 5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	n.b. (< 0,16)				
02	enz.(L-) Hand	0,087	-0,001	-0,14	-0,05	
05	enz.(L-) autom.	0,080	-0,008	-1,11	-0,37	
06	enz.(L-) autom.	0,088	0,000	0,00	0,00	
09	enz.(L-) autom.	0,080	-0,008	-1,11	-0,37	
10	enz.(L-) Hand	0,090	0,002	0,28	0,09	
11	enz.(L-) autom.	0,091	0,003	0,42	0,14	
12	enz.(L-) autom.	0,071	-0,017	-2,37	-0,79	
16	enz.(L-) autom.	<= 0				
22	enz.(L-) autom.	0,132	0,044	6,13	2,04	
27	enz.(L-) autom.	nn				
32	enz.(L-) autom.	0,100	0,012	1,67	0,56	
40	enz.(L-) autom.	0,110	0,022	3,07	1,02	
47	enz.(L-) autom.	0,086	-0,002	-0,28	-0,09	
50	enz.(L-) autom.	0,100	0,012	1,67	0,56	
58	enz.(L-) autom.	0,095	0,007	0,98	0,33	
66	enz.(L-) Hand	0,101	0,013	1,81	0,60	
70	enz.(L-) autom.	0,070	-0,018	-2,51	-0,84	
72	enz.(L-) autom.	3,040	2,952	411,33	137,14	(*)
79	enz.(L-) Hand	0,088	0,000	0,00	0,00	
90	enz.(L-) autom.	0,065	-0,023	-3,20	-1,07	
95	enz.(L-) autom.	0,080	-0,008	-1,11	-0,37	

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

#### Allgemeine Anmerkungen zu allen Laborergebnissen für diesen Parameter

Werte unter der Bestimmungsgrenze können nicht durch Z-Score bewertet werden.

<= 0: nicht normgerechte Angabe "0" vom Auswerter ersetzt.

Korrekte Form bei Werten unter der Bestimmungs- oder Nachweisgrenze: < BG (< Wert der Grenze) oder < NG (< Wert der Grenze)

## 5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	<= 0				
202	FTIR	<= 0				
203	FTIR	-0,210	-0,410			(*)
204	FTIR	-0,110	-0,310			(*)
205	FTIR	0,050	-0,150			(*)
206	FTIR	0,350	0,150			(*)
208	FTIR	<0,3				
209	FTIR	<0,2				
210	FTIR	<= 0				
211	FTIR	0,200	0,000			
213	FTIR	0,140	-0,060			
215	FTIR	<= 0				
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	<= 0				
219	FTIR	n.n.				
220	FTIR	<= 0				
221	FTIR	-0,210	-0,410			(*)
222	FTIR	0,720	0,520			(*)
223	FTIR	0,100	-0,100			(*)
224	FTIR	0,200	0,000			
225	FTIR	<= 0				
226	FTIR	<= 0				
227	FTIR	0,270	0,070			
228	FTIR	0,130	-0,070			
229	FTIR	-0,350	-0,550			(*)
230	FTIR	0,270	0,070			
231	FTIR	-0,210	-0,410			(*)
232	FTIR	-0,300	-0,500			(*)
234	FTIR	-0,320	-0,520			(*)
236	FTIR	<= 0				
238	FTIR	<= 0				
239	FTIR	<= 0				
242	FTIR	-0,200	-0,400			(*)
243	FTIR	<= 0				
244	FTIR	0,470	0,270			(*)
245	FTIR	0,220	0,020			
246	FTIR	<= 0				
247	FTIR	0,190	-0,010			
248	FTIR	<= 0				
249	FTIR	0,220	0,020			
251	FTIR	<= 0				
252	FTIR	-0,510	-0,710			(*)
254	FTIR	<= 0				
256	FTIR	-0,200	-0,400			(*)
257	FTIR	<= 0				
258	FTIR	-0,140	-0,340			(*)
259	FTIR	-0,170	-0,370			(*)
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,080	-0,120			(*)
262	FTIR	-0,370	-0,570			(*)
263	FTIR	<= 0				
264	FTIR	<= 0				
266	FTIR	-0,300	-0,500			(*)
267	FTIR	0,060	-0,140			(*)
268	FTIR	0,270	0,070			
269	FTIR	-0,200	-0,400			(*)
270	FTIR	<= 0				
271	FTIR	<= 0				
272	FTIR	0,580	0,380			(*)
273	FTIR	<= 0				
274	FTIR	-0,010	-0,210			(*)
275	FTIR	<= 0				

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

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	-0,140	-0,340			(*)
277	FTIR	0,200	0,000			
278	FTIR	-0,320	-0,520			(*)
279	FTIR	0,200	0,000			
281	FTIR	-0,110	-0,310			(*)
282	FTIR	<= 0				
283	FTIR	<= 0				
284	FTIR	0,290	0,090			(**)
285	FTIR	<= 0				
286	FTIR	<= 0				
320	FTIR	<= 0				
321	FTIR	0,170	-0,030			
339	FTIR	0,100	-0,100			(*)
346	FTIR	<= 0				
351	FTIR	0,300	0,100			(**)
366	FTIR	<= 0				

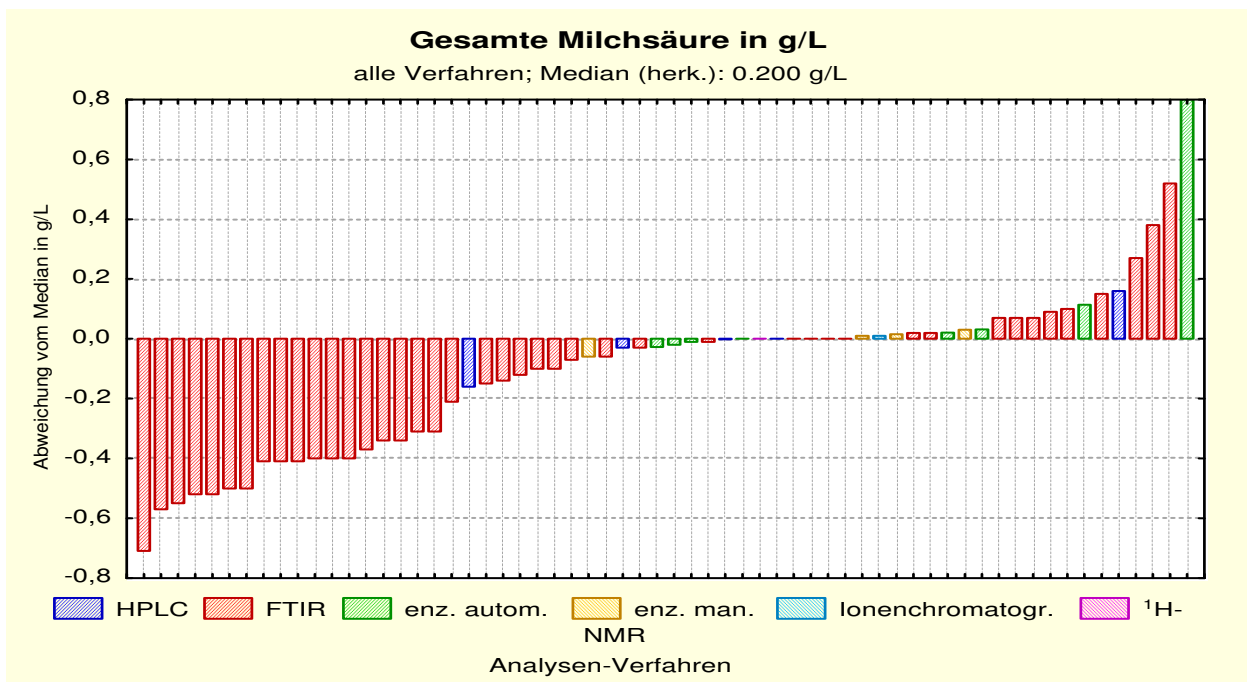
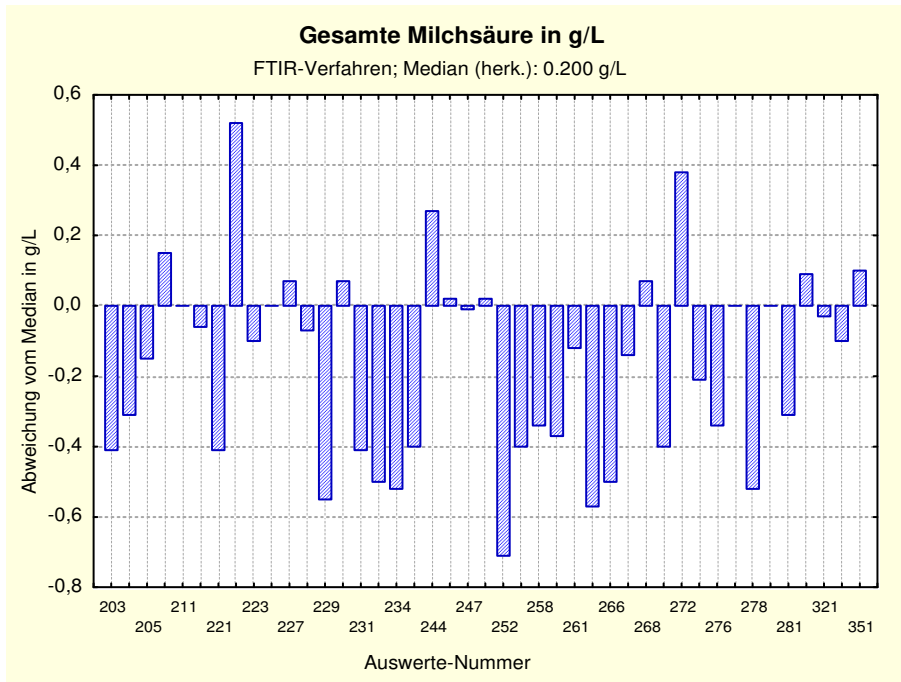
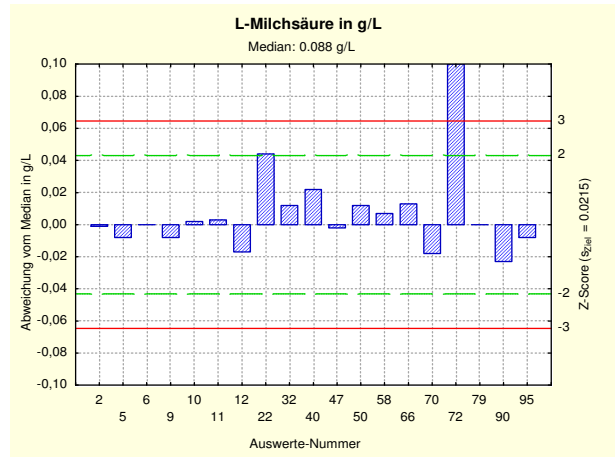
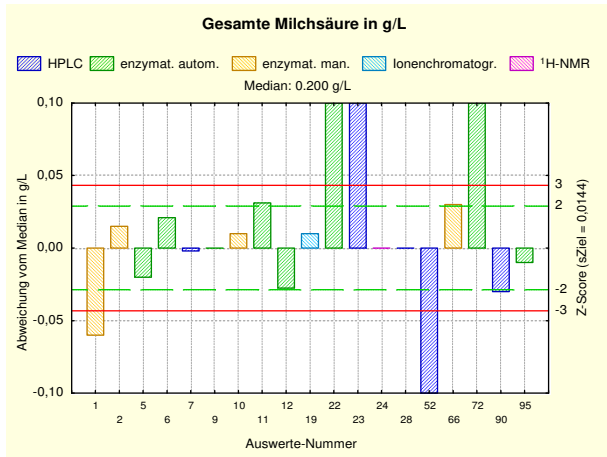
(\*) Diese Wertweichen um mehr als 50 % vom Median der Werte herkömmlicher Methoden ab.

**5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure alle Daten	L- Milchsäure alle Daten
Gültige Werte	14	18
Minimalwert	0,14	0,07
Mittelwert	0,198	0,090
Median	0,200	0,088
Maximalwert	0,23	0,13
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,025	0,016
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,007	0,004
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,014	0,007
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )		0,022
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U} FTIR}$ )	0,209	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,76	2,20
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )		0,73
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U} FTIR}$ )	0,12	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,47	0,52
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		0,17
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U} FTIR}$ )	0,03	

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	5	0,1894	0,1150
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	8	0,2298	0,0684
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	0,2003	0,0421
IC	Ionenchromatographie	1	0,2100	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	18	0,208	0,0481
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	43	0,0255	0,2844
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,2000	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	15	0,0903	0,0192
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	4	0,0913	0,0068
	alle Verfahren L-Milchsäure	19	0,0900	0,0158



## 5.15 Reduktone [mg/L]

### 5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
06	Acetaldehyd/potent.	2,0	-4,00	-5,46	(*)
14	Glyoxal/potentiometr.	6,8	0,80	1,09	
15	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-1,00	-1,36	
16	Glyoxal/Stärke	9,0	3,00	4,09	
17	Propionaldehyd/Stärke	<=0			
18	Glyoxal/Stärke	<=0			
19	Glyoxal/potentiometr.	3,5	-2,50	-3,41	
21	Glyoxal/Stärke	4,0	-2,00	-2,73	
22	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-3,00	-4,09	
24	Glyoxal/Stärke	10,0	4,00	5,46	(*)
25	Glyoxal/Stärke	4,0	-2,00	-2,73	
27	Glyoxal/potentiometr.	6,6	0,56	0,76	
28	Propionaldehyd/Stärke	8,0	2,00	2,73	
32	Glyoxal/Stärke	7,0	1,00	1,36	
33	Glyoxal/potentiometr.	<=0			
39	Glyoxal/potentiometr.	7,5	1,50	2,05	
41	Glyoxal/potentiometr.	<3			
42	Glyoxal/Stärke	3,0	-3,00	-4,09	
43	Glyoxal/Stärke	5,5	-0,50	-0,68	
44	Glyoxal/Stärke	6,0	0,00	0,00	
46	Glyoxal/potentiometr.	6,3	0,28	0,38	
52	Glyoxal/potentiometr.	2,0	-4,00	-5,46	(*)
58	Glyoxal/MTT	0,3	-5,75	-7,84	(*)
62	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-1,00	-1,36	
63	Glyoxal/Stärke	8,0	2,00	2,73	
66	Glyoxal/Stärke	<=0			
67	Glyoxal/Stärke	6,0	0,00	0,00	
68	Glyoxal/potentiometr.	6,0	0,00	0,00	
69	Glyoxal/Stärke	8,0	2,00	2,73	
71	Glyoxal/potentiometr.	6,0	0,00	0,00	
72	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-1,00	-1,36	
75	k. A.	10,0	4,00	5,46	(*)
77	Glyoxal/potentiometr.	10,0	4,00	5,46	(*)
78	Glyoxal/potentiometr.	4,0	-2,00	-2,73	
79	Acetaldehyd/Stärke	5,0	-1,00	-1,36	
81	Glyoxal/Stärke	5,0	-1,00	-1,36	
83	Glyoxal/Stärke	6,0	0,00	0,00	
86	Propionaldehyd/Stärke	6,0	0,00	0,00	
96	Glyoxal/Stärke	6,0	0,00	0,00	
109	Glyoxal/potentiometr.	6,0	0,00	0,00	

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

<= 0: nicht normgerechte Angabe, korrekte Form z.B.: < NG (Wert der Nachweisgrenze)

#### Anmerkung:

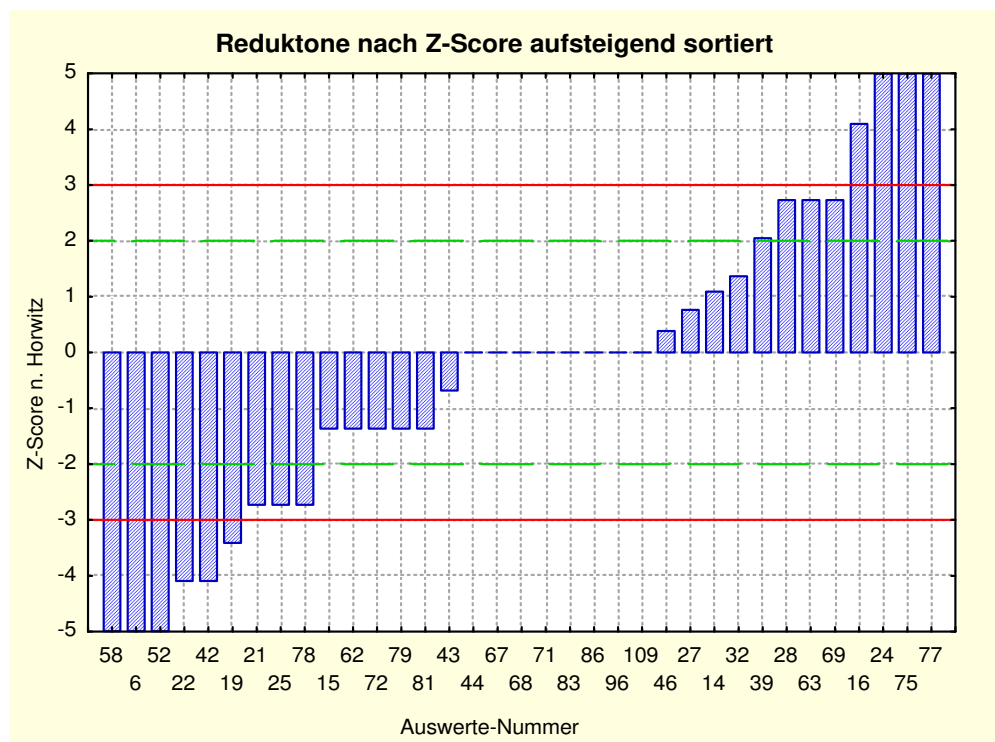
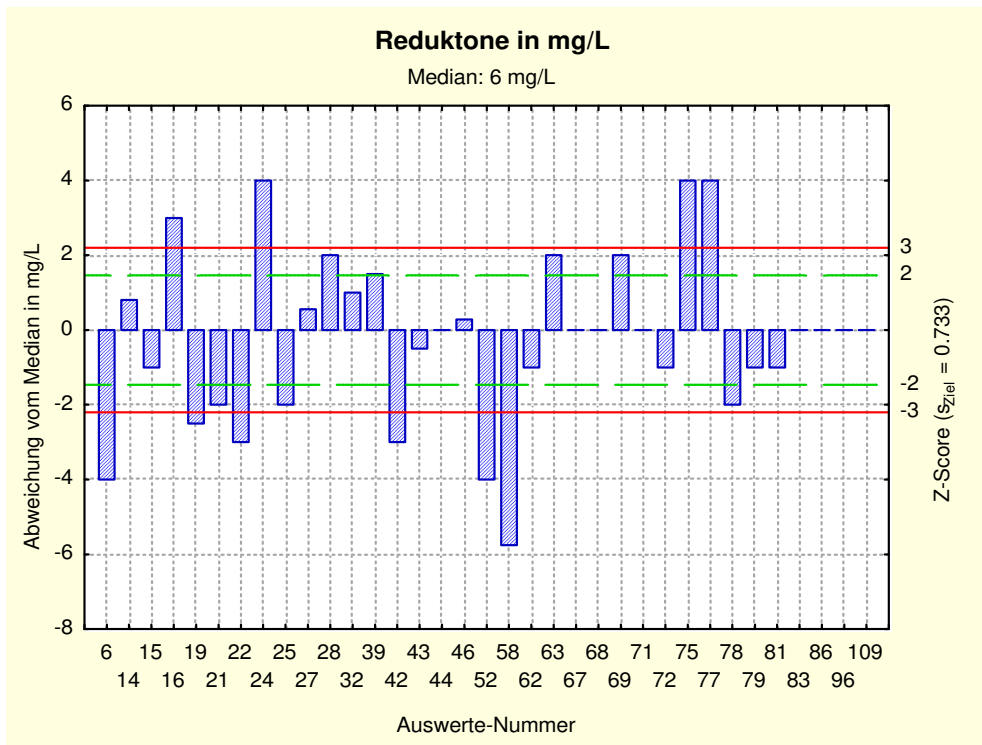
Die Bestimmung der Reduktone war freigestellt. Da der Quotient  $s_L/s_H$  über 2,0 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Beschreibung der Laborleistung dar. Sie sind daher in grauer Schriftfarbe dargestellt.

### 5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	29
Minimalwert	3,0
Mittelwert	5,76
Median	6,00
Maximalwert	9,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	1,525
Standardfehler des Mittelwertes	0,283
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,733
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,08
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,39
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	

**5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	5,00	
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	2,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	2	7,00	1,60
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	14	6,21	2,17
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	15	5,47	1,74
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	0,25	
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	10,00	
alle Verfahren		35	5,78	2,18



## 5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	40,0	4,00	1,19	
06	LwK 6.2	31,6	-4,40	-1,31	
07	LwK 6.2	32,0	-4,00	-1,19	
11	LwK 6.2	31,0	-5,00	-1,49	
12	LwK 6.2	37,0	0,96	0,29	
29	LwK 6.2	31,7	-4,30	-1,28	
50	LwK 6.3	31,0	-5,00	-1,49	
55	LwK 6.3	33,0	-3,00	-0,89	
57	LwK 6.4	24,0	-12,00	-3,57	
58	LwK 6.4	32,2	-3,80	-1,13	
70	LwK 6.4	33,0	-3,00	-0,89	
91	LwK 6.2 m	40,3	4,32	1,29	
95	LwK 6.2	34,4	-1,60	-0,48	
104	LwK 6.3	38,0	2,00	0,60	
106	LwK 6.2	31,7	-4,30	-1,28	
107	LwK 6.3	25,4	-10,60	-3,16	
206	LwK 6.5	30,0	-6,00	-1,79	
207	LwK 6.5	38,0	2,00	0,60	
210	LwK 6.5	41,7	5,70	1,70	
219	LwK 6.5	38,0	2,00	0,60	
226	LwK 6.5	36,0	0,00	0,00	
239	LwK 6.5	37,0	1,00	0,30	
253	LwK 6.5	39,0	3,00	0,89	
254	LwK 6.5	37,0	1,00	0,30	
260	LwK 6.5	49,3	13,30	3,96	
264	LwK 6.5	33,0	-3,00	-0,89	
265	LwK 6.5	34,0	-2,00	-0,60	
270	LwK 6.5	37,0	1,00	0,30	
273	LwK 6.5	40,0	4,00	1,19	
320	LwK 6.5	38,0	2,00	0,60	
339	LwK 6.5	35,0	-1,00	-0,30	
351	LwK 6.5	44,0	8,00	2,38	
366	LwK 6.5	46,0	10,00	2,98	

### 5.16.2 Laborergebnisse, jodometrische Verfahren 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.)	38,0	6,00	1,97	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	35,9	3,90	1,28	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	6,00	1,97	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	-1,00	-0,33	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	4,00	1,32	
19	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	2,00	0,66	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	5,00	1,65	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	46,0	14,00	4,61	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
27	LwK 6.1(incl.Red.)	31,8	-0,23	-0,08	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	7,00	2,30	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	-6,00	-1,97	
32	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	-1,00	-0,33	
33	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	1,00	0,33	
39	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	1,00	0,33	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	33,9	1,90	0,63	

**Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
43	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	6,00	1,97	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
46	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,4	-2,62	-0,86	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	
62	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	5,00	1,65	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	7,00	2,30	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	8,00	2,63	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	6,00	1,97	
69	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	3,00	0,99	
71	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	10,00	3,29	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
73	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	3,00	0,99	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	3,00	0,99	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	6,00	1,97	
79	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	-1,00	-0,33	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	8,00	2,63	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	-1,00	-0,33	
86	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
98	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	-3,00	-0,99	
109	Redox incl.	32,0	0,00	0,00	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter ergänzt.

**5.16.3 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
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,10	3,10	1,22	1,02	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,00	7,00	2,75	2,30	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,00	-4,00	-1,57	-1,32	
19	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,50	-0,50	-0,20	-0,16	
21	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,00	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,00	5,00	1,96	1,65	
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,00	10,00	3,93	3,29	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,21	-0,79	-0,31	-0,26	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,00	5,00	1,96	1,65	
32	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,00	-2,00	-0,79	-0,66	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,50	-0,50	-0,20	-0,16	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,90	6,90	2,71	2,27	
42	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,50	6,50	2,55	2,14	
44	LwK 6.1 (excl.Red.)	23,00	-3,00	-1,18	-0,99	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	23,10	-2,90	-1,14	-0,95	
52	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,00	0,00	0,00	0,00	
62	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
63	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,00	3,00	1,18	0,99	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,00	8,00	3,14	2,63	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,00	6,00	2,36	1,97	
69	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,00	1,00	0,39	0,33	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,00	10,00	3,93	3,29	
72	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,00	-2,00	-0,79	-0,66	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
77	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
78	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,00	8,00	3,14	2,63	
79	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,00	0,00	0,00	0,00	
81	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
83	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,00	-1,00	-0,39	-0,33	
86	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,00	-4,00	-1,57	-1,32	
109	Redox excl.	26,00	0,00	0,00	0,00	

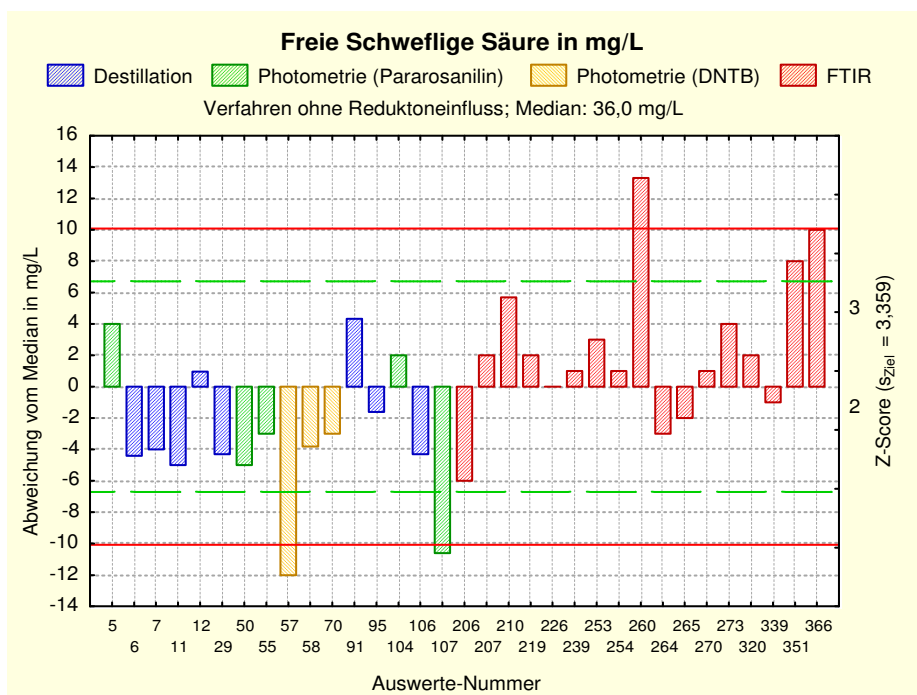


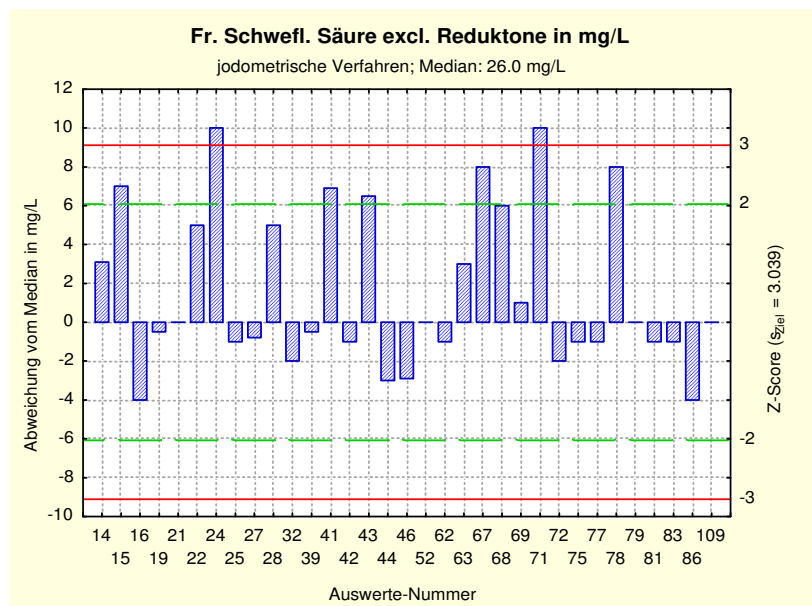
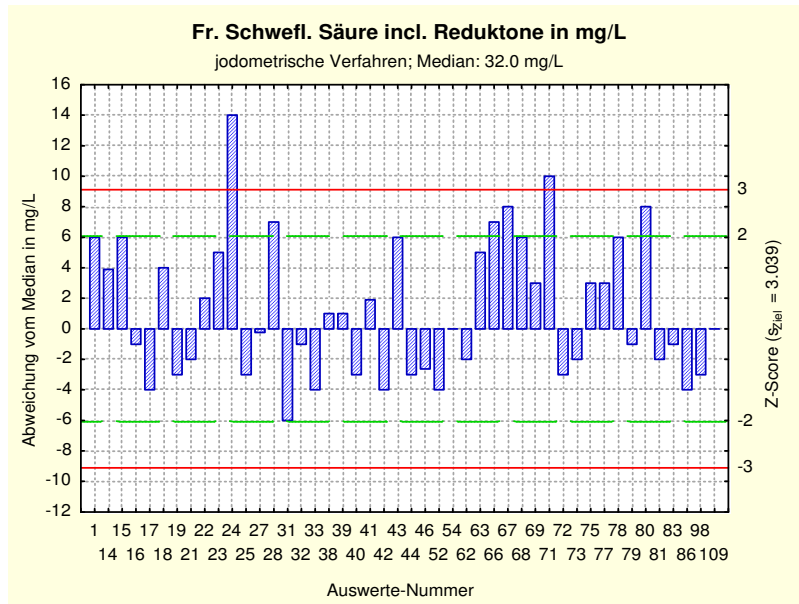
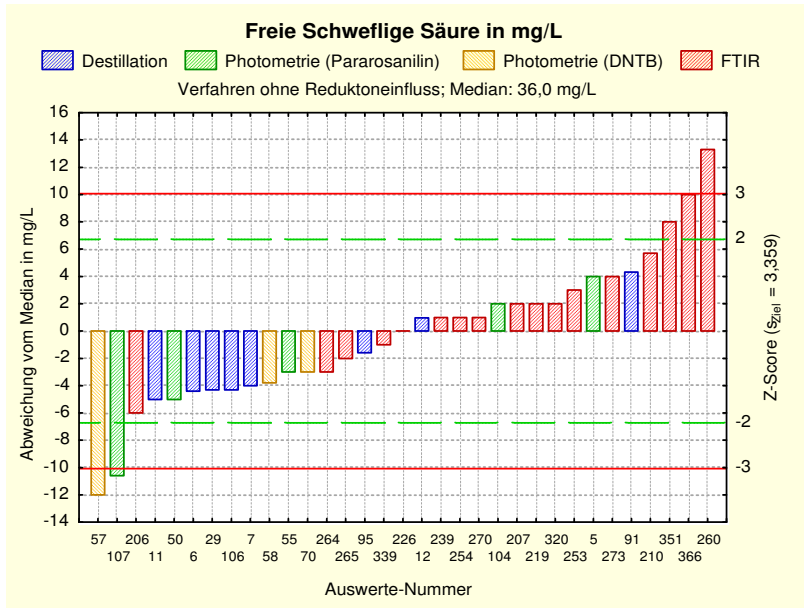
**5.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

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	16	33	46	33
Minimalwert	24,0	24,0	26,0	22,0
Mittelwert	32,89	35,74	33,26	27,60
Median	32,10	36,00	32,00	26,00
Maximalwert	40,3	49,3	46,0	36,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	4,463	5,345	4,580	4,159
Standardfehler des Mittelwertes	1,116	0,931	0,675	0,724
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	3,047	3,359	3,039	2,548
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>H</sub> incl. Red.)				3,039
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,46	1,59	1,51	1,63
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> incl. Red.)				1,37
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,37	0,28	0,22	0,28
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)				0,24

**5.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1(incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	45	33,10	4,802
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	32,00	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	46	33,07	4,737
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B mit Abzug der Reduktone	32	27,41	4,357
Redox excl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	26,00	
	jodometrische Verfahren mit Abzug der Reduktone	33	27,36	4,286
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	32,52	1,820
LwK 6.2 m	modifiziert: 10 ml Probe, 5ml 15%ige Phosphorsäure,	1	40,32	
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	5	33,48	6,578
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	30,26	4,620
	Destillations- und photometrische Verfahren	16	39,99	4,359
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	17	38,17	4,283
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	33	35,63	4,776





## 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	126,0	-11,00	-1,05	-2,05	
02	LwK 7.1	131,6	-5,40	-0,52	-1,01	
04	LwK 7.3	173,0	36,00	3,44	6,72	(**)
05	LwK 7.7	153,0	16,00	1,53	2,99	
06	LwK 7.3	130,0	-7,00	-0,67	-1,31	
07	LwK 7.3	141,0	4,00	0,38	0,75	
09	LwK 7.3	134,5	-2,50	-0,24	-0,47	
11	LwK 7.3	146,0	9,00	0,86	1,68	
12	LwK 7.3	142,7	5,72	0,55	1,07	
14	LwK 7.4.2	137,0	0,00	0,00	0,00	
15	LwK 7.4.2	147,0	10,00	0,96	1,87	
16	LwK 7.4.1	130,0	-7,00	-0,67	-1,31	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	-17,00	-1,63	-3,17	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	14,00	1,34	2,61	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	130,4	-6,60	-0,63	-1,23	
21	LwK 7.4.2	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	-1,00	-0,10	-0,19	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	13,00	1,24	2,43	
24	LwK 7.4.2m	150,0	13,00	1,24	2,43	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	131,0	-6,00	-0,57	-1,12	
27	LwK 7.4.2	133,0	-4,00	-0,38	-0,75	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	1,00	0,10	0,19	
29	LwK 7.3	148,7	11,70	1,12	2,18	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-9,00	-0,86	-1,68	
32	LwK 7.4.1	128,0	-9,00	-0,86	-1,68	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	-2,00	-0,19	-0,37	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	11,00	1,05	2,05	
39	LwK 7.4.1	129,5	-7,50	-0,72	-1,40	
40	LwK 7.7	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
41	LwK 7.4.2	137,0	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 7.4.1	129,0	-8,00	-0,77	-1,49	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,0	-14,00	-1,34	-2,61	
44	LwK 7.4.2	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,8	0,76	0,07	0,14	
47	LwK 7.4.2	137,0	0,00	0,00	0,00	
50	LwK 7.7	131,0	-6,00	-0,57	-1,12	
52	LwK 7.4.2	128,0	-9,00	-0,86	-1,68	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	132,0	-5,00	-0,48	-0,93	
55	LwK 7.4.1	140,0	3,00	0,29	0,56	
57	LwK 7.7	116,0	-21,00	-2,01	-3,92	
58	LwK 7.7	140,7	3,70	0,35	0,69	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	142,0	5,00	0,48	0,93	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,0	-5,00	-0,48	-0,93	
66	LwK 7.4.2	139,0	2,00	0,19	0,37	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	137,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	-10,00	-0,96	-1,87	
69	LwK 7.4.2	139,0	2,00	0,19	0,37	
70	LwK 7.4.2	149,0	12,00	1,15	2,24	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	13,00	1,24	2,43	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	9,00	0,86	1,68	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	-4,00	-0,38	-0,75	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,4	0,40	0,04	0,07	
79	LwK 7.4.1	132,0	-5,00	-0,48	-0,93	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	6,00	0,57	1,12	
81	LwK 7.5.3(incl. Red.)	126,0	-11,00	-1,05	-2,05	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	132,0	-5,00	-0,48	-0,93	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
91	LwK 7.3 m	150,1	13,08	1,25	2,44	
92	LwK 7.4.2	139,0	2,00	0,19	0,37	

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

**Fortsetzung: Laborergebnisse** (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,4	9,36	0,90	1,75	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	128,0	-9,00	-0,86	-1,68	
95	LwK 7.3	127,0	-10,00	-0,96	-1,87	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	-3,00	-0,29	-0,56	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,5	1,54	0,15	0,29	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	-16,00	-1,53	-2,99	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,0	-5,00	-0,48	-0,93	
101	LwK 7.4.2	138,0	1,00	0,10	0,19	
104	LwK 7.6	139,0	2,00	0,19	0,37	
105	LwK 7.7	142,0	5,00	0,48	0,93	
106	LwK 7.3	140,0	3,00	0,29	0,56	
107	LwK 7.6	140,8	3,80	0,36	0,71	
109	Redox incl.	130,0	-7,00	-0,67	-1,31	
206	LwK 7.8	124,0	-13,00	-1,24	-2,43	
207	LwK 7.8	146,0	9,00	0,86	1,68	
208	LwK 7.8	115,0	-22,00	-2,10	-4,11	
209	LwK 7.8	141,3	4,30	0,41	0,80	
210	LwK 7.8	156,0	19,00	1,82	3,55	
219	LwK 7.8	117,0	-20,00	-1,91	-3,73	
226	LwK 7.8	144,0	7,00	0,67	1,31	
239	LwK 7.8	127,0	-10,00	-0,96	-1,87	
253	LwK 7.8	128,0	-9,00	-0,86	-1,68	
254	LwK 7.8	135,0	-2,00	-0,19	-0,37	
260	LwK 7.8	127,0	-10,00	-0,96	-1,87	
264	LwK 7.8	145,0	8,00	0,77	1,49	
265	LwK 7.8	141,0	4,00	0,38	0,75	
270	LwK 7.8	169,0	32,00	3,06	5,97	(**)
273	LwK 7.8	126,0	-11,00	-1,05	-2,05	
320	LwK 7.8	126,0	-11,00	-1,05	-2,05	
339	LwK 7.8	125,0	-12,00	-1,15	-2,24	
351	LwK 7.8	141,0	4,00	0,38	0,75	
366	LwK 7.8	156,0	19,00	1,82	3,55	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5-Z-Score-Einheiten 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: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	-14,00	-1,36	-2,61	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	17,00	1,66	3,17	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	130,4	-3,60	-0,35	-0,67	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	139,0	5,00	0,49	0,93	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	16,00	1,56	2,99	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	131,0	-3,00	-0,29	-0,56	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	4,00	0,39	0,75	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-6,00	-0,58	-1,12	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	1,00	0,10	0,19	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	14,00	1,36	2,61	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,0	-11,00	-1,07	-2,05	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,8	3,76	0,37	0,70	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	132,0	-2,00	-0,19	-0,37	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	142,0	8,00	0,78	1,49	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,0	-2,00	-0,19	-0,37	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	137,0	3,00	0,29	0,56	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	-7,00	-0,68	-1,31	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	16,00	1,56	2,99	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	139,0	5,00	0,49	0,93	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	12,00	1,17	2,24	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	-1,00	-0,10	-0,19	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,4	3,40	0,33	0,63	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter ergänzt.

**Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	9,00	0,88	1,68	
81	LwK 7.5.3(incl. Red.)	126,0	-8,00	-0,78	-1,49	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	132,0	-2,00	-0,19	-0,37	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	0,00	0,00	0,00	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,4	12,36	1,20	2,31	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	128,0	-6,00	-0,58	-1,12	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	0,00	0,00	0,00	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,5	4,54	0,44	0,85	
98	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	-13,00	-1,27	-2,43	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,0	-2,00	-0,19	-0,37	
109	Redox incl.	130,0	-4,00	-0,39	-0,75	

**5.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,9	-1,10	-0,11	-0,21	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	8,00	0,81	1,49	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,0	-1,00	-0,10	-0,19	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	130,0	2,00	0,20	0,37	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,5	-10,50	-1,06	-1,96	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,5	3,48	0,35	0,65	
62	LwK 7.5.2(excl. Red.)	137,0	9,00	0,91	1,68	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	-4,00	-0,41	-0,75	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	131,0	3,00	0,30	0,56	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	121,0	-7,00	-0,71	-1,31	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	144,0	16,00	1,62	2,99	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	6,00	0,61	1,12	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	8,00	0,81	1,49	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-5,00	-0,51	-0,93	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	133,4	5,40	0,55	1,01	
81	LwK 7.5.3(excl. Red.)	121,0	-7,00	-0,71	-1,31	
83	LwK 7.5.3(excl. Red.)	126,0	-2,00	-0,20	-0,37	
86	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	0,00	0,00	0,00	
93	LwK 7.5.1(excl. Red.)	139,6	11,56	1,17	2,16	
94	LwK 7.5.2(excl. Red.)	119,0	-9,00	-0,91	-1,68	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	0,00	0,00	0,00	
97	LwK 7.5.1(excl. Red.)	132,0	3,98	0,40	0,74	
99	LwK 7.5.1(excl. Red.)	125,0	-3,00	-0,30	-0,56	
109	Redox excl.	124,0	-4,00	-0,41	-0,75	

**5.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		jodometrisch	
	alle Daten	ber. Daten	incl. Reduktone alle Daten	excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	32	31	33	24
Minimalwert	126,0	126,0	120,0	117,5
Mittelwert	138,13	137,00	135,50	128,95
Median	137,00	137,00	134,00	128,00
Maximalwert	173,0	150,1	151,0	144,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	9,559	7,251	8,316	6,739
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	1,690	1,302	1,448	1,376
Zielstandardabweichung				
n. Horwitz ( $s_H$ )	10,453	10,453	10,258	9,867
experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,91	0,69	0,81	0,68
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,78	1,35	1,55	1,26
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,16	0,12	0,14	0,14
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,32	0,24	0,27	0,26

5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	131,60	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	140,71	10,492
LwK 7.3 m	modifiziert: 10 ml Probe, 5 ml 15%ige Phosphorsäure	1	150,08	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	130,51	2,714
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	136,73	5,984
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	150,00	
	Destillationsverfahren	32	137,41	8,492
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	26	136,46	9,710
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	3	133,63	7,487
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	jodometr. mit Hydrolyse n. Rebelein ohne Reduktonabzug	3	131,67	6,246
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inklusive Reduktone	1	130,00	
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	33	135,37	8,764
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	18	129,70	6,869
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometr. n. doppelter Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	128,00	14,433
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	jodometr. mit Hydrolyse n. Rebelein mit Reduktonabzug	3	126,00	5,670
Redox excl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	124,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	24	128,78	7,153
LwK 7.6	Pararosanlinmethode	2	139,90	1,443
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	6	136,02	13,647
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	135,57	14,640

Anmerkung:

Die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen waren von den Laboratorien auftragsgemäß einschließlich des Gehaltes an Reduktonen mitzuteilen. Sofern die laborinternen Qualitätsregelungen bei jodometrischen Bestimmungen einen Abzug der Reduktone vorsehen, ist – auch für den Parameter Freie Schweflige Säure – das Ergebnis nach diesem Abzug für die Bewertung der Laborleistung maßgeblich.

Die Bewertungsgrundlage ist jeweils im Kopf der Laborergebnistabellen angegeben. Als experimentelle Zielstandardabweichung diente die Vergleichsstandardabweichung gemäß der Methode OIV-MA-AS323-04A.

