



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2020“

Teil 3

**Durchführung und Ergebnisse der Untersuchung
eines Rotweines FT20P04
und eines Weißweines FT20P05**

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

Stand: 31.01.2021

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	7
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT20P04 und FT20P05	7
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	13
3	Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT20P04 und FT20P05	14
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	14
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	18
4	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P04	21
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	21
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	21
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	22
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse	23
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	23
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	25
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	25
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	26
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse	27
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	28
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	30
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	30
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	31
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse	32
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	32
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	34
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	34
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	35
4.4.3	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	36
4.4.4	Deskriptive Ergebnisse	37
4.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	38
4.5	Glucose [g/L]	40
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	40
4.5.2	Angaben zu den Analyseverfahren	40
4.5.3	FTIR-Laborergebnisse	41
4.5.4	Deskriptive Ergebnisse	42
4.6	Fructose [g/L]	44
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	44
4.6.2	Angaben zu den Analyseverfahren	44
4.6.3	FTIR-Laborergebnisse	45
4.6.4	Deskriptive Ergebnisse	46
4.7	Glycerin [g/L]	48
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	48
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	48
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse	49
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	50

4.8	pH-Wert	51
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	51
4.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	51
4.8.3	FTIR-Laborergebnisse	52
4.8.4	Deskriptive Ergebnisse	53
4.9	Gesamtsäure [g/L]	55
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	55
4.9.2	Angaben zu den Analyseverfahren	55
4.9.3	FTIR-Laborergebnisse	56
4.9.4	Deskriptive Ergebnisse	57
4.10	Weinsäure [g/L]	59
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	59
4.10.2	Deskriptive Ergebnisse	59
4.10.3	FTIR-Laborergebnisse	60
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	61
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	63
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	63
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	63
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse	65
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	65
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	67
4.12.1	Laborergebnisse	67
4.12.2	Deskriptive Ergebnisse	67
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	68
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	69
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	69
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	69
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	70
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse	71
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	71
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	74
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	74
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	74
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	75
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse	76
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	76
4.15	Reduktone [mg/L]	79
4.15.1	Laborergebnisse	79
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	79
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	80
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	81
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	81
4.16.2	Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone	82
4.16.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	82
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	83
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	83
4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	85
4.17.1	Laborergebnisse	85
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	87
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	87

5	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P05	90
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	90
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	90
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	91
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	92
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	92
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	94
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	94
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	95
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse	96
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	97
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	99
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	99
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	100
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse	101
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	101
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	103
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	103
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	104
5.4.3	FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)	105
5.4.4	Deskriptive Ergebnisse	106
5.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	107
5.5	Glucose [g/L]	109
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	109
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	109
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse	111
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	111
5.6	Fructose [g/L]	113
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	113
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	113
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse	115
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	115
5.7	Glycerin [g/L]	117
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	117
5.7.2	FTIR-Laborergebnisse	117
5.7.3	Deskriptive Ergebnisse	118
5.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	119
5.8	pH-Wert	120
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	120
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	120
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	121
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse	122
5.9	Gesamtsäure [g/L]	124
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	124
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	125
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse	126
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	126
5.10	Weinsäure [g/L]	128
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	128
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	128
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse	130
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	130

5.11	Flüchtige Säure [g/L]	132
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	132
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	132
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse	134
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	134
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	136
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1	136
5.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	136
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	136
5.12.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	137
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	139
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	139
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	139
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	140
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse	141
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	141
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	143
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	143
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	143
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	144
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	145
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	145
5.15	Reduktone [mg/L]	147
5.15.1	Laborergebnisse	147
5.15.2	Angaben zu den Analyseverfahren	147
5.15.3	Deskriptive Ergebnisse	148
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	149
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	149
5.16.2	Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone	150
5.16.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	150
5.16.4	Deskriptive Ergebnisse	151
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	151
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	153
5.17.1	Laborergebnisse	153
5.17.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)	154
5.17.4	Angaben zu den Analyseverfahren	155
5.17.5	Deskriptive Ergebnisse	156

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 Laborvergleichsuntersuchung waren von den beteiligten Laboratorien im Rahmen ihrer Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden Parameter zu bestimmen, die über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinausgehen und üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmt werden. Neben einem Schaumwein, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung ein Weißwein, ein Roséwein und zwei Rotweine sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Der vorliegende Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfgütern FT20P04 und FT20P05, nachdem in Teil 1 die für alle Prüfgüter gemeinsamen Aspekte und die Ergebnisse für das Prüfgut FT20P01 sowie in Teil 2 die Ergebnisse für die Prüfgüter FT20P02 und FT20P03 behandelt wurden. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 oder Teil 2 des Berichtes behandelt wurden. Daher wird bei Bedarf auf diese Teile verwiesen.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfgüter FT20P04 und FT20P05 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfgüter dargestellt.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Als Prüfgut FT20P04 wurde ein halbtrockener 2017er Spätburgunder Rotwein von der Ahr aus genossenschaftlicher Herstellung in 0,375 L-Bordeauxflaschen unverändert verwendet. Als Prüfgut FT20P05 wurde ein 2018er rheinhessischer Weißwein verschiedener Rebsorten, eine süße Auslese aus der Produktion einer großen Weinkellerei, gefüllt in 0,25 L-Portionsflaschen, ebenfalls unverändert eingesetzt.

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

Eine Prüfung auf Homogenität wurde für beide Prüfgüter durchgeführt.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT20P04 und FT20P05

Von den Prüfgütern **FT20P04** und **FT20P05** standen jeweils 300 Flaschen zur Verfügung (je 25 Kartons mit 12 Flaschen). Die Kartons wurden nummeriert und aus 12 durch Zufallsgenerator bestimmten Kartons je eine Flasche als Probe zur Homogenitätsprüfung gezogen. Für jedes Prüfgut wurden zwei Serien von Doppelproben gebildet. Die erste Serie diente der Bestimmung

der Freien, Gebundenen und Gesamten Schwefligen Säure, die zweite Serie wurde für die FTIR-Messungen verwendet. Die Messwerte sind für das Prüfgut FT20P04 in den Tabellen 1 und 2 und für das Prüfgut FT20P05 in den Tabellen 4 und 5 dokumentiert. Sie ergaben für das Prüfgut FT20P05 einen Gehalt an Sorbinsäure. Diese ist in dieser Laborvergleichsuntersuchung nicht zu bestimmen und die Messergebnisse waren für die Überprüfung der Homogenität nicht geeignet. Sie sind deshalb in der Tabelle 5 nicht enthalten.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P04, Teil 1

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Schweflige Säure			Reduktone
		frei mg/L	gebunden mg/L	gesamt mg/L	mg/L
1	20	33,33	75,00	108,33	11,15
2	18	33,85	76,04	109,89	9,38
3	23	35,94	78,13	114,07	9,06
4	7	32,29	76,04	108,33	9,27
5	14	34,38	77,08	111,46	9,17
6	12	33,85	79,17	113,02	8,13
7	3	33,85	77,08	110,93	7,81
8	10	33,85	78,13	111,98	9,17
9	6	32,81	77,08	109,89	8,85
10	1	33,85	77,08	110,93	10,21
11	25	35,42	77,08	112,50	8,13
12	24	33,33	78,13	111,46	8,13
13	1	37,50	77,08	114,58	12,29
14	12	35,94	76,04	111,98	12,50
15	3	34,90	77,08	111,98	10,63
16	24	36,46	77,08	113,54	11,98
17	6	35,94	77,08	113,02	9,06
18	7	35,42	77,08	112,50	9,38
19	18	35,42	78,13	113,55	10,00
20	20	34,90	78,13	113,03	11,56
21	10	36,98	78,13	115,11	11,67
22	14	35,42	78,13	113,55	12,19
23	23	38,02	78,13	116,15	11,25
24	25	37,50	79,17	116,67	10,00

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT20P04** wurden wie in Teil 1 beschrieben zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Bei einzelnen auffälligen Messergebnissen ordnete sich der Wiederholungswert unauffällig in die Gesamtschar der Messergebnisse ein. Selbst einzelne stark abweichende Messungen hatten keine Auswirkung auf die weiteren Prüfungen. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben mehrere schwache bis mäßig starke Korrelationen unterschiedlicher Signifikanz. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Probennummer ergaben ein ähnliches Bild. Ob diese Korrelationen für das Ergebnis der Homogenitätsprüfung oder die Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung wesentlich sind, zeigt sich insbesondere bei einer Verknüpfung dieser Beobachtungen mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse.

Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P04, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Gesamte Äpfel-säure	Gesamte Milch-säure	Flüchtige Säure
			g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	20	0,99959	95,48	39,99	14,49	6,30	7,34	8,20	3,662	5,36	2,14	0,20	2,63	0,728
2	18	0,99963	95,30	39,98	14,55	6,33	7,28	8,13	3,657	5,35	2,12	0,22	2,63	0,723
3	23	0,99958	95,23	39,90	14,63	6,21	7,28	8,17	3,664	5,32	2,11	0,20	2,61	0,720
4	7	0,99964	95,34	40,01	14,43	6,24	7,24	8,15	3,660	5,36	2,13	0,20	2,64	0,726
5	14	0,99965	95,37	40,01	14,62	6,17	7,32	8,12	3,658	5,35	2,17	0,17	2,63	0,729
6	12	0,99961	95,40	40,06	14,57	6,13	7,30	8,11	3,662	5,37	2,16	0,21	2,65	0,729
7	3	0,99960	95,45	40,00	14,58	6,22	7,31	8,16	3,658	5,35	2,14	0,17	2,64	0,733
8	10	0,99963	95,38	40,02	14,68	6,18	7,39	8,13	3,658	5,35	2,14	0,19	2,62	0,724
9	6	0,99962	95,18	40,02	14,51	6,15	7,35	8,11	3,660	5,36	2,14	0,21	2,63	0,733
10	1	0,99962	95,36	39,99	14,64	6,30	7,33	8,11	3,657	5,35	2,15	0,17	2,61	0,720
11	25	0,99950	95,29	39,66	14,51	6,30	7,29	8,15	3,655	5,27	2,06	0,19	2,60	0,721
12	24	0,99956	95,29	39,85	14,61	6,29	7,39	8,12	3,658	5,31	2,10	0,20	2,59	0,720
13	1	0,99956	95,53	39,81	14,71	6,35	7,17	8,10	3,657	5,39	2,10	0,19	2,66	0,720
14	12	0,99960	95,73	39,90	14,65	6,10	7,30	8,13	3,653	5,40	2,11	0,18	2,70	0,726
15	3	0,99961	95,52	39,82	14,70	6,13	7,31	8,08	3,654	5,37	2,09	0,19	2,64	0,714
16	24	0,99953	95,37	39,68	14,68	6,28	7,31	8,20	3,656	5,33	2,05	0,19	2,68	0,721
17	6	0,99958	95,45	39,86	14,74	6,35	7,29	8,25	3,652	5,36	2,12	0,10	2,63	0,714
18	7	0,99960	95,69	39,92	14,77	6,35	7,29	8,09	3,659	5,38	2,11	0,17	2,69	0,710
19	18	0,99961	95,46	39,89	14,66	6,27	7,30	8,21	3,658	5,38	2,11	0,15	2,68	0,718
20	20	0,99958	95,48	39,81	14,63	6,16	7,36	8,22	3,653	5,36	2,09	0,18	2,66	0,722
21	10	0,99961	95,51	39,88	14,83	6,27	7,41	8,10	3,660	5,38	2,09	0,20	2,68	0,715
22	14	0,99963	95,40	39,82	14,70	6,23	7,35	8,23	3,650	5,35	2,11	0,15	2,66	0,720
23	23	0,99959	95,32	39,73	14,82	6,24	7,31	8,21	3,653	5,33	2,07	0,16	2,66	0,716
24	25	0,99948	95,68	39,58	14,76	6,25	7,31	8,19	3,653	5,28	1,99	0,17	2,67	0,720

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

Tabelle 3: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT20P04

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_r)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_{Ziel})	s_r/s_{Ziel}	s_{Pr}/s_{Ziel}	
Rel. Dichte FTIR	0,999592	24	7,9953	0,0006	0,000020	0,000038	0,000132	0,152	0,285	0,000056
Vorh. Alkohol FTIR	95,425	24	0,6845	0,7311	0,151		0,535	0,282		0,2563
Gesamtextrakt FTIR	39,883	24	1,7888	0,1660	0,109	0,0684	0,594	0,183	0,115	0,2588
Vergärbare Zucker FTIR	14,645	24	0,3924	0,9339	0,122		0,438	0,279		0,2092
Glucose FTIR	6,242	24	1,6756	0,1941	0,0652	0,0379	0,211	0,308	0,179	0,1041
Fructose FTIR	7,314	24	1,9249	0,1379	0,0416	0,0283	0,240	0,173	0,118	0,1039
Glycerin FTIR	8,153	24	0,9881	0,5045	0,0498		0,336	0,148		0,1426
pH-Wert	3,657	24	0,3288	0,9623	0,0043		0,0476	0,090		0,0195
Gesamtsäure FTIR	5,350	24	7,5965	0,0007	0,0154	0,0280	0,107	0,144	0,262	0,0452
Weinsäure FTIR	2,108	24	1,8741	0,1477	0,0329	0,0218	0,107	0,309	0,204	0,0525
Gesamte Äpfelsäure FTIR	0,182	24	0,3508	0,9535	0,0307		0,0225	1,363		0,0298
Gesamte Milchsäure FTIR	2,645	24	0,2927	0,9747	0,0359		0,129	0,278		0,0616
Flüchtige Säure FTIR	0,7218	24	0,3491	0,9542	0,0072		0,0286	0,250		0,0132
Reduktone	10,04	24	0,4502	0,9016	1,71		1,14	1,509		1,6519
Freie SO2	35,05	24	0,5822	0,8104	1,74		3,28	0,530		2,0819
Gebundene SO2	77,39	24	0,4865	0,8785	1,15		5,357	0,214		2,3981
Gesamte SO2	112,44	24	0,8374	0,6122	2,22		5,357	0,415		2,9758

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

Für die Aussagekraft der Varianzanalyse ist der Quotient s_r/s_{Ziel} maßgeblich. Er erreichte den höchstzulässigen Wert 0,5 für den Parameter Freie Schweflige Säure und überschritt ihn für die Parameter Gesamte Äpfelsäure und Reduktone. Bei beiden Parametern liegt der Gehalt im Bereich der bzw. unterhalb der Anwendungsgrenze des jeweiligen Bestimmungsverfahrens. Diese Messergebnisse tragen daher zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität nicht bei. Für alle anderen geprüften Parameter sind die Ergebnisse der Varianzanalyse aussagekräftig und belegen bei nicht signifikantem Ergebnis der Varianzanalyse eine ausreichende Homogenität. Ein hoch signifikantes Ergebnis der Varianzanalyse ergab sich nur für den Parameter Relative Dichte. 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 belegen, dass für den Parameter Relative Dichte eine ausreichende Homogenität vorliegt. Insgesamt ergibt sich daher für das **Prüfgut FT20P04** eine **ausreichende Homogenität** für die Laborvergleichsuntersuchung.

Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P05, Teil 1

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Schweflige Säure			Reduktone mg/L	Dichte FTIR	Dichte FTIR korr.
		frei mg/L	gebunden mg/L	gesamt mg/L			
1	23	76,04	147,92	223,96	19,27	1,02609	1,02608
2	19	70,83	151,04	221,87	16,56	1,02621	1,02618
3	15	71,88	152,08	223,96	17,50	1,02622	1,02618
4	10	70,31	152,08	222,39	15,63	1,02617	1,02612
5	3	69,27	152,08	221,35	16,04	1,02626	1,02620
6	12	70,31	152,08	222,39	16,56	1,02617	1,02609
7	21	72,40	151,04	223,44	16,88	1,02622	1,02613
8	13	70,83	153,13	223,96	16,98	1,02626	1,02616
9	2	69,27	153,13	222,4	15,83	1,02627	1,02615
10	6	69,79	152,08	221,87	16,88	1,02627	1,02614
11	16	69,79	152,08	221,87	15,94	1,02629	1,02615
12	25	73,44	150,00	223,44	17,19	1,02628	1,02612
13	6	70,31	150,00	220,31	19,38	1,02608	1,02614
14	16	69,27	148,96	218,23	16,88	1,02606	1,02610
15	3	67,71	151,04	218,75	16,46	1,02612	1,02614
16	10	70,31	151,04	221,35	15,94	1,02618	1,02618
17	13	70,83	152,08	222,91	17,60	1,02611	1,02610
18	12	70,31	153,13	223,44	16,88	1,02619	1,02616
19	21	71,88	152,08	223,96	17,19	1,02622	1,02617
20	2	69,27	151,04	220,31	16,56	1,02624	1,02617
21	15	71,35	151,04	222,39	17,29	1,02628	1,02620
22	25	73,44	153,13	226,57	17,92	1,02620	1,02610
23	19	69,27	153,13	222,40	16,56	1,02627	1,02615
24	23	75,00	152,08	227,08	18,54	1,02623	1,02609

Wie vorstehend für das Prüfgut FT20P04 beschrieben wurden die Messergebnisse für das **Prüfgut FT20P05** zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Weder einzelne Messungen noch einzelne Proben zeigten jedoch wesentliche Ausreißermerkmale. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben bei vielen Parametern eine schwache bis mäßige Korrelation, die signifikant gesichert war. Diese führte bei den Parametern Relative Dichte und Gesamte Äpfelsäure zu einem zu hohen Wert für den Quotienten s_r/s_{Ziel} . Die graphische Darstellung der Messergebnisse für Relative Dichte in Abhängigkeit von der Messfolge zeigte jedoch eine starke Korrelation innerhalb der Wiederholungsgruppen sowie einen systematischen Unterschied zwischen beiden Gruppen. Daher wurde eine Korrektur dieser messtechnischen Einflüsse durchgeführt. Eine schwache und auch nur schwach gesicherte Korrelation zur Probennummer ergab sich für den Parameter Reduktone. Mäßige und hoch gesicherte Korrelationen zur Probe-Nummer ergaben sich für die Parameter Freie und von dieser geprägt für Gesamte Schweflige Säure, während bei Gebundener Schwefliger Säure keine Korrelation bestand. Bei der willkürlichen Folge der Nummerierung der Packungen sind diese Korrelationen ohne Aussagekraft für eine eventuell unterschiedliche Beschaffenheit des Prüfgutes in Abhängigkeit von der Füllreihenfolge.

Tabelle 5: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P05, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Vorh. Alkohol g/L	Gesamt-extrakt g/L	Vergärb. Zucker g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Glycerin g/L	pH-Wert	Gesamt-säure g/L	Wein-säure g/L	Gesamte Äpfel-säure g/L	Gesamte Milch-säure g/L	Flüchtige Säure g/L
1	23	78,77	100,61	77,07	22,13	53,10	6,82	3,322	6,18	2,47	1,48	0,55	0,858
2	19	79,00	100,98	77,42	22,38	53,28	6,91	3,32	6,20	2,45	1,49	0,57	0,859
3	15	78,89	101,00	77,52	22,52	53,27	6,88	3,318	6,20	2,45	1,51	0,56	0,868
4	10	78,73	100,94	77,43	22,47	53,32	6,83	3,317	6,20	2,46	1,45	0,57	0,859
5	3	78,76	100,98	77,47	22,47	53,44	6,95	3,308	6,19	2,47	1,45	0,51	0,838
6	12	78,57	100,69	77,16	22,3	53,23	6,85	3,317	6,19	2,46	1,50	0,54	0,842
7	21	78,7	101,03	77,26	22,45	53,16	6,92	3,319	6,20	2,48	1,39	0,53	0,842
8	13	78,74	100,92	77,49	22,28	53,28	6,92	3,318	6,20	2,46	1,51	0,57	0,851
9	2	78,62	101,03	77,43	22,35	53,44	6,92	3,317	6,19	2,47	1,52	0,57	0,85
10	6	78,66	100,98	77,46	22,48	53,27	6,87	3,318	6,19	2,44	1,48	0,54	0,855
11	16	78,58	101,01	77,46	22,47	53,36	6,97	3,319	6,19	2,43	1,50	0,54	0,844
12	25	78,38	100,97	77,51	22,55	53,36	6,89	3,318	6,19	2,47	1,45	0,53	0,847
13	6	78,23	100,66	77,25	22,37	53,16	6,88	3,319	6,17	2,43	1,58	0,53	0,866
14	16	78,23	100,62	77,27	22,53	53,10	6,82	3,320	6,17	2,44	1,53	0,54	0,876
15	3	78,29	100,77	77,27	22,48	53,24	6,88	3,322	6,19	2,45	1,51	0,56	0,861
16	10	78,57	100,99	77,43	22,49	53,33	6,77	3,323	6,21	2,46	1,52	0,55	0,861
17	13	78,35	100,69	77,38	22,45	53,15	6,71	3,321	6,18	2,46	1,54	0,55	0,865
18	12	78,47	100,91	77,52	22,38	53,38	6,94	3,318	6,20	2,46	1,56	0,56	0,868
19	21	78,59	101,01	77,65	22,72	53,24	6,96	3,319	6,22	2,45	1,52	0,54	0,865
20	2	78,51	101,02	77,45	22,46	53,21	6,80	3,317	6,23	2,42	1,54	0,55	0,856
21	15	78,38	101,03	77,70	22,48	53,37	6,85	3,317	6,20	2,44	1,54	0,55	0,859
22	25	78,44	100,99	77,53	22,72	53,16	6,86	3,321	6,21	2,46	1,48	0,54	0,862
23	19	78,26	100,99	77,59	22,46	53,36	6,73	3,317	6,22	2,44	1,56	0,56	0,871
24	23	78,32	100,93	77,52	22,49	53,38	6,83	3,317	6,19	2,45	1,47	0,54	0,859

Die Ergebnisse der anschließenden varianzanalytischen Prüfungen sind in der Tabelle 6 zusammengefasst.

Tabelle 6: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT20P05

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_r)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_{Ziel})	s_r/s_{Ziel}	s_{Pr}/s_{Ziel}	
Rel. Dichte FTIR	1,026204	24	0,3464	0,9553	0,000083		0,000132	0,629		0,00009
Rel. Dichte FTIR, korrr.	1,026141	24	1,8163	0,1599	0,000030	0,000019	0,000132	0,229	0,147	0,00006
Vorh. Alkohol FTIR	78,543	24	0,2129	0,9923	0,270		0,535	0,505		0,3299
Gesamtextrakt FTIR	100,906	24	0,9542	0,5275	0,145		0,594	0,245		0,2737
Vergärbare Zucker FTIR	77,427	24	0,5563	0,8296	0,168		2,133	0,079		0,8700
Glucose FTIR	22,453	24	1,4591	0,2628	0,112	0,0538	0,649	0,173	0,083	0,2805
Fructose FTIR	53,275	24	0,3764	0,9419	0,121		1,481	0,082		0,6049
Glycerin FTIR	6,865	24	0,6696	0,7429	0,0746		0,291	0,257		0,1356
pH-Wert	3,318	24	0,3472	0,9550	0,0035		0,0476	0,073		0,0194
Gesamtsäure FTIR	6,196	24	1,4271	0,2749	0,0134	0,0062	0,107	0,125	0,058	0,0447
Weinsäure FTIR	2,453	24	1,2747	0,3405	0,0140	0,0052	0,121	0,115	0,043	0,0503
Gesamte Äpfelsäure FTIR	1,503	24	0,8333	0,6152	0,0447		0,056	0,797		0,0472
Gesamte Milchsäure FTIR	0,5479	24	1,4139	0,2800	0,0140	0,0064	0,0339	0,412	0,188	0,0188
Flüchtige Säure FTIR	0,8576	24	0,2820	0,9778	0,0122		0,0286	0,427		0,0161
Reduktone	17,02	24	3,9676	0,0128	0,634	0,772	1,777	0,356	0,434	0,9237
Freie SO ₂	70,96	24	26,207	0,0000	0,542	1,92	5,978	0,091	0,322	2,4504
Gebundene SO ₂	151,56	24	0,5042	0,8666	1,53		5,357	0,286		2,5766
Gesamte SO ₂	222,53	24	2,8318	0,0436	1,48	1,42	5,357	0,276	0,265	2,5501

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

Die Ergebnisse der Varianzanalyse in Tabelle 6 zeigen, dass der für ihre Aussagekraft maßgebliche Höchstwert 0,5 des Quotienten s_r/s_{Ziel} bei den Parametern Relative Dichte und Äpfelsäure überschritten wurde. Bei dem Parameter Relative Dichte führte die Korrektur der systematischen Fehler zu einem unauffälligen Wert dieses Quotienten. Bei dem Parameter Milchsäure ist zu berücksichtigen, dass der gemessene Wert an der unteren Grenze des Anwendungsbereiches der Analysenmethode liegt. Somit tragen nur die Messergebnisse für den Parameter Äpfelsäure nicht zur Entscheidung über eine ausreichende Homogenität des Prüfgutes bei. Schwach signifikante Unterschiede zwischen den Proben zeigt die Varianzanalyse für die Parameter Reduktone und Gesamte Schweflige Säure. Letzterer Befund dürfte durch die hoch signifikanten Unterschiede bei dem Parameter Freie Schweflige Säure bedingt sein. Der im Fall signifikanter Unterschiede zwischen den Proben weiterhin zu berücksichtigende Quotient s_{Pr}/s_{Ziel} liegt bei dem Parameter Reduktone über dem Höchstwert 0,3, während dieser Wert bei dem Parameter Gesamte Schweflige Säure nur knapp überschritten ist. Der für eine Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung entscheidende, nach Fearn und Thompson berechnete Maximalwert für die Standardabweichung zwischen den Proben s_{Pr} wird in keinem Fall überschritten. Damit ist das **Prüfgut FT20P05 ausreichend homogen** und im vollen Umfang für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet.

2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

Die Informationen zur Verteilung des Untersuchungsmaterials an die Laboratorien, die Erläuterungen zur Durchführung der Untersuchungen, Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung können Teil 1 des Berichtes entnommen werden. Hinsichtlich der Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Grundlagen für die Bewertung der FTIR-

Untersuchungsergebnisse unter Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 des Berichtes verwiesen.

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT20P04 und FT20P05

3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT20P04 wird durch die in Tabelle 7 und für das Prüfgut FT20P05 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 des Berichtes verwiesen.

Nach den Daten in Tabelle 7 fanden sich unter den Ergebnissen mit herkömmlichen Methoden für das Prüfgut **FT20P04** bei den 25 Datengruppen resp. 19 Parametern nur in drei Datengruppen, resp. bei drei Parametern, Laborergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abwichen. Dies ist unauffällig. Auf typische Ursachen wird bei der Besprechung des Gesamtergebnisses für das Prüfgut FT19P05 eingegangen. Wegen eines Z-Scores im absoluten Betrag über 5 wurde bei zehn Datengruppen jeweils ein Laborergebnis ausgeschlossen. Vier Laborergebnisse wurden aus diesem Grund bei dem Parameter Relative Dichte ausgeschlossen. Dies war mit vier von 59, entsprechend 6,8 % zugleich der höchste Anteil ausgeschlossener Laborergebnisse. Die höchstzulässige Ausschlussquote von 22,2 % wurde damit nicht erreicht. Bei Rundung auf jeweils eine Nachkommastelle lag der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der maßgeblichen Zielstandardabweichung (s_L/s_{Ziel}) bei 15 der 25 Datengruppen unter bzw. erreichte den Wert 1,5 und befand sich damit im voll befriedigenden Bereich. Für weitere fünf aus der Tabelle 7 ersichtliche Datengruppen lag der Wert dieses Quotienten über 1,5 bis 2,0 und war damit mäßig erhöht. Der Höchstwert 2,0 wurde bei allen drei Auswertungsvarianten für den Parameter **Weinsäure**, sowie für den Parameter **Reduktone** und die Auswertungsvariante **Freie Schweflige Säure exclusive Reduktone** überschritten. Dies führte für die Bewertung der Laborleistung dazu, dass **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden konnten. Erhöhte Werte von 0,4 oder 0,5 des Quotienten u_M/s_{Ziel} und damit eine mäßig eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes ergaben sich bei vier der 22 Datengruppen und damit infolge der geringen Anzahl an Laborergebnissen je Datengruppe auch für Datengruppen mit unauffälligen Werten des Quotienten s_L/s_{Ziel} . Der Höchstwert 0,5 des Quotienten u_M/s_{Ziel} wurde mit der Folge zu großer Unsicherheit des Bezugswertes bei vier Datengruppen überschritten. Für die Bewertung der Z-Scores der Laborergebnisse ist diese Unsicherheit bei zwei Datengruppen des Parameters Weinsäure und der Datengruppe Freie Schweflige Säure excl. Reduktone relevant. Im Fall der Gesamten Äpfelsäure wird der Bezugswert durch den Median der Ergebnisse der L-Äpfelsäurebestimmung nur mäßig gestützt, sodass dieser Sachverhalt vor einer Bewertung des Z-Scores zu Lasten eines Teilnehmers zu beachten ist. Mit Ausnahme der **oben genannten Parameter** wurden somit bei Beachtung der unzureichenden Zuverlässigkeit des Bezugswertes für Gesamte Äpfelsäure **gültige Z-Scores** erhalten.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT20P04

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Labor-Stdfehler u_M	Zielstandardabweichungen			Quotienten					
							n. Horwitz s_H	exp. herk. s_{exp}	exp. FTIR s_{FTIR}	s_L/s_H	s_L/s_{exp}	s_L/s_{FTIR}	u_M/s_{Ziel}	u_M/s_{FTIR}	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	59	55	0,999515	0,999500	0,000130	0,000017			0,000132	0,000190		0,98	0,68	0,13	0,09
Vorhandener Alkohol [g/L]	26	25	95,06	95,09	0,674	0,135	2,710		0,535	0,886	0,25	1,26	0,76	0,25	0,15
Gesamtextrakt [g/L]	51	50	39,98	40,00	0,541	0,0765	1,299		0,594		0,42	0,91		0,13	
Vergärbare Zucker [g/L]	38	38	13,382	13,380	0,387	0,0628	0,512		0,404	0,584	0,76	0,96	0,66	0,16	0,11
Glucose [g/L]	39	38	6,691	6,691	0,152	0,0247	0,284		0,224	0,408	0,54	0,68	0,37	0,11	0,06
Fructose [g/L]	39	39	6,748	6,700	0,310	0,0496	0,285		0,224	0,473	1,09	1,38	0,65	0,22	0,10
Glycerin [g/L]	22	21	8,265	8,170	0,462	0,101	0,337			0,348	1,37		1,33		0,29
pH-Wert	48	48	3,719	3,730	0,0666	0,0096			0,0476	0,0493		1,40	1,35	0,20	0,19
Gesamtsäure [g/L]	53	53	5,114	5,100	0,119	0,0163	0,226		0,107	0,145	0,53	1,11	0,82	0,15	0,11
Weinsäure [g/L]															
- nur HPLC	12	12	1,740	1,728	0,205	0,0590	0,0900			0,227	2,27		0,90	0,66	0,26
- nur Photometrie	19	18	1,847	1,860	0,220	0,0518	0,0958			0,227	2,29		0,97	0,54	0,23
- HPLC + Photometrie	31	30	1,804	1,820	0,217	0,0396	0,0941			0,227	2,31		0,96	0,42	0,17
Flüchtige Säure [g/L]	24	24	0,6312	0,6335	0,0607	0,0124	0,0384			0,0891	1,58		0,68	0,32	0,14
Acetat als Essigsäure [g/L]	30	30	0,5731	0,5900	0,0617	0,0113	0,0361				1,71			0,31	
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	10 (2)	9	0,2633	0,2800	0,0456	0,0152	0,0192	0,0250			2,37	1,82		0,61	
L-Äpfelsäure [g/L]	35	35	0,3281	0,3220	0,0344	0,0058	0,0216	0,0261			1,59	1,32		0,22	
Gesamte Milchsäure [g/L]	18	17	3,134	3,160	0,163	0,0394	0,150			0,209	1,08		0,78	0,26	0,19
L-Milchsäure [g/L]	33 (1)	32	2,559	2,533	0,168	0,0296	0,125	0,131			1,35	1,28		0,23	
Reduktone [mg/L]	34 (10)	34	12,66	13,00	4,01	0,69	1,41				2,83			0,49	
Freie Schweflige Säure [mg/L]															
- Destillation + Photometrie	23	23	29,18	29,20	4,65	0,97	2,81				1,65			0,34	
- incl. Reduktone	28	28	36,39	36,00	4,09	0,77	3,36				1,22			0,23	
- excl. Reduktone	14	14	25,88	24,50	6,99	1,87	2,42	3,36			2,89	2,08		0,56	
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]															
- Destillation	34	33	100,25	100,00	7,58	1,32	8,00	5,36	8,00	0,95	1,42	0,95	0,25	0,16	
- incl. Reduktone	16	16	105,64	107,00	8,82	2,21	8,47	5,36		1,04	1,65		0,41		
- excl. Reduktone	10	10	102,93	102,90	5,93	1,88	8,20	5,36		0,72	1,11		0,35		

Erläuterungen zur Tabelle 7 und 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_{FTIR}) = 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_{FTIR}) = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

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

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

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

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

Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT20P05

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s _L	Labor-Stdfehler u _M	Zielstandardabweichung			Quotienten						
							n. Horwitz s _H	exp. herk. s _{exp}	exp. FTIR s _{FTIR}	s _L /s _H	s _L /s _{exp}	s _L /s _{FTIR}	u _M /s _{Ziel}	u _M /s _{FTIR}		
Relative Dichte 20 °C/20 °C	59	58	1,025910	1,025900	0,000131	0,000017			0,000132	0,000190		0,99	0,99	0,69	0,13	0,09
Vorhandener Alkohol [g/L]	23	23	77,58	77,73	0,666	0,139	2,284	0,535	0,886		0,29	1,24	0,75	0,26	0,16	
Gesamtextrakt [g/L]	52 (1)	52	101,71	101,70	0,512	0,0711	2,869	0,594			0,18	0,86		0,12		
Vergärbare Zucker [g/L]	37	37	76,58	76,20	1,85	0,303	2,245	2,100			0,82	0,88		0,14		
Glucose [g/L]	38	37	23,53	23,44	0,544	0,0894	0,825	0,676			0,66	0,80		0,13		
Fructose [g/L]	37	37	53,03	52,43	1,55	0,255	1,634	1,459			0,95	1,06		0,17		
Glycerin [g/L]	20	20	6,323	6,305	0,451	0,1008	0,270		0,348		1,67		1,29	0,37	0,29	
pH-Wert	47	47	3,360	3,380	0,0651	0,0095		0,0476	0,0493			1,37	1,32	0,20	0,19	
Gesamtsäure [g/L]	52 (1)	50	6,175	6,195	0,140	0,0198	0,266	0,107	0,145		0,53	1,31	0,97	0,19	0,14	
Weinsäure [g/L]																
- nur HPLC	12	10	2,760	2,720	0,270	0,0853	0,132		0,227		2,04		1,19	0,64	0,38	
- herkömmliche Verfahren	32	30	2,756	2,760	0,219	0,0400	0,134		0,227		1,63		0,96	0,30	0,18	
Flüchtige Säure [g/L]; s _{exp}	23	20	0,5981	0,5958	0,0715	0,0160	0,0364	0,0286	0,0891		1,96	2,50	0,80	0,56	0,18	
Flüchtige Säure [g/L]; s _H	23	21	0,6053	0,5960	0,0772	0,0168	0,0364		0,0891		2,12		0,87	0,46	0,19	
Acetat als Essigsäure [g/L]																
- enzymatisch, automatisiert	22	22	0,5162	0,5300	0,0588	0,0125	0,0330				1,78			0,38		
- enz., man. + NMR	9	9	0,4626	0,4760	0,0383	0,0128	0,0301				1,27			0,42		
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	12	11	1,828	1,860	0,139	0,0420	0,0958	0,0651	0,218		1,45	2,14	0,64	0,64	0,19	
L-Äpfelsäure [g/L]	32	31	1,820	1,810	0,123	0,0221	0,0936	0,0639			1,31	1,92		0,35		
Gesamte Milchsäure [g/L]	18 (1)	16	0,6233	0,6100	0,0540	0,0135	0,0372		0,209		1,45		0,26	0,36	0,06	
L-Milchsäure [g/L]	30 (1)	28	0,5301	0,5155	0,0574	0,0108	0,0322	0,0406			1,78	1,41		0,27		
Reduktone [mg/L]	43 (2)	43	19,84	20,00	3,70	0,565	2,04				1,82			0,28		
Freie Schweflige Säure [mg/L]																
- Destillation+Photometrie	22	22	50,40	50,58	5,09	1,08	4,48				1,14			0,24		
- incl. Reduktone	30	30	65,75	66,00	5,48	1,000	5,62				0,97			0,18		
- excl. Reduktone	13	13	49,69	48,00	8,77	2,43	4,29	5,62			2,05	1,56		0,43		
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]																
- Destillation	33	32	190,26	190,50	8,77	1,55	13,83	5,36	13,83		0,63	1,64	0,63	0,29	0,11	
- incl. Reduktone	22	22	204,78	208,50	11,16	2,38	14,93	5,36			0,75	2,08		0,44		
- excl. Reduktone	9	9	193,68	193,00	8,36	2,79	13,99	5,36			0,60	1,56		0,52		

Bei insgesamt 26 Datengruppen, die bei der Auswertung aus den Laborergebnissen der 19 Parameter zu dem Prüfgut **FT20P05** gebildet wurden, lagen nur sechs, um mehr als 50 % vom Median der jeweiligen Datengruppe abweichende Werte vor, von denen zwei bei dem Parameter Reduktone auftraten. Diese Werte blieben bei allen statistischen Berechnungen unberücksichtigt, wurden aber durch Z-Scores bewertet. Trifft dies nur für ein Laborergebnis je Datengruppe zu, zeigt die Erfahrung, dass häufig Übertragungsfehler oder eine Nichtberücksichtigung von Verdünnungsfaktoren vorliegen. Analytische Probleme sind hingegen typischerweise Ursache einer Häufung derartiger Laborergebnisse, wobei vorliegend die Anzahl von zwei Ausschlüssen entsprechend einem Anteil von etwa 5 % bei dem Parameter Reduktone eher gering ist. Wegen eines Z-Scores im Absolutbetrag über fünf wurden bei elf Datengruppen jeweils ein bis zwei Laborergebnisse ausgeschlossen. Die höchste Anzahl von drei und zugleich der höchste Anteil von 13 % ausgeschlossener Laborergebnisse ergab sich bei der Auswertung der um den Einfluss der Schwefligen Säure korrigierten Ergebnisse für Flüchtige Säure bei Anwendung der experimentellen Vergleichsstandardabweichung als Zielstandardabweichung. Zwei dieser Ergebnisse wurden auch bei Verwendung der hier für die Bewertung der Laborergebnisse verbindlichen, nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung ausgeschlossen. Auch bei den beiden Auswertungsvarianten für den Parameter Weinsäure, wurden jeweils dieselben Laborergebnisse ausgeschlossen. Der zulässige Höchstanteil von 22,2 % ausgeschlossener Laborergebnisse wurde somit nicht erreicht.

Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} wurde bei 13 Datengruppen eingehalten. Mäßig erhöhte Werte zwischen 1,5 und 2,0 ergaben sich für 9 Datengruppen, unter denen sich beide Varianten der Auswertung des Parameters Weinsäure und zwei von drei Varianten der Auswertungen zum Parameter Gesamte Schweflige Säure befanden. Der Höchstwert 2,0 wurde in vier Fällen bei beiden Auswertungsvarianten des Parameters **Flüchtige Säure** und bei den Parametern **Gesamte Äpfelsäure** und Gesamte Schweflige Säure inklusive Reduktone überschritten. Nur bei der letztgenannten Datengruppe hatte dies keine Auswirkungen auf die Bewertung der Laborergebnisse, da die verbindliche Bewertung aller Ergebnisse für den Parameter Gesamte Schweflige Säure auf der Basis der Ergebnisse aus Destillationsverfahren erfolgte. Für die beiden anderen Parameter konnten **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden.

Unauffällige Werte bis zu 0,3 des Quotienten u_M/s_{Ziel} ergaben sich für 15 Datengruppen. Mäßig erhöhte Werte von 0,4 bzw. 0,5 resultierten bei 7 Datengruppen und der Höchstwert 0,5 wurde auch aufgrund der je Datengruppe geringen Ergebnisanzahl bei je einer Auswertungsvariante der Parameter Weinsäure und Flüchtige Säure, dem Parameter Gesamte Äpfelsäure und der Auswertungsvariante für Gesamte Schweflige Säure exclusive Reduktone überschritten. Bei den Parametern Weinsäure, Flüchtige Säure und Gesamte Schweflige Säure exclusive Reduktone ist die für die Bewertung der Laborergebnisse durch Z-Scores maßgebliche Auswertungsvariante nicht betroffen, während bei dem Parameter Gesamte Äpfelsäure die obige Schlussfolgerung, dass keine gültigen Z-Scores ermittelt werden konnten, verstärkt wird. Mit Ausnahme der oben genannten Parameter konnten somit **gültige Z-Scores** erhalten werden.

3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 des Berichtes begründet, wurden auch für die Proben FT20P04 und FT20P05 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unterzogen, aber keine auf dieser Grundlage berechneten Z-Scores ausgewiesen. Hierbei werden die mit robusten statistischen Verfahren ermittelten, beschreibenden statistischen Kennzahlen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Rotweinprüfgut FT20P04 in der Tabelle 9 und für das Weißweinprüfgut FT20P05 in der Tabelle 10 enthalten. Insgesamt bestätigen sich die im Abschnitt 5.3 des Teiles 1 und im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 des Berichtes angesprochenen Probleme und Schlussfolgerungen hinsichtlich der mangelnden Übereinstimmung der FTIR-Messergebnisse.

Bei den hier besprochenen Prüfgütern wird die Untergrenze des Anwendungsbereiches des FTIR-Verfahrens bei dem Prüfgut **FT20P04** für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure** und bei dem Prüfgut **FT20P05** bei dem Parameter **Gesamter Milchsäure** erreicht bzw. unterschritten. Daher erfolgt die Darstellung der Daten für diese Prüfgut/Parameter-Kombinationen in den Tabellen 9 und 10 in grauer Schriftfarbe und es werden in den Datentabellen der Abschnitte 4.13.3 und 5.14.3 sowie in den Laborergebnismitteilungen für diese Parameter/Prüfgut-Kombinationen **keine Z-Scores** für die FTIR-Laborergebnisse ausgewiesen. Bei den anderen Parametern wird bei den Prüfgütern die Untergrenze des Anwendungsbereiches der Methode nicht erreicht.

Abschließend werden in der Tabelle 11 und der Tabelle 12 für die beiden Prüfgüter die Abweichungen der Mediane der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und des FTIR-Verfahrens sowie die ihnen entsprechenden Z-Score-Werte auf der Basis der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen zusammengestellt. Wie stets für den Parameter **Gesamtextrakt** wird bei diesem Vergleich an deren Stelle die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden verwendet. Dahingegen wird für die Bewertung der Differenz bei den Messergebnissen für **Vergärbare Zucker** und **Fructose** bei dem Prüfgut FT20P05 die Übereinstimmungsstandardabweichung verwendet, während bei der Bewertung der FTIR-Laborergebnisse die im Betrag höhere Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden eingesetzt wurde.

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

Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut FT20P04

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	0,99956	0,999600	0,000267		0,000146		1,83	0,20
Vorhandener Alkohol [g/L]	84	95,201	95,217	1,017	2,713	0,739	0,37	1,38	0,15
Gesamtextrakt [g/L]	36	40,406	40,510	0,761	1,313	0,415	0,58	1,83	0,31
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	82	13,919	13,970	0,771	0,531	0,354	1,45	2,18	0,24
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	80	13,508	13,525	0,656	0,517	0,354	1,27	1,85	0,21
Glucose [g/L]	80	6,497	6,500	0,443	0,277	0,288	1,60	1,54	0,17
Fructose [g/L]	80	6,974	6,945	0,450	0,293	0,222	1,53	2,03	0,23
Glycerin [g/L]	70	7,972	7,975	0,566	0,330	0,265	1,72	2,14	0,26
pH-Wert	81	3,687	3,680	0,0661		0,0188		3,52	0,39
Gesamtsäure [g/L]	85	5,203	5,200	0,177	0,230	0,0816	0,77	2,17	0,24
Weinsäure [g/L]	78	1,856	1,840	0,241	0,0950	0,132	2,53	1,82	0,21
Flüchtige Säure [g/L]	77	0,6841	0,6900	0,0867	0,0413	0,0427	2,10	2,03	0,23
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	77	0,6841	0,6900	0,0867	0,0413	0,0975	2,10	0,89	0,10
Gesamte Milchsäure [g/L]	77	2,770	2,800	0,333	0,136	0,0805	2,46	4,14	0,47
Freie Schweflige Säure [mg/L]	30	29,102	29,100	5,766	2,803	2,803	2,06	2,06	0,38
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	31	93,726	95,000	10,596	7,659	5,36	1,38	1,98	0,36

Tabelle 10: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT20P05

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	81	1,02582	1,025800	0,000448		0,000146		3,07	0,34
Vorhandener Alkohol [g/L]	82	78,085	77,950	1,155	2,289	0,739	0,50	1,56	0,17
Gesamtextrakt [g/L]	36	101,270	101,545	1,595	2,866	0,415	0,56	3,84	0,64
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	80	75,655	75,600	2,305	2,230	0,354	1,03	6,51	0,73
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	78	75,195	75,265	2,332	2,222	0,354	1,05	6,59	0,75
Glucose [g/L]	78	23,030	22,845	1,193	0,807	0,288	1,48	4,14	0,47
Fructose [g/L]	78	52,113	52,135	1,799	1,626	0,222	1,11	8,10	0,92
Glycerin [g/L]	71	6,791	6,610	1,117	0,281	0,265	3,97	4,22	0,50
pH-Wert	78	3,376	3,380	0,078		0,0188		4,15	0,47
Gesamtsäure [g/L]	83	6,324	6,330	0,225	0,271	0,0816	0,83	2,76	0,30
Weinsäure [g/L]	76	2,769	2,700	0,430	0,132	0,132	3,27	3,26	0,37
Flüchtige Säure [g/L]	75	0,6179	0,6300	0,1104	0,0382	0,0427	2,89	2,59	0,30
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	75	1,744	1,750	0,471	0,091	0,0975	5,18	4,83	0,56
Gesamte Milchsäure [g/L]	75	0,4601	0,4000	0,4240	0,0260	0,0805	16,33	5,27	0,61
Freie Schweflige Säure [mg/L]	29	49,28	48,80	8,77	4,35	4,35	2,02	2,02	0,37
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	30	191,57	191,00	15,98	13,86	13,86	1,15	1,15	0,21

Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse: Prüfgut FT20P04

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel-StdAbw SÜ _{FTIR}	Z _{FTIR} - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,999600	0,999500	0,000100	0,000190	0,53
Vorhandener Alkohol [g/L]	95,22	95,09	0,127	0,886	0,14
Gesamtextrakt [g/L]	40,51	40,00	0,510	0,594	0,86
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	13,970	13,380	0,590	0,584	1,01
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	13,525	13,380	0,145	0,584	0,25
Glucose [g/L]	6,500	6,691	-0,191	0,408	-0,47
Fructose [g/L]	6,945	6,700	0,245	0,330	0,74
Glycerin [g/L]	7,975	8,170	-0,195	0,348	-0,56
pH-Wert	3,680	3,730	-0,050	0,049	-1,01
Gesamtsäure [g/L]	5,200	5,100	0,100	0,145	0,69
Weinsäure [g/L]	1,840	1,820	0,020	0,227	0,09
Flüchtige Säure [g/L]	0,6900	0,6335	0,056	0,089	0,63
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	0,0700	0,2800	-0,210	0,218	-0,96
Gesamte Milchsäure [g/L]	2,800	3,160	-0,360	0,209	-1,72
Freie Schweflige Säure [mg/L]	29,10	29,20	-0,10	2,81	-0,04
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	95,00	100,00	-5,00	8,00	-0,63

Die erhaltenen Z-Scores zeigen an, in welchem Ausmaß die "mittleren" Ergebnisse beider Gruppen verschieden sind bzw. inwieweit sich bei den Ergebnissen des FTIR-Verfahrens Matrixeffekte auf die im Vergleich mit den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsmethoden erhaltenen Z-Scores auswirken. Entsprechen die systematischen Matrixeffekte einem absoluten Z-Scorebetrag unter 1,0 so sind sie für die Praxis und die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse nicht relevant. Bei dem Prüfgut **FT20P04** liegt Z_{FTIR}-Score für den Parameter **Gesamte Milchsäure** sogar über 1,5. Bei dem Prüfgut **FT20P05** wird der Wert 1,0 für die Parameter **Vergärbare Zucker (Summe)** und **Glucose** überschritten, wobei der über 1,5 liegende Wert für Vergärbare Zucker durch den erhöhten Wert für Glucose geprägt wird. Für diese Parameter werden damit erhebliche Differenzen angezeigt. Die FTIR-Laborergebnisse für diese Prüfgüter sind abgesehen von den genannten Parametern gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen im Hinblick auf eine einwandfreie Gerätefunktion und korrekte Probenbehandlung geeignet.

Tabelle 12: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse: Prüfgut FT20P05

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel-StdAbw SÜ _{FTIR}	Z _{FTIR} - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,025800	1,025900	-0,000100	0,000190	-0,53
Vorhandener Alkohol [g/L]	77,95	77,73	0,220	0,886	0,25
Gesamtextrakt [g/L]	101,55	101,70	-0,155	0,594	-0,26
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt.	75,60	76,20	-0,600	0,584	-1,03
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	75,27	76,20	-0,935	0,584	-1,60
Glucose [g/L]	22,84	23,44	-0,599	0,408	-1,47
Fructose [g/L]	52,13	52,43	-0,295	0,330	-0,89
Glycerin [g/L]	6,610	6,305	0,305	0,348	0,88
pH-Wert	3,380	3,380	0,000	0,049	0,00
Gesamtsäure [g/L]	6,330	6,195	0,135	0,145	0,93
Weinsäure [g/L]	2,700	2,760	-0,060	0,227	-0,26
Flüchtige Säure [g/L]	0,630	0,5960	0,034	0,089	0,38
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	1,750	1,860	-0,110	0,218	-0,50
Gesamte Milchsäure [g/L]	0,40	0,6100	-0,210	0,209	-1,00
Freie Schweflige Säure [mg/L]	48,80	50,58	-1,78	4,48	-0,40
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	191,00	190,50	0,50	13,83	0,04

Weitere Aspekte der Bewertung der FTIR-Ergebnisse wurden in den Abschnitten 5.2 und 5.3 des ersten Teiles und im Abschnitt 3.2 des zweiten Teiles des Berichtes angesprochen. Wesentliche Matrixeffekte wurden im Kurzbericht zu den Laborergebnismitteilungen erwähnt.

4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P04

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	0,99952	0,000020	0,15	
02	LwK 8.1	0,99930	-0,000200	-1,52	
03	LwK 8.4	0,99941	-0,000090	-0,68	
04	LwK 8.4	0,99929	-0,000210	-1,59	
05	LwK 8.4	0,99967	0,000170	1,29	
06	LwK 8.4	0,99954	0,000040	0,30	
08	LwK 8.1	0,99953	0,000030	0,23	
09	LwK 8.4	0,99939	-0,000110	-0,83	
10	LwK 8.4	0,99480	-0,004700	-35,61	(**)
11	LwK 8.4	0,99948	-0,000020	-0,15	
13	LwK 8.4	0,99947	-0,000030	-0,23	
15	LwK 8.4	0,99940	-0,000100	-0,76	
16	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
18	LwK 8.4	0,99940	-0,000100	-0,76	
19	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
21	LwK 8.4	0,99952	0,000020	0,15	
22	LwK 8.4	0,99970	0,000200	1,52	
23	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
24	LwK 8.4	0,99940	-0,000100	-0,76	
26	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
27	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
28	LwK 8.4	0,99945	-0,000050	-0,38	
30	LwK 8.4	0,99948	-0,000020	-0,15	
34	LwK 8.4	0,99947	-0,000030	-0,23	
36	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
37	LwK 8.3	0,99925	-0,000250	-1,89	
38	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
39	LwK 8.4	0,99949	-0,000010	-0,08	
40	LwK 8.4	0,99946	-0,000040	-0,30	
41	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	0,99550	-0,004000	-30,30	(**)
44	LwK 8.4	0,99940	-0,000100	-0,76	
45	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
46	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
48	LwK 8.4	0,99954	0,000040	0,30	
49	LwK 8.4	0,99961	0,000110	0,83	
50	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
51	LwK 8.4	0,99945	-0,000050	-0,38	
52	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
55	LwK 8.4	0,99949	-0,000010	-0,08	
58	LwK 8.4	0,99938	-0,000120	-0,91	
59	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
60	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
62	LwK 8.4	0,99945	-0,000050	-0,38	
63	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
64	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
66	LwK 8.4	0,99950	0,000000	0,00	
68	LwK 8.4	0,99958	0,000080	0,61	
72	LwK 8.4	0,98412	-0,015380	-116,52	(**)
73	LwK 8.4	1,00010	0,000600	4,55	
74	LwK 8.4	0,99960	0,000100	0,76	
78	LwK 8.4	0,99965	0,000150	1,14	
79	LwK 8.2	1,00020	0,000700	5,30	(**)
80	LwK 8.4	0,99980	0,000300	2,27	
81	LwK 8.4	0,99944	-0,000060	-0,45	
82	LwK 8.4	0,99945	-0,000050	-0,38	
86	LwK 8.4	0,99940	-0,000100	-0,76	
91	LwK 8.4	0,99951	0,000010	0,08	
100	LwK 8.1	0,99944	-0,000060	-0,45	

(**) 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	0,99950	0,000000	0,00	
202	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
203	FTIR	0,99981	0,000310	1,63	
204	FTIR	0,99900	-0,000500	-2,63	
205	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
206	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
207	FTIR	0,99930	-0,000200	-1,05	
208	FTIR	0,99910	-0,000400	-2,11	
209	FTIR	0,99894	-0,000560	-2,95	
210	FTIR	0,99944	-0,000060	-0,32	
211	FTIR	0,99933	-0,000170	-0,89	
212	FTIR	0,99900	-0,000500	-2,63	
213	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
215	FTIR	0,99900	-0,000500	-2,63	
216	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
217	FTIR	0,99990	0,000400	2,11	
218	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
219	FTIR	0,99937	-0,000130	-0,68	
220	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
221	FTIR	0,99930	-0,000200	-1,05	
222	FTIR	0,99982	0,000320	1,68	
223	FTIR	0,99879	-0,000710	-3,74	
224	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
225	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
226	FTIR	0,99957	0,000070	0,37	
227	FTIR	0,99930	-0,000200	-1,05	
228	FTIR	0,99971	0,000210	1,11	
229	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
230	FTIR	0,99931	-0,000190	-1,00	
232	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
234	FTIR	0,99964	0,000140	0,74	
235	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
236	FTIR	0,99965	0,000150	0,79	
237	FTIR	0,99998	0,000480	2,53	
240	FTIR	0,99948	-0,000020	-0,11	
241	FTIR	0,99974	0,000240	1,26	
242	FTIR	0,99963	0,000130	0,68	
243	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
244	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
245	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
246	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
247	FTIR	0,99990	0,000400	2,11	
248	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
249	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
250	FTIR	0,99930	-0,000200	-1,05	
251	FTIR	0,99970	0,000205	1,08	
253	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
255	FTIR	0,99924	-0,000260	-1,37	
256	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
257	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
258	FTIR	0,99972	0,000220	1,16	
259	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
260	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
261	FTIR	0,99950	0,000000	0,00	
262	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
263	FTIR	0,99800	-0,001500	-7,89	(***)
264	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
265	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
266	FTIR	0,99530	-0,004200	-22,11	(***)
267	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
268	FTIR	0,99921	-0,000290	-1,53	
269	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
270	FTIR	0,99968	0,000180	0,95	
271	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
273	FTIR	1,00000	0,000500	2,63	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

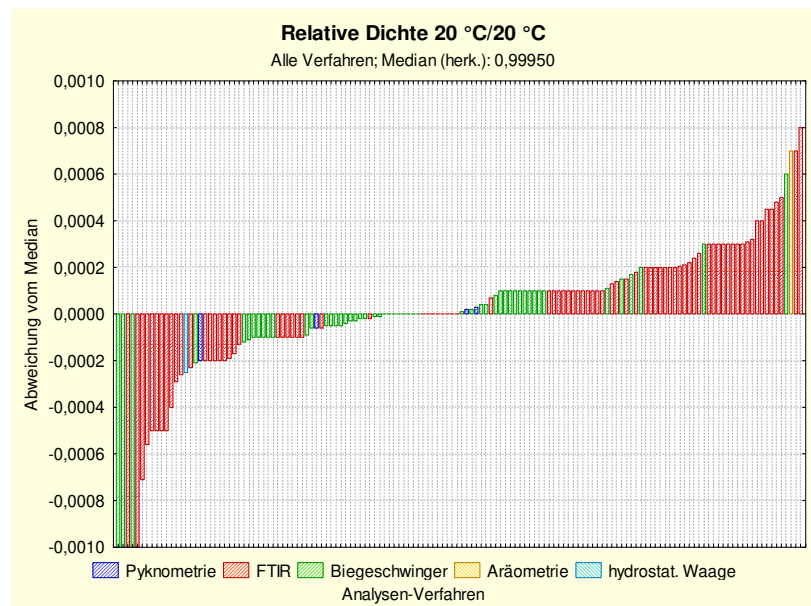
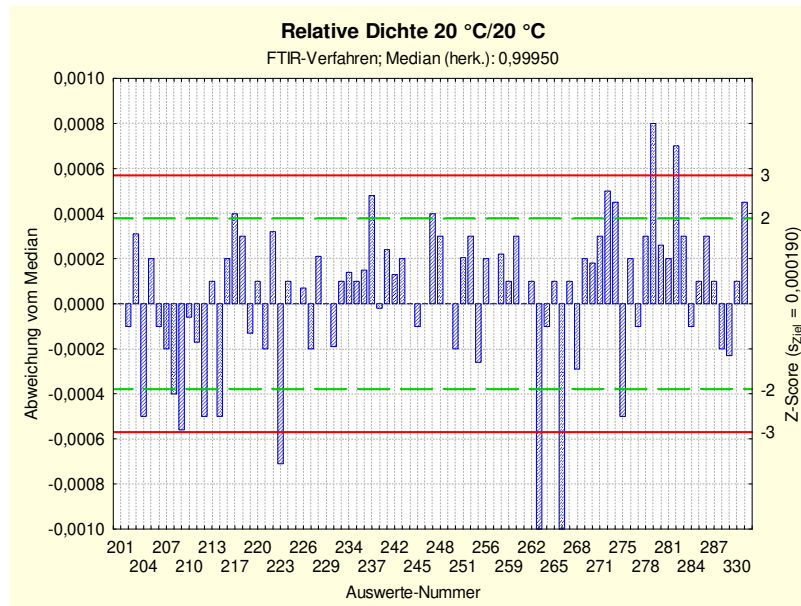
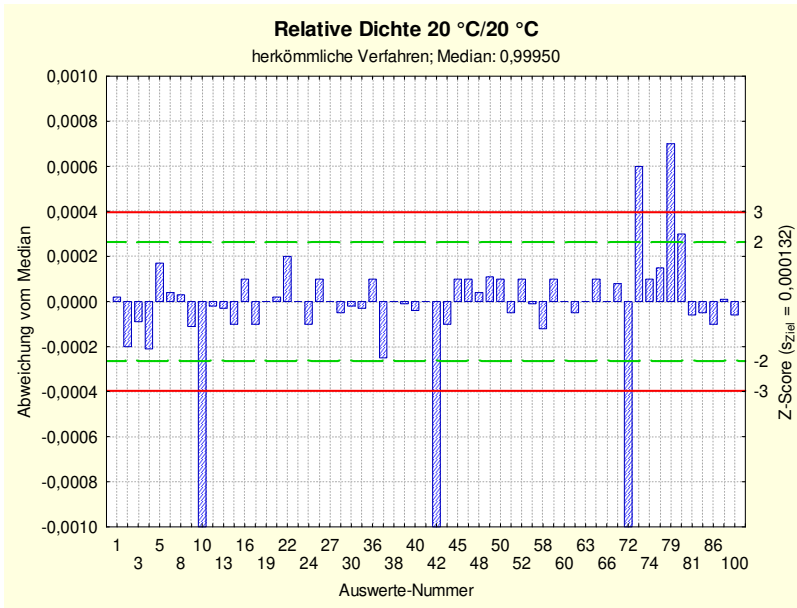
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	0,99995	0,000450	2,37	
275	FTIR	0,99900	-0,000500	-2,63	
276	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
277	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
278	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
279	FTIR	1,00030	0,000800	4,21	
280	FTIR	0,99976	0,000260	1,37	
281	FTIR	0,99970	0,000200	1,05	
282	FTIR	1,00020	0,000700	3,68	
283	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
284	FTIR	0,99940	-0,000100	-0,53	
285	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
286	FTIR	0,99980	0,000300	1,58	
287	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
321	FTIR	0,99930	-0,000200	-1,05	
328	FTIR	0,99927	-0,000230	-1,21	
330	FTIR	0,99960	0,000100	0,53	
337	FTIR	0,99995	0,000450	2,37	

4.1.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	59	55
Minimalwert	0,98412	0,99925
Mittelwert	0,999117	0,999515
Median	0,999500	0,999500
Maximalwert	1,00020	1,00010
Standardabweichung (s_L)	0,002147	0,000130
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000280	0,000017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	16,27	0,98
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	11,30	0,68
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	2,12	0,13
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	1,47	0,09

4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	4	0,99945	0,000113
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00020	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	0,99925	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	53	0,99950	0,000105
	herkömmliche Verfahren	59	0,99950	0,000111
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	0,99956	0,000267



4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

4.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.4	93,68	-1,410	-0,52	-2,64	
02	LwK 2.4	95,70	0,610	0,23	1,14	
03	LwK 2.9	96,71	1,620	0,60	3,03	
04	LwK 2.1	95,50	0,408	0,15	0,76	
05	LwK 2.4	95,09	0,000	0,00	0,00	
06	LwK 2.9	95,50	0,410	0,15	0,77	
08	LwK 2.4	95,77	0,680	0,25	1,27	
09	LwK 2.1	95,40	0,310	0,11	0,58	
10	LwK 2.1	94,60	-0,490	-0,18	-0,92	
11	LwK 2.4	64,24	-30,850	-11,38	-57,66	(**)
13	LwK 2.1	94,50	-0,590	-0,22	-1,10	
15	LwK 2.9	96,41	1,320	0,49	2,47	
16	LwK 2.9	94,80	-0,290	-0,11	-0,54	
18	LwK 2.9	96,80	1,710	0,63	3,20	
19	LwK 2.1	95,75	0,660	0,24	1,23	
21	LwK 2.9	96,00	0,910	0,34	1,70	
22	LwK 2.7	94,99	-0,100	-0,04	-0,19	
23	LwK 2.9	96,00	0,910	0,34	1,70	
24	LwK 2.5	96,40	1,310	0,48	2,45	
26	LwK 2.1	95,20	0,110	0,04	0,21	
27	LwK 2.4	94,90	-0,190	-0,07	-0,36	
28	LwK 2.5	96,30	1,210	0,45	2,26	
30	LwK 2.1	94,75	-0,340	-0,13	-0,64	
35	LwK 2.9	95,30	0,210	0,08	0,39	
37	LwK 2.2	97,70	2,610	0,96	4,88	(***)
38	LwK 2.9	95,90	0,810	0,30	1,51	
39	LwK 2.4	95,30	0,210	0,08	0,39	
40	LwK 2.4	95,20	0,110	0,04	0,21	
41	LwK 2.9	96,00	0,910	0,34	1,70	
42	LwK 2.4	94,50	-0,590	-0,22	-1,10	
44	LwK 2.1	94,90	-0,190	-0,07	-0,36	
45	LwK 2.9	96,60	1,510	0,56	2,82	
46	LwK 2.9	102,00	6,910	2,55	12,92	(***)
48	LwK 2.4	95,31	0,220	0,08	0,41	
49	LwK 2.9	95,65	0,560	0,21	1,05	
50	LwK 2.9	92,50	-2,590	-0,96	-4,84	
51	LwK 2.9	96,06	0,970	0,36	1,81	
52	LwK 2.9	96,60	1,510	0,56	2,82	
54	LwK 2.1	94,73	-0,360	-0,13	-0,67	
55	LwK 2.9	95,20	0,110	0,04	0,21	
58	LwK 2.9	96,31	1,220	0,45	2,28	
59	LwK 2.1	95,40	0,310	0,11	0,58	
60	LwK 2.9	95,80	0,710	0,26	1,33	
62	LwK 2.1	94,33	-0,760	-0,28	-1,42	
63	LwK 2.5	94,98	-0,110	-0,04	-0,21	
64	LwK 2.9	96,60	1,510	0,56	2,82	
66	LwK 2.1	95,80	0,710	0,26	1,33	
68	LwK 2.5	95,13	0,040	0,01	0,07	
70	LwK 2.3	91,00	-4,090	-1,51	-7,64	(***)
72	LwK 2.4	94,71	-0,381	-0,14	-0,71	
73	LwK 2.9	96,00	0,910	0,34	1,70	
74	LwK 2.5	95,74	0,650	0,24	1,21	
78	LwK 2.1	93,70	-1,390	-0,51	-2,60	
79	LwK 2.2	95,80	0,710	0,26	1,33	
80	LwK 2.3	92,00	-3,090	-1,14	-5,78	(***)
81	LwK 2.9	96,28	1,190	0,44	2,22	
82	LwK 2.9	96,06	0,973	0,36	1,82	
91	LwK 2.9	95,26	0,170	0,06	0,32	
96	LwK 2.9	96,30	1,210	0,45	2,26	
99	LwK 2.9	96,01	0,920	0,34	1,72	

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

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

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
100	LwK 2.1	96,75	1,660	0,61	3,10	
101	LwK 2.9	94,97	-0,120	-0,04	-0,22	
103	LwK 2.9	96,10	1,010	0,37	1,89	
104	LwK 2.4	94,95	-0,140	-0,05	-0,26	
109	LwK 2.9	96,80	1,710	0,63	3,20	
111	NMR	93,84	-1,252	-0,46	-2,34	
112	NMR	90,41	-4,682	-1,73	-8,75	(***)
113	NMR	93,17	-1,920	-0,71	-3,59	
114	NMR	94,25	-0,845	-0,31	-1,58	
116	NMR	92,65	-2,437	-0,90	-4,56	
117	NMR	93,90	-1,190	-0,44	-2,22	

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

4.2.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	94,35	-0,740	-0,27	-0,84	
202	LwK 2.8	96,48	1,390	0,51	1,57	
203	LwK 2.8	93,92	-1,170	-0,43	-1,32	
204	LwK 2.8	95,42	0,329	0,12	0,37	
205	LwK 2.8	95,24	0,150	0,06	0,17	
206	LwK 2.8	97,39	2,300	0,85	2,60	
207	LwK 2.8	95,60	0,510	0,19	0,58	
208	LwK 2.8	96,26	1,170	0,43	1,32	
209	LwK 2.8	95,52	0,430	0,16	0,49	
210	LwK 2.8	94,89	-0,200	-0,07	-0,23	
211	LwK 2.8	94,70	-0,390	-0,14	-0,44	
212	LwK 2.8	94,70	-0,390	-0,14	-0,44	
213	LwK 2.8	96,67	1,580	0,58	1,78	
215	LwK 2.8	96,10	1,010	0,37	1,14	
216	LwK 2.8	94,90	-0,190	-0,07	-0,21	
217	LwK 2.8	95,65	0,560	0,21	0,63	
218	LwK 2.8	95,60	0,510	0,19	0,58	
219	LwK 2.8	95,50	0,410	0,15	0,46	
220	LwK 2.8	94,30	-0,790	-0,29	-0,89	
221	LwK 2.8	95,05	-0,040	-0,01	-0,05	
222	LwK 2.8	94,20	-0,890	-0,33	-1,00	
224	LwK 2.8	95,50	0,410	0,15	0,46	
225	LwK 2.8	94,88	-0,210	-0,08	-0,24	
226	LwK 2.8	95,45	0,360	0,13	0,41	
227	LwK 2.8	95,00	-0,090	-0,03	-0,10	
228	LwK 2.8	94,84	-0,250	-0,09	-0,28	
229	LwK 2.8	95,50	0,410	0,15	0,46	
230	LwK 2.8	93,51	-1,580	-0,58	-1,78	
232	LwK 2.8	94,30	-0,790	-0,29	-0,89	
234	LwK 2.8	96,30	1,210	0,45	1,37	
235	LwK 2.8	95,40	0,310	0,11	0,35	
236	LwK 2.8	94,90	-0,190	-0,07	-0,21	
237	LwK 2.8	93,68	-1,410	-0,52	-1,59	
240	LwK 2.8	94,80	-0,290	-0,11	-0,33	
241	LwK 2.8	95,01	-0,080	-0,03	-0,09	
242	LwK 2.8	93,88	-1,210	-0,45	-1,37	
243	LwK 2.8	94,40	-0,690	-0,25	-0,78	
244	LwK 2.8	94,87	-0,220	-0,08	-0,25	
245	LwK 2.8	94,50	-0,590	-0,22	-0,67	
246	LwK 2.8	94,40	-0,690	-0,25	-0,78	
247	LwK 2.8	94,76	-0,330	-0,12	-0,37	
248	LwK 2.8	96,30	1,210	0,45	1,37	
249	LwK 2.8	94,85	-0,240	-0,09	-0,27	
250	LwK 2.8	96,00	0,910	0,34	1,03	
251	LwK 2.8	95,75	0,660	0,24	0,74	
253	LwK 2.8	96,30	1,210	0,45	1,37	
254	LwK 2.8	94,10	-0,990	-0,37	-1,12	

Der rot markierte Wert wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter in die Einheit g/L umgerechnet.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

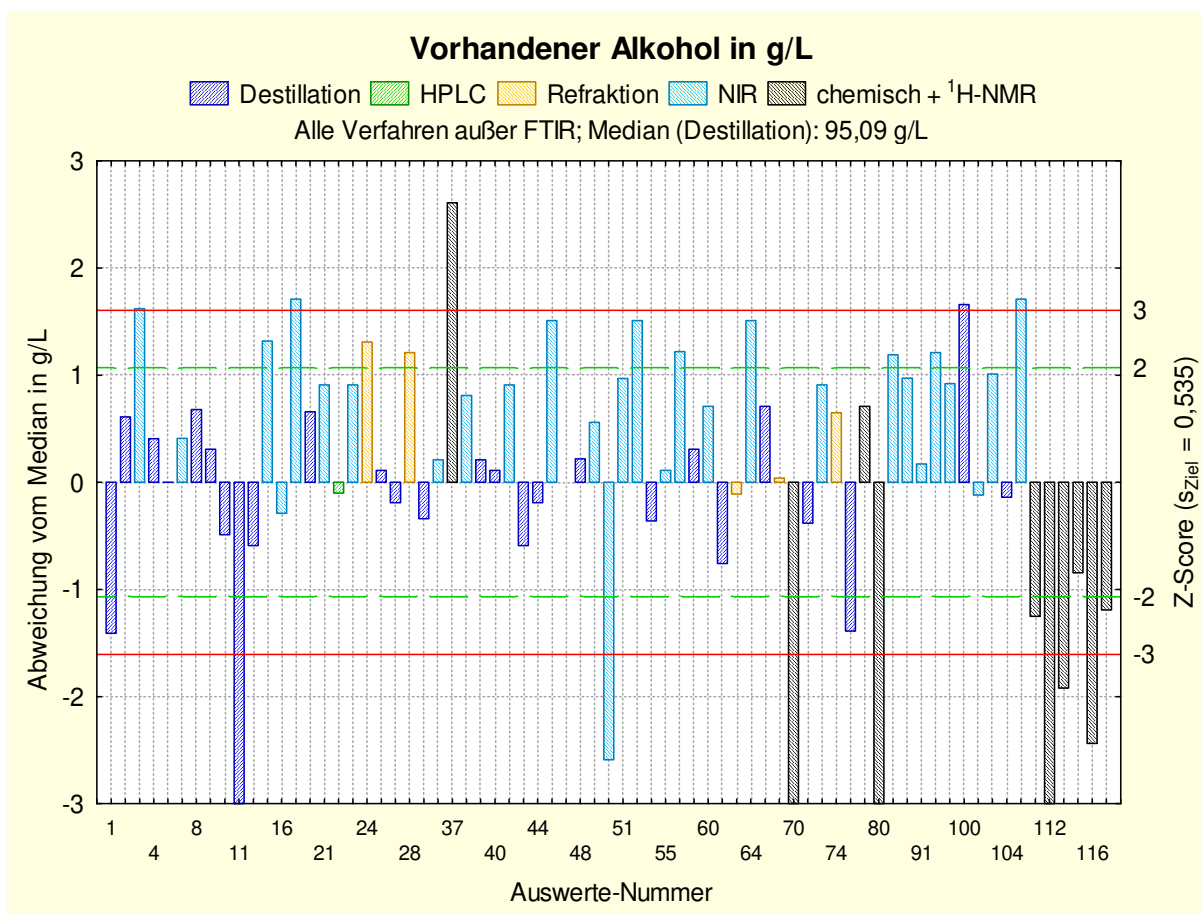
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
255	LwK 2.8	96,50	1,410	0,52	1,59	
256	LwK 2.8	96,80	1,710	0,63	1,93	
257	LwK 2.8	96,10	1,010	0,37	1,14	
258	LwK 2.8	96,79	1,700	0,63	1,92	
259	LwK 2.8	93,80	-1,290	-0,48	-1,46	
260	LwK 2.8	96,60	1,510	0,56	1,70	
261	LwK 2.8	95,30	0,210	0,08	0,24	
262	LwK 2.8	95,25	0,160	0,06	0,18	
263	LwK 2.8	95,50	0,410	0,15	0,46	
264	LwK 2.8	96,61	1,520	0,56	1,72	
265	LwK 2.8	95,40	0,310	0,11	0,35	
266	LwK 2.8	94,39	-0,700	-0,26	-0,79	
267	LwK 2.8	95,71	0,620	0,23	0,70	
268	LwK 2.8	95,09	0,000	0,00	0,00	
269	LwK 2.8	97,65	2,560	0,94	2,89	
270	LwK 2.8	93,90	-1,190	-0,44	-1,34	
271	LwK 2.8	94,89	-0,200	-0,07	-0,23	
273	LwK 2.8	95,70	0,610	0,23	0,69	
274	LwK 2.8	96,06	0,970	0,36	1,09	
275	LwK 2.8	96,08	0,992	0,37	1,12	
276	LwK 2.8	93,40	-1,690	-0,62	-1,91	
277	LwK 2.8	94,71	-0,380	-0,14	-0,43	
278	LwK 2.8	94,20	-0,890	-0,33	-1,00	
279	LwK 2.8	95,39	0,300	0,11	0,34	
280	LwK 2.8	96,80	1,710	0,63	1,93	
281	LwK 2.8	94,98	-0,110	-0,04	-0,12	
282	LwK 2.8	95,19	0,104	0,04	0,12	
283	LwK 2.8	92,17	-2,920	-1,08	-3,30	
284	LwK 2.8	93,27	-1,820	-0,67	-2,05	
285	LwK 2.8	95,70	0,610	0,23	0,69	
286	LwK 2.8	96,30	1,210	0,45	1,37	
287	LwK 2.8	95,60	0,510	0,19	0,58	
312	LwK 2.8	94,80	-0,290	-0,11	-0,33	
321	LwK 2.8	95,90	0,810	0,30	0,91	
328	LwK 2.8	94,22	-0,870	-0,32	-0,98	
330	LwK 2.8	94,30	-0,790	-0,29	-0,89	
337	LwK 2.8	93,46	-1,630	-0,60	-1,84	

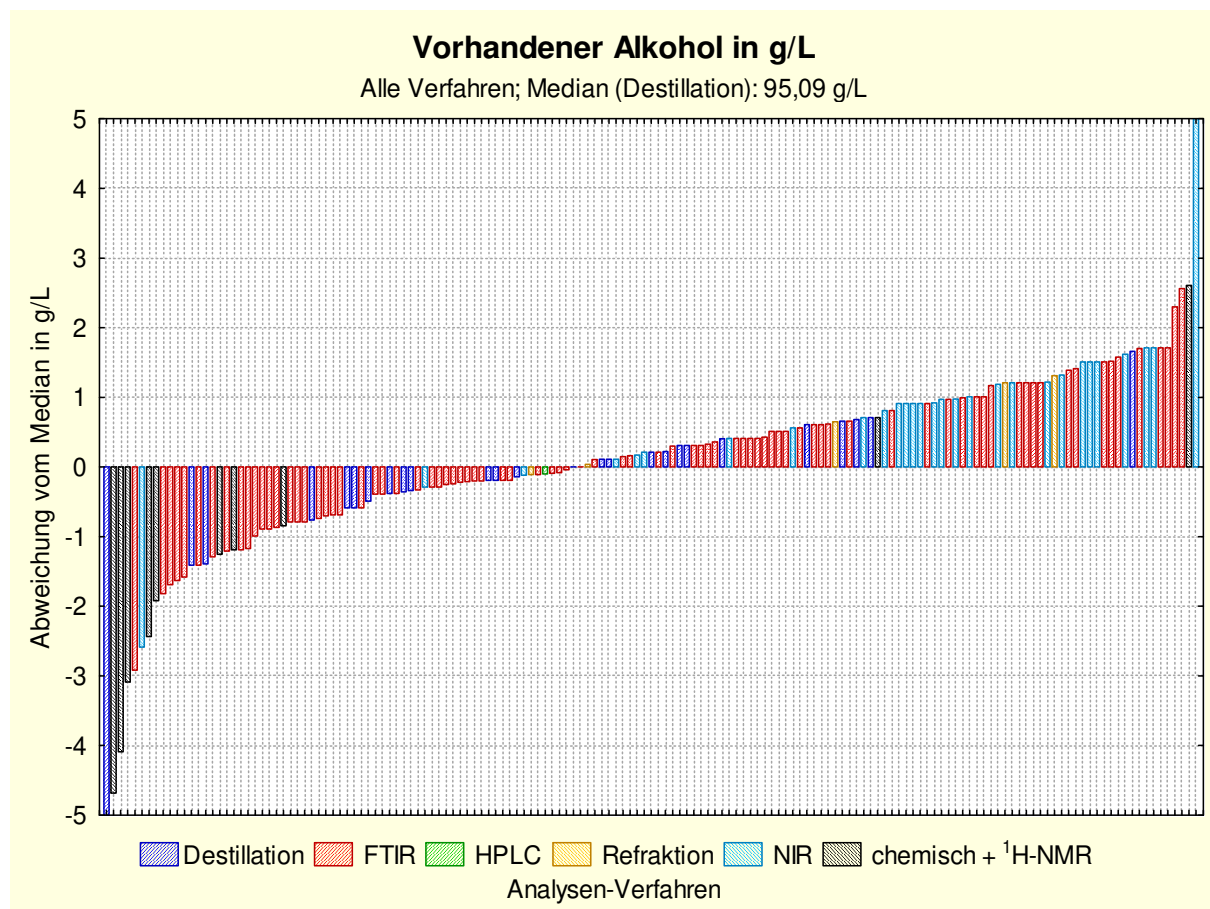
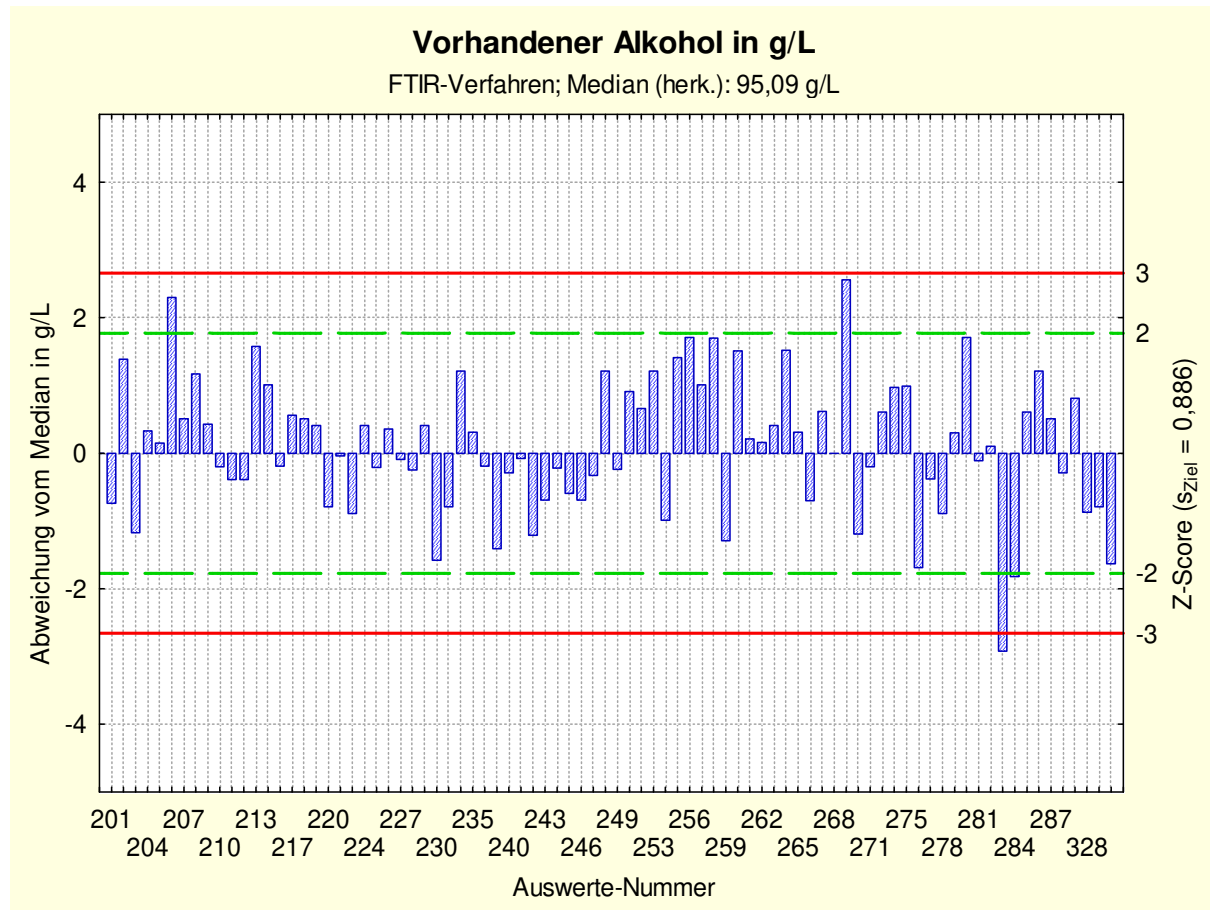
4.2.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	25
Minimalwert	64,24	93,68
Mittelwert	93,871	95,057
Median	95,020	95,090
Maximalwert	96,75	96,75
Standardabweichung (s_L)	6,080	0,674
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,192	0,135
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,708	2,710
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,886	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,24	0,25
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	11,36	1,26
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	6,86	0,76
Quotient (u_M/s_H)	0,44	0,05
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	2,23	0,25
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	1,35	0,15

4.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	14	95,072	0,700
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	12	94,938	0,653
	Destillationsverfahren	26	95,015	0,650
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	96,750	1,524
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	2	91,500	0,802
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	5	95,710	0,738
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, z.B. n. Heidger	1	94,990	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	95,201	1,017
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	29	96,013	0,648
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	93,210	1,171





4.3 Gesamtextrakt [g/L]

4.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.3	38,3	-1,70	-1,31	-2,86	
02	LwK 3.3	39,5	-0,50	-0,39	-0,84	
03	LwK 3.3	40,3	0,30	0,23	0,51	
04	LwK 3.3	39,3	-0,70	-0,54	-1,18	
05	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
06	LwK 3.3	40,0	0,04	0,03	0,07	
08	LwK 3.1	40,1	0,10	0,08	0,17	
09	LwK 3.3	39,8	-0,20	-0,15	-0,34	
10	LwK 3.3	39,5	-0,50	-0,39	-0,84	
11	LwK 3.1	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
13	LwK 3.3	39,5	-0,50	-0,39	-0,84	
15	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
16	LwK 3.3	40,0	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 3.3	40,1	0,10	0,08	0,17	
19	LwK 3.3	40,0	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
22	LwK 3.3	40,1	0,10	0,08	0,17	
23	LwK 3.3	40,0	0,00	0,00	0,00	
24	LwK 3.3	40,0	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 3.3	40,1	0,10	0,08	0,17	
27	LwK 3.3	39,7	-0,30	-0,23	-0,51	
28	LwK 3.3	40,3	0,30	0,23	0,51	
30	LwK 3.2	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
37	LwK 3.3	40,3	0,30	0,23	0,51	
38	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
39	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
40	LwK 3.3	39,7	-0,30	-0,23	-0,51	
41	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
42	LwK 3.3	39,5	-0,50	-0,39	-0,84	
44	LwK 3.3	39,2	-0,80	-0,62	-1,35	
45	LwK 3.3	40,5	0,50	0,39	0,84	
46	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
49	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
51	LwK 3.3	40,0	0,00	0,00	0,00	
52	LwK 3.3	39,9	-0,10	-0,08	-0,17	
54	LwK 3.2	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
55	LwK 3.3	39,8	-0,20	-0,15	-0,34	
58	LwK 3.3	39,9	-0,10	-0,08	-0,17	
59	LwK 3.2	40,1	0,10	0,08	0,17	
60	LwK 3.3	46,2	6,20	4,77	10,44	(**)
62	LwK 3.2	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
63	FTIR (gemessen)	39,8	-0,20	-0,15	-0,34	
66	LwK 3.2	39,8	-0,20	-0,15	-0,34	
73	LwK 3.3	41,4	1,40	1,08	2,36	
74	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
78	LwK 3.2	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
79	LwK 3.3	41,8	1,80	1,39	3,03	
80	LwK 3.3	39,3	-0,70	-0,54	-1,18	
81	LwK 3.3	40,3	0,30	0,23	0,51	
82	LwK 3.3	40,2	0,20	0,15	0,34	
91	LwK 3.3	39,9	-0,10	-0,08	-0,17	
109	LwK 3.3	41,2	1,20	0,92	2,02	

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

4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	39,6	-0,36	-0,28	-0,61	
202	FTIR (gemessen)	40,2	0,21	0,16	0,35	
203	FTIR (gemessen)	40,6	0,56	0,43	0,94	
205	FTIR (gemessen)	40,7	0,74	0,57	1,25	
208	FTIR (gemessen)	39,3	-0,70	-0,54	-1,18	
209	FTIR-Basis	38,5	-1,50	-1,16	-2,53	
210	k. A.	39,4	-0,56	-0,43	-0,94	
211	FTIR (gemessen)	40,1	0,09	0,07	0,15	
217	FTIR (gemessen)	41,0	1,03	0,79	1,73	
218	FTIR (gemessen)	40,4	0,40	0,31	0,67	
219	FTIR (gemessen)	40,3	0,30	0,23	0,51	
220	FTIR (gemessen)	40,7	0,70	0,54	1,18	
221	FTIR (gemessen)	39,5	-0,50	-0,39	-0,84	
222	FTIR (gemessen)	39,4	-0,60	-0,46	-1,01	
224	FTIR (gemessen)	40,4	0,40	0,31	0,67	
227	FTIR (gemessen)	41,1	1,10	0,85	1,85	
228	FTIR (gemessen)	40,5	0,50	0,39	0,84	
232	k. A.	40,1	0,12	0,09	0,20	
236	LwK 3.3 (herk.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
237	FTIR (gemessen)	41,0	1,01	0,78	1,70	
250	FTIR (gemessen)	40,8	0,80	0,62	1,35	
251	FTIR (gemessen)	40,8	0,81	0,62	1,36	
253	FTIR (gemessen)	40,8	0,80	0,62	1,35	
257	herk./FTIR	40,2	0,20	0,15	0,34	
258	FTIR-Basis	41,0	0,99	0,76	1,67	
259	FTIR-Basis	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
261	FTIR (gemessen)	40,8	0,80	0,62	1,35	
262	k. A.	40,3	0,30	0,23	0,51	
263	FTIR (gemessen)	40,9	0,90	0,69	1,52	
266	FTIR (gemessen)	40,3	0,29	0,22	0,49	
267	FTIR (gemessen)	40,0	-0,05	-0,04	-0,08	
269	k. A.	41,9	1,86	1,43	3,13	
270	k. A.	39,9	-0,10	-0,08	-0,17	
271	k. A.	40,0	0,00	0,00	0,00	
273	FTIR (gemessen)	41,5	1,50	1,16	2,53	
276	FTIR (gemessen)	39,6	-0,40	-0,31	-0,67	
277	FTIR (gemessen)	38,8	-1,20	-0,92	-2,02	
278	FTIR (gemessen)	41,1	1,10	0,85	1,85	
279	FTIR (gemessen)	41,8	1,80	1,39	3,03	
280	FTIR (gemessen)	38,9	-1,10	-0,85	-1,85	
281	FTIR (gemessen)	42,7	2,70	2,08	4,55	
282	FTIR-Basis	41,8	1,80	1,39	3,03	
283	FTIR (gemessen)	39,4	-0,61	-0,47	-1,03	
284	FTIR-Basis	39,4	-0,63	-0,49	-1,06	
285	k. A.	39,4	-0,60	-0,46	-1,01	
286	FTIR (gemessen)	40,5	0,52	0,40	0,88	
321	FTIR (gemessen)	41,1	1,10	0,85	1,85	
328	FTIR (gemessen)	40,6	0,64	0,49	1,08	
337	FTIR (gemessen)	40,0	0,01	0,01	0,02	

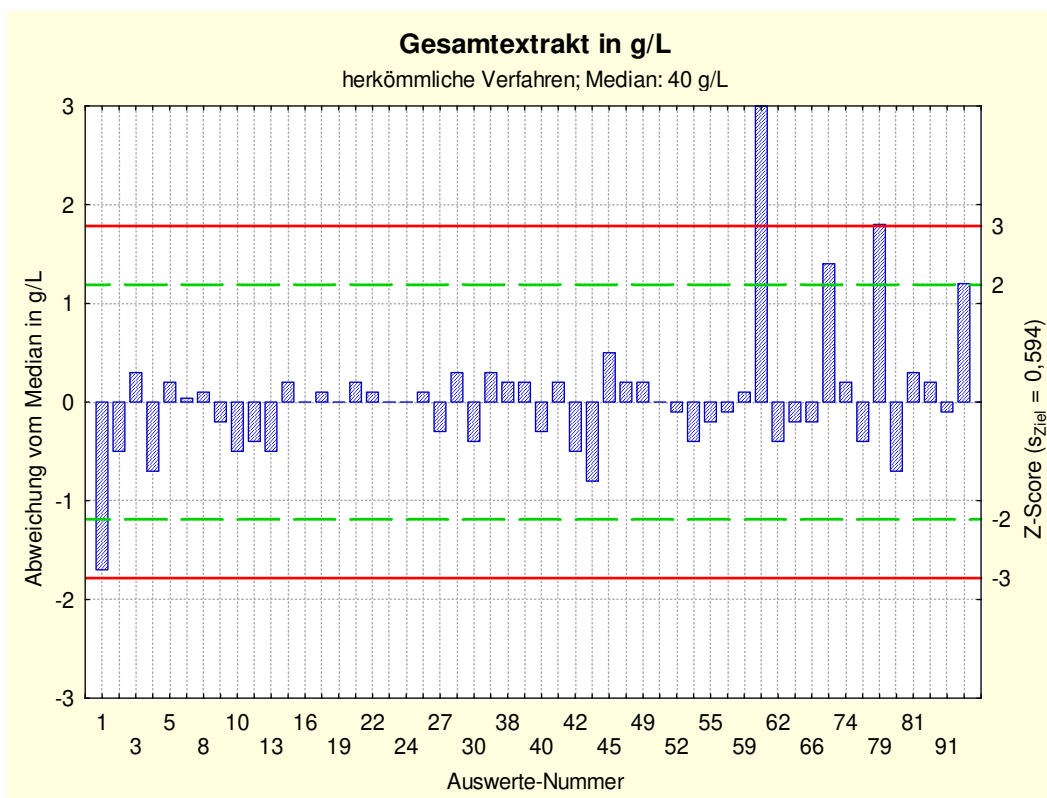
4.3.3 Deskriptive Ergebnisse

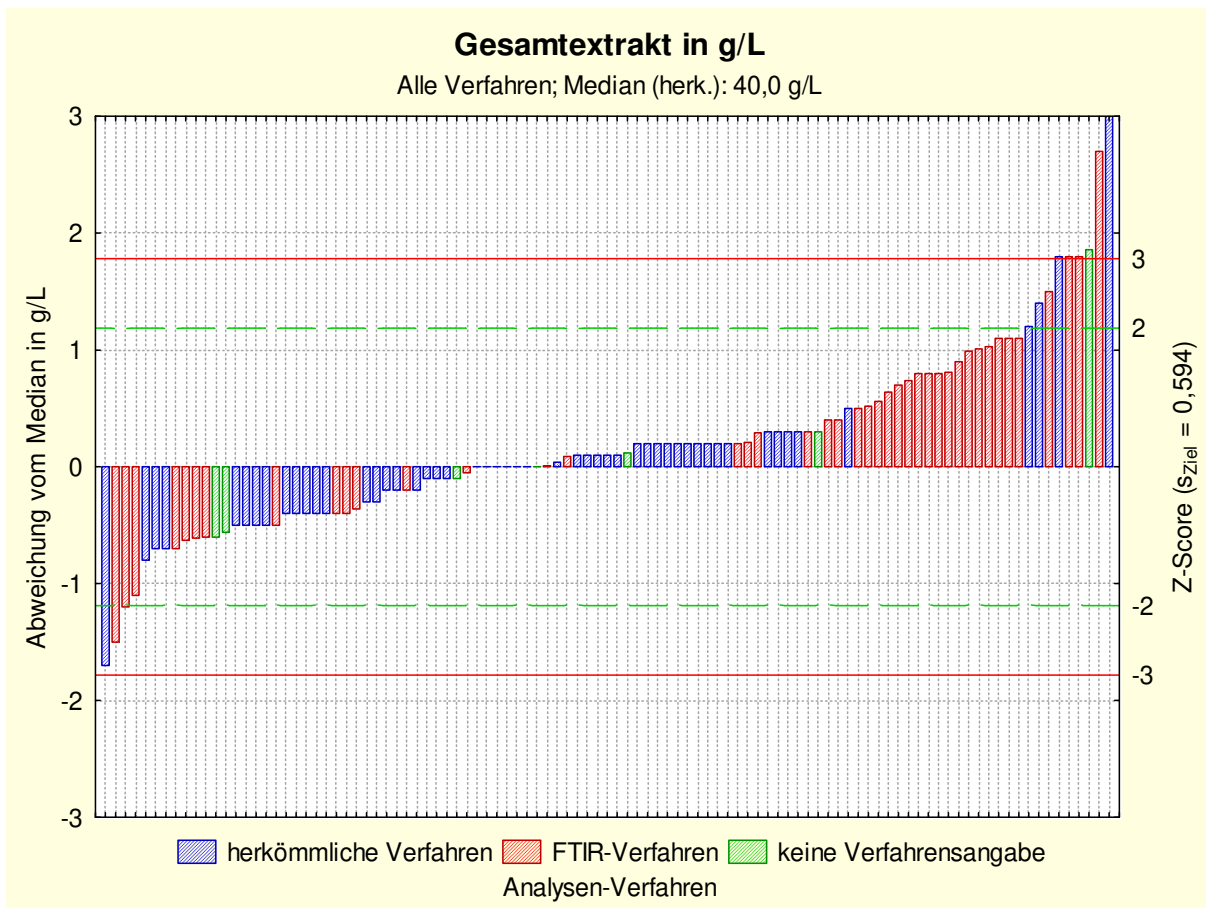
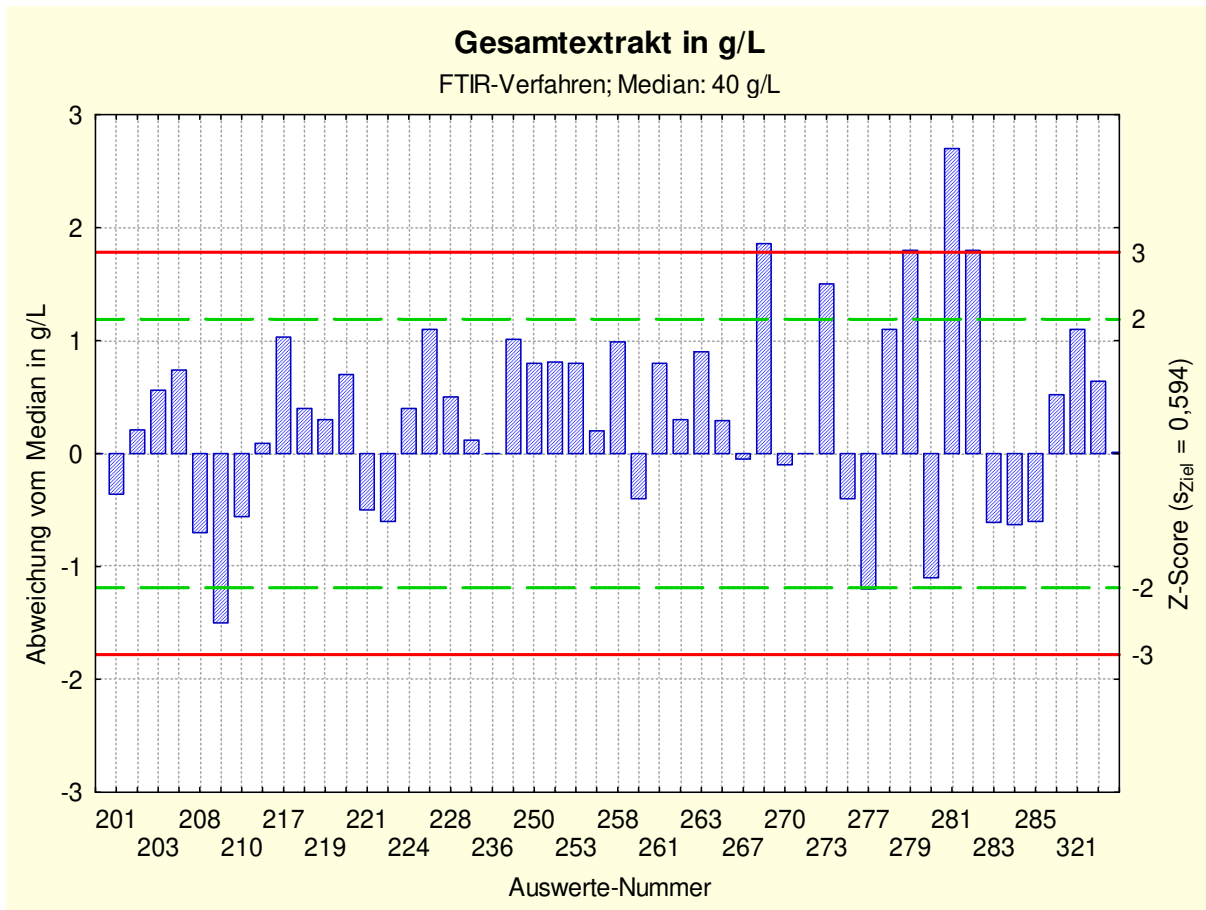
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	51	50
Minimalwert	38,3	38,3
Mittelwert	40,11	39,98
Median	40,00	40,00
Maximalwert	46,2	41,8
Standardabweichung (s_L)	1,022	0,541
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,143	0,076
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,299	1,299
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,565)	(0,565)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,79	0,42
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,72	0,91
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(1,81)	(0,96)
Quotient (u_M/s_H)	0,11	0,06
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,24	0,13
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,26)	(0,13)

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

4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	39,850	0,401
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	6	39,689	0,165
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest.	43	40,022	0,379
	herkömmliche Verfahren	51	39,976	0,375
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	36	40,406	0,761
herk./FTIR	Berechnung nach Tabarie (Basis: Dichte n. LwK 8.1 bis 8.4; FTIR-Alkohol)	1	40,200	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie (Basis: FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol)	5	40,052	1,502
k. A.	keine Verfahrensangabe	7	40,003	0,572





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	13,81	0,430	0,84	1,06	
02	LwK 4.5	12,90	-0,480	-0,94	-1,19	
05	LwK 4.5	13,10	-0,280	-0,55	-0,69	
06	LwK 4.5	13,15	-0,230	-0,45	-0,57	
08	LwK 4.5	13,18	-0,200	-0,39	-0,49	
09	LwK 4.5	12,60	-0,780	-1,52	-1,93	
10	LwK 4.1	14,40	1,020	1,99	2,52	
11	LwK 4.7	13,05	-0,330	-0,64	-0,82	
13	LwK 4.5	13,50	0,120	0,23	0,30	
15	LwK 4.5	13,20	-0,180	-0,35	-0,45	
16	LwK 4.5	13,40	0,020	0,04	0,05	
19	LwK 4.5	13,36	-0,020	-0,04	-0,05	
21	LwK 4.7	13,48	0,100	0,20	0,25	
22	LwK 4.7	13,28	-0,100	-0,20	-0,25	
23	LwK 4.7	12,90	-0,480	-0,94	-1,19	
24	LwK 4.4	14,80	1,420	2,77	3,51	
26	LwK 4.5	13,40	0,020	0,04	0,05	
27	LwK 4.7	13,00	-0,380	-0,74	-0,94	
28	LwK 4.4	14,15	0,770	1,50	1,91	
30	LwK 4.5	13,63	0,250	0,49	0,62	
35	LwK 4.5	13,30	-0,080	-0,16	-0,20	
37	LwK 4.3	13,70	0,320	0,62	0,79	
38	LwK 4.5	14,17	0,790	1,54	1,95	
39	LwK 4.7	13,20	-0,180	-0,35	-0,45	
40	LwK 4.5	13,80	0,420	0,82	1,04	
41	LwK 4.5	13,26	-0,120	-0,23	-0,30	
42	LwK 4.5	13,51	0,125	0,24	0,31	
44	LwK 4.5	13,20	-0,180	-0,35	-0,45	
45	LwK 4.5	13,80	0,420	0,82	1,04	
46	LwK 4.5	13,20	-0,180	-0,35	-0,45	
48	LwK 4.4	15,20	1,820	3,55	4,50	
49	LwK 4.5	13,85	0,470	0,92	1,16	
51	LwK 4.5	13,56	0,180	0,35	0,45	
52	LwK 4.5	13,60	0,220	0,43	0,54	
54	LwK 4.5	13,40	0,020	0,04	0,05	
55	LwK 4.5	13,35	-0,030	-0,06	-0,07	
58	LwK 4.7	14,63	1,250	2,44	3,09	
59	LwK 4.4	14,90	1,520	2,97	3,76	
60	LwK 4.7	13,00	-0,380	-0,74	-0,94	
62	LwK 4.5	13,49	0,110	0,21	0,27	
63	LwK 4.4	14,50	1,120	2,19	2,77	
66	LwK 4.4	15,10	1,720	3,36	4,26	
68	LwK 4.5	13,48	0,100	0,20	0,25	
72	LwK 4.4	16,60	3,220	6,29	7,97	(***)
73	LwK 4.4	16,50	3,120	6,09	7,72	(***)
74	LwK 4.5	13,42	0,040	0,08	0,10	
78	LwK 4.5	12,67	-0,710	-1,39	-1,76	
79	LwK 4.3	14,00	0,620	1,21	1,53	
80	LwK 4.4	15,30	1,920	3,75	4,75	
99	LwK 4.7	13,68	0,301	0,59	0,74	
109	LwK 4.4	15,20	1,820	3,55	4,50	
111	NMR	12,75	-0,631	-1,23	-1,56	
112	NMR	13,59	0,213	0,42	0,53	
113	NMR	12,73	-0,650	-1,27	-1,61	
114	NMR	13,01	-0,373	-0,73	-0,92	
115	NMR	13,10	-0,280	-0,55	-0,69	
116	NMR	13,15	-0,233	-0,46	-0,58	

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

4.4.2 FTIR-Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	13,52	0,140	0,27	0,24	
202	LwK 4.8	13,07	-0,310	-0,61	-0,53	
203	LwK 4.8	13,58	0,200	0,39	0,34	
204	LwK 4.8	13,06	-0,320	-0,62	-0,55	
205	LwK 4.8	13,18	-0,200	-0,39	-0,34	
206	LwK 4.8	13,49	0,110	0,21	0,19	
207	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
208	LwK 4.8	13,44	0,060	0,12	0,10	
209	LwK 4.8	13,30	-0,080	-0,16	-0,14	
210	LwK 4.8	12,47	-0,910	-1,78	-1,56	
211	LwK 4.8	12,90	-0,480	-0,94	-0,82	
212	LwK 4.8	14,14	0,760	1,48	1,30	
213	LwK 4.8	14,27	0,890	1,74	1,52	
215	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
216	LwK 4.8	13,38	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 4.8	13,09	-0,290	-0,57	-0,50	
218	LwK 4.8	14,20	0,820	1,60	1,40	
219	LwK 4.8	13,06	-0,320	-0,62	-0,55	
220	LwK 4.8	15,40	2,020	3,94	3,46	
221	LwK 4.8	13,17	-0,210	-0,41	-0,36	
223	LwK 4.8	12,90	-0,480	-0,94	-0,82	
224	LwK 4.8	14,20	0,820	1,60	1,40	
225	LwK 4.8	14,83	1,450	2,83	2,48	
226	LwK 4.8	13,53	0,150	0,29	0,26	
227	LwK 4.8	14,10	0,720	1,41	1,23	
228	LwK 4.8	14,98	1,600	3,12	2,74	
229	LwK 4.8	14,44	1,060	2,07	1,82	
230	LwK 4.8	13,80	0,420	0,82	0,72	
232	LwK 4.8	12,67	-0,710	-1,39	-1,22	
234	LwK 4.8	14,94	1,560	3,05	2,67	
235	LwK 4.8	14,20	0,820	1,60	1,40	
236	LwK 4.8	14,10	0,720	1,41	1,23	
237	LwK 4.8	14,94	1,560	3,05	2,67	
240	LwK 4.8	12,84	-0,540	-1,05	-0,92	
241	LwK 4.8	13,63	0,250	0,49	0,43	
242	LwK 4.8	13,25	-0,130	-0,25	-0,22	
243	LwK 4.8	13,50	0,120	0,23	0,21	
244	LwK 4.8	14,22	0,840	1,64	1,44	
245	LwK 4.8	14,29	0,910	1,78	1,56	
246	LwK 4.8	13,50	0,120	0,23	0,21	
247	LwK 4.8	14,26	0,880	1,72	1,51	
248	LwK 4.8	14,90	1,520	2,97	2,60	
249	LwK 4.8	14,44	1,060	2,07	1,82	
250	LwK 4.8	12,50	-0,880	-1,72	-1,51	
251	LwK 4.8	14,20	0,820	1,60	1,40	
253	LwK 4.8	15,50	2,120	4,14	3,63	
254	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
255	LwK 4.8	13,40	0,020	0,04	0,03	
256	LwK 4.8	14,37	0,990	1,93	1,70	
257	LwK 4.8	13,90	0,520	1,02	0,89	
258	LwK 4.8	15,10	1,720	3,36	2,95	
259	LwK 4.8	14,80	1,420	2,77	2,43	
260	LwK 4.8	14,60	1,220	2,38	2,09	
261	LwK 4.8	12,96	-0,420	-0,82	-0,72	
262	LwK 4.8	12,80	-0,580	-1,13	-0,99	
263	LwK 4.8	16,00	2,620	5,11	4,49	
264	LwK 4.8	13,59	0,210	0,41	0,36	
265	LwK 4.8	13,95	0,570	1,11	0,98	
266	LwK 4.8	13,38	0,000	0,00	0,00	
267	LwK 4.8	13,86	0,480	0,94	0,82	
268	LwK 4.8	16,10	2,720	5,31	4,66	
269	LwK 4.8	13,46	0,080	0,16	0,14	
270	LwK 4.8	15,40	2,020	3,94	3,46	
271	LwK 4.8	14,46	1,080	2,11	1,85	
273	LwK 4.8	15,41	2,030	3,96	3,48	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	14,08	0,700	1,37	1,20	
275	LwK 4.8	12,78	-0,600	-1,17	-1,03	
276	LwK 4.8	14,50	1,120	2,19	1,92	
277	LwK 4.8	13,23	-0,150	-0,29	-0,26	
278	LwK 4.8	13,70	0,320	0,62	0,55	
279	LwK 4.8	14,20	0,820	1,60	1,40	
280	LwK 4.8	14,12	0,740	1,44	1,27	
281	LwK 4.8	13,99	0,610	1,19	1,04	
283	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
284	LwK 4.8	13,91	0,530	1,03	0,91	
285	LwK 4.8	13,80	0,420	0,82	0,72	
286	LwK 4.8	14,59	1,210	2,36	2,07	
287	LwK 4.8	14,40	1,020	1,99	1,75	
321	LwK 4.8	13,77	0,390	0,76	0,67	
328	LwK 4.8	13,54	0,160	0,31	0,27	
330	LwK 4.8	14,50	1,120	2,19	1,92	
337	LwK 4.8	13,94	0,560	1,09	0,96	

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

4.4.3 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)

Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung
Die Werte dieser Tabelle wurden vom Auswerter aus den FTIR-Werten für Glucose und Fructose berechnet.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	13,52	0,140	0,27	0,24	
202	LwK 4.8	13,08	-0,300	-0,59	-0,51	
203	LwK 4.8	13,58	0,200	0,39	0,34	
204	LwK 4.8	13,06	-0,320	-0,62	-0,55	
205	LwK 4.8	13,18	-0,200	-0,39	-0,34	
207	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
208	LwK 4.8	13,44	0,060	0,12	0,10	
209	LwK 4.8	13,20	-0,180	-0,35	-0,31	
210	LwK 4.8	12,47	-0,910	-1,78	-1,56	
211	LwK 4.8	12,90	-0,480	-0,94	-0,82	
212	LwK 4.8	13,57	0,190	0,37	0,33	
213	LwK 4.8	13,68	0,300	0,59	0,51	
215	LwK 4.8	13,00	-0,380	-0,74	-0,65	
216	LwK 4.8	13,38	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 4.8	12,73	-0,650	-1,27	-1,11	
218	LwK 4.8	13,02	-0,360	-0,70	-0,62	
219	LwK 4.8	12,86	-0,520	-1,02	-0,89	
220	LwK 4.8	15,40	2,020	3,94	3,46	
221	LwK 4.8	13,17	-0,210	-0,41	-0,36	
222	LwK 4.8	14,65	1,270	2,48	2,17	
223	LwK 4.8	12,90	-0,480	-0,94	-0,82	
224	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
225	LwK 4.8	13,49	0,110	0,21	0,19	
226	LwK 4.8	13,53	0,150	0,29	0,26	
227	LwK 4.8	14,40	1,020	1,99	1,75	
228	LwK 4.8	13,72	0,340	0,66	0,58	
229	LwK 4.8	13,55	0,170	0,33	0,29	
230	LwK 4.8	13,22	-0,160	-0,31	-0,27	
232	LwK 4.8	12,67	-0,710	-1,39	-1,22	
234	LwK 4.8	14,02	0,640	1,25	1,10	
235	LwK 4.8	11,20	-2,180	-4,26	-3,73	
236	LwK 4.8	13,30	-0,080	-0,16	-0,14	
237	LwK 4.8	14,81	1,430	2,79	2,45	
240	LwK 4.8	12,84	-0,540	-1,05	-0,92	
241	LwK 4.8	13,51	0,130	0,25	0,22	
242	LwK 4.8	13,24	-0,140	-0,27	-0,24	
243	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
244	LwK 4.8	15,39	2,010	3,92	3,44	
245	LwK 4.8	12,57	-0,810	-1,58	-1,39	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker (S)

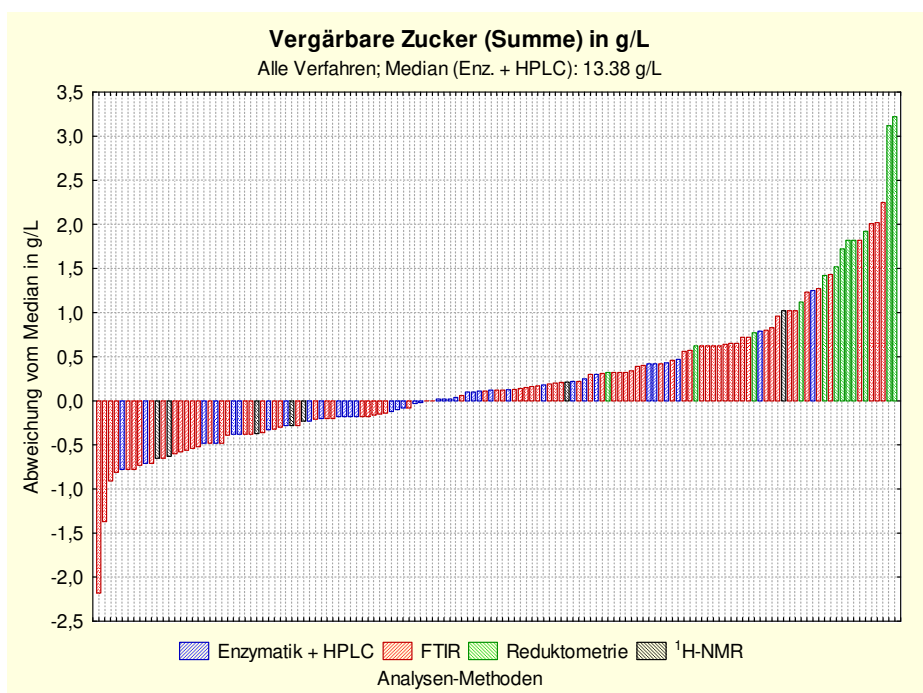
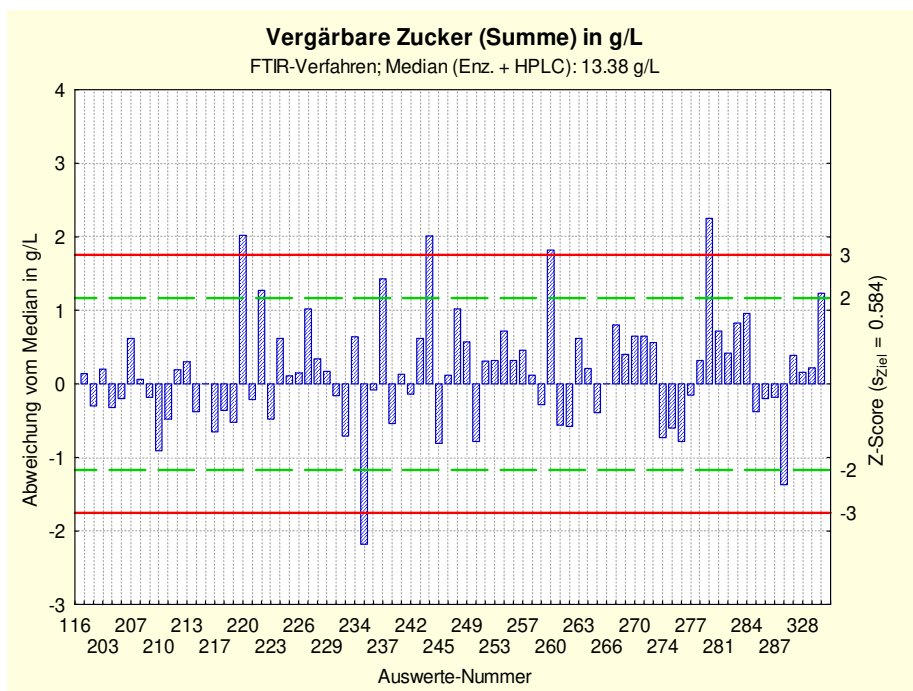
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
246	LwK 4.8	13,50	0,120	0,23	0,21	
248	LwK 4.8	14,40	1,020	1,99	1,75	
249	LwK 4.8	13,95	0,570	1,11	0,98	
250	LwK 4.8	12,60	-0,780	-1,52	-1,34	
251	LwK 4.8	13,69	0,310	0,61	0,53	
253	LwK 4.8	13,70	0,320	0,62	0,55	
255	LwK 4.8	14,10	0,720	1,41	1,23	
256	LwK 4.8	13,70	0,320	0,62	0,55	
257	LwK 4.8	13,84	0,460	0,90	0,79	
258	LwK 4.8	13,50	0,120	0,23	0,21	
259	LwK 4.8	13,10	-0,280	-0,55	-0,48	
260	LwK 4.8	15,20	1,820	3,55	3,12	
261	LwK 4.8	12,82	-0,560	-1,09	-0,96	
262	LwK 4.8	12,80	-0,580	-1,13	-0,99	
263	LwK 4.8	14,00	0,620	1,21	1,06	
264	LwK 4.8	13,59	0,210	0,41	0,36	
265	LwK 4.8	12,99	-0,390	-0,76	-0,67	
266	LwK 4.8	13,38	0,000	0,00	0,00	
267	LwK 4.8	14,18	0,800	1,56	1,37	
269	LwK 4.8	13,78	0,400	0,78	0,68	
270	LwK 4.8	14,03	0,650	1,27	1,11	
271	LwK 4.8	14,03	0,650	1,27	1,11	
273	LwK 4.8	13,94	0,560	1,09	0,96	
274	LwK 4.8	12,65	-0,730	-1,43	-1,25	
275	LwK 4.8	12,78	-0,600	-1,17	-1,03	
276	LwK 4.8	12,60	-0,780	-1,52	-1,34	
277	LwK 4.8	13,23	-0,150	-0,29	-0,26	
278	LwK 4.8	13,70	0,320	0,62	0,55	
280	LwK 4.8	15,63	2,250	4,39	3,85	
281	LwK 4.8	14,10	0,720	1,41	1,23	
282	LwK 4.8	13,80	0,420	0,82	0,72	
283	LwK 4.8	14,21	0,830	1,62	1,42	
284	LwK 4.8	14,34	0,960	1,87	1,64	
285	LwK 4.8	13,00	-0,380	-0,74	-0,65	
286	LwK 4.8	13,18	-0,200	-0,39	-0,34	
287	LwK 4.8	13,20	-0,180	-0,35	-0,31	
312	LwK 4.8	12,01	-1,370	-2,67	-2,35	
321	LwK 4.8	13,77	0,390	0,76	0,67	
328	LwK 4.8	13,54	0,160	0,31	0,27	
330	LwK 4.8	13,60	0,220	0,43	0,38	
337	LwK 4.8	14,61	1,230	2,40	2,11	

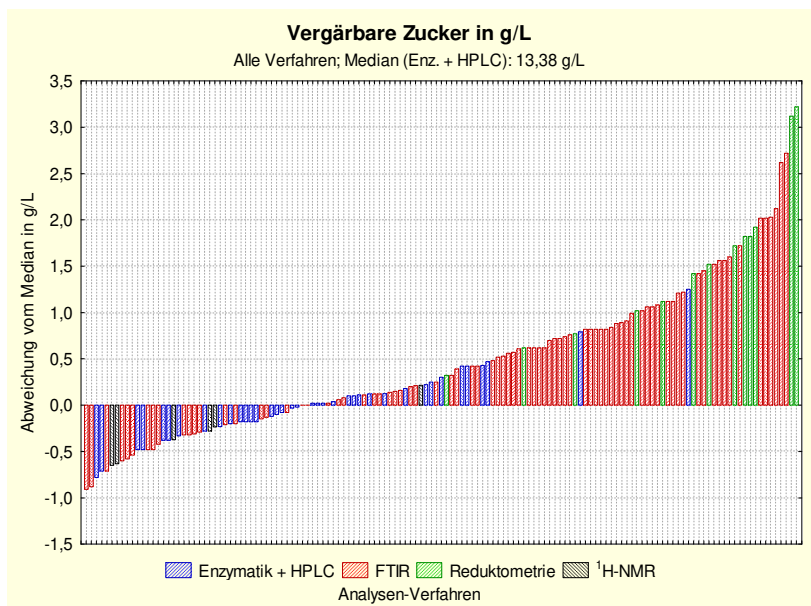
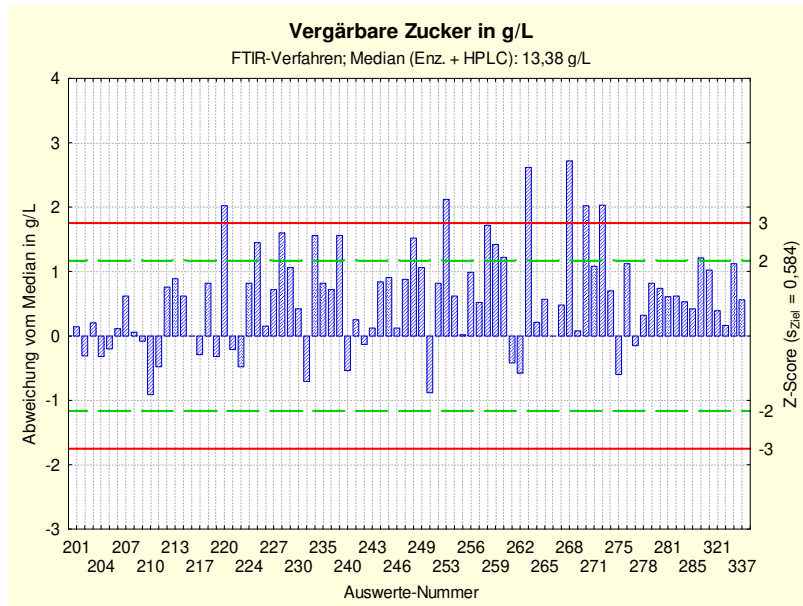
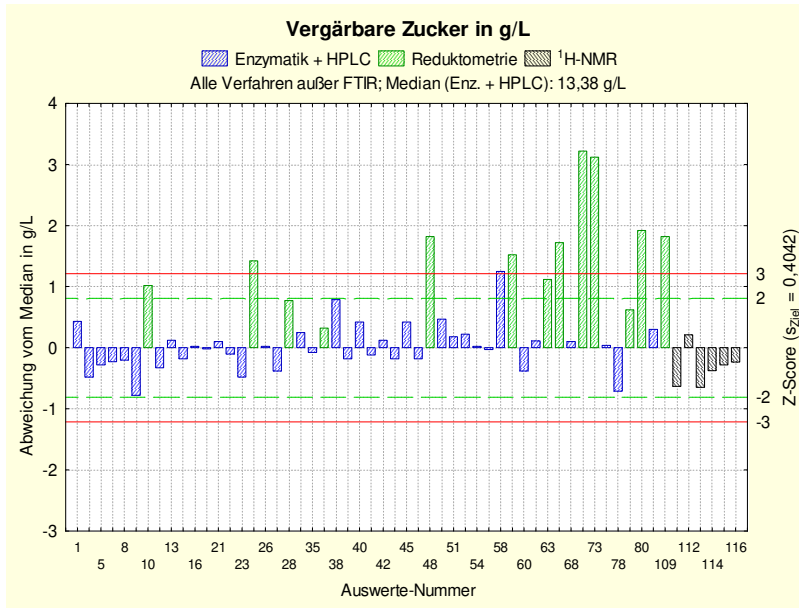
4.4.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L] nur enzymatische und HPLC-Verfahren	alle Daten
Gültige Werte	38
Minimalwert	12,60
Mittelwert	13,382
Median	13,380
Maximalwert	14,63
Standardabweichung (s_L)	0,387
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,063
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,512
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,404
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,584
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,76
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,96
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,66
Quotient (u_M/s_H)	0,12
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,16
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,11

4.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	14,400	14,400
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	13,850	13,850
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	10	15,215	15,150
	reduktometrische Verfahren	13	14,894	0,850
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	29	13,401	13,400
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	13,262	13,200
	enzymatische und HPLC-Verfahren	38	13,365	0,335
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt)	82	13,919	13,970
	Basis: Vergärbare Zucker (FTIR Summe)	80	13,508	0,656
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	13,054	13,053





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	6,97	0,279	0,98	1,25	
02	enzymat., autom.	6,49	-0,201	-0,71	-0,90	
03	enzymat., autom.	6,52	-0,171	-0,60	-0,76	
04	enzymat., autom.	6,87	0,179	0,63	0,80	
05	enzymat., autom.	6,60	-0,091	-0,32	-0,41	
08	enzymat. Hand	6,66	-0,031	-0,11	-0,14	
09	enzymat., autom.	6,47	-0,221	-0,78	-0,99	
10	enzymat., autom.	6,58	-0,111	-0,39	-0,50	
11	HPLC	6,55	-0,141	-0,50	-0,63	
13	enzymat., autom.	6,80	0,109	0,38	0,49	
15	enzymat., autom.	6,70	0,009	0,03	0,04	
16	enzymat., autom.	6,84	0,150	0,53	0,67	
19	enzymat., autom.	6,69	-0,001	-0,00	-0,00	
21	HPLC	6,56	-0,131	-0,46	-0,59	
22	HPLC	6,63	-0,061	-0,21	-0,27	
23	HPLC	5,30	-1,391	-4,89	-6,22	(**)
26	enzymat., autom.	6,78	0,089	0,31	0,40	
27	HPLC	6,50	-0,191	-0,67	-0,85	
30	enzymat., autom.	6,73	0,035	0,12	0,16	
35	enzymat., autom.	6,60	-0,091	-0,32	-0,41	
38	enzymat., autom.	6,83	0,139	0,49	0,62	
39	HPLC	6,54	-0,151	-0,53	-0,68	
40	enzymat., autom.	6,79	0,095	0,34	0,43	
41	enzymat., autom.	6,61	-0,081	-0,28	-0,36	
42	enzymat., autom.	6,69	0,001	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	6,70	0,009	0,03	0,04	
45	enzymat., autom.	7,00	0,309	1,09	1,38	
46	enzymat., autom.	6,60	-0,091	-0,32	-0,41	
49	enzymat., autom.	6,85	0,159	0,56	0,71	
51	enzymat., autom.	6,74	0,049	0,17	0,22	
52	enzymat., autom.	6,64	-0,051	-0,18	-0,23	
55	enzymat., autom.	6,77	0,079	0,28	0,35	
58	HPLC	7,13	0,439	1,54	1,96	
60	HPLC	6,60	-0,091	-0,32	-0,41	
62	enzymat., autom.	6,74	0,045	0,16	0,20	
68	enzymat., autom.	6,79	0,099	0,35	0,44	
78	enzymat. Hand	6,48	-0,211	-0,74	-0,94	
91	HPLC	6,54	-0,151	-0,53	-0,68	
99	HPLC	6,70	0,011	0,04	0,05	
111	NMR	6,45	-0,243	-0,86	-1,09	
112	NMR	6,96	0,264	0,93	1,18	
113	NMR	6,43	-0,261	-0,92	-1,17	
114	NMR	6,59	-0,097	-0,34	-0,44	
115	NMR	6,40	-0,291	-1,02	-1,30	
116	NMR	6,57	-0,119	-0,42	-0,53	
117	NMR	7,18	0,492	1,73	2,20	

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

4.5.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	6,576	0,102
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	25	6,700	0,126
enzymat., autom. 2	OIV-MA-AS313-29; enzymatisch, automatisiert	1	6,870	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	6,703	0,281
	herkömmliche Verfahren	39	6,675	0,151
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	6,497	0,443
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	6,626	0,284

4.5.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,41	-0,280	-0,98	-0,69	
202	FTIR	6,31	-0,380	-1,34	-0,93	
203	FTIR	6,12	-0,570	-2,00	-1,40	
204	FTIR	6,02	-0,670	-2,36	-1,64	
205	FTIR	6,62	-0,070	-0,25	-0,17	
207	FTIR	6,80	0,110	0,39	0,27	
208	FTIR	6,63	-0,060	-0,21	-0,15	
209	FTIR	6,40	-0,290	-1,02	-0,71	
210	FTIR	6,57	-0,120	-0,42	-0,29	
211	FTIR	6,39	-0,300	-1,06	-0,74	
212	FTIR	6,60	-0,090	-0,32	-0,22	
213	FTIR	6,88	0,190	0,67	0,47	
215	FTIR	6,40	-0,290	-1,02	-0,71	
216	FTIR	6,37	-0,320	-1,13	-0,78	
217	FTIR	5,88	-0,810	-2,85	-1,99	
218	FTIR	6,16	-0,530	-1,86	-1,30	
219	FTIR	5,72	-0,970	-3,41	-2,38	
220	FTIR	8,60	1,910	6,72	4,68	
221	FTIR	6,15	-0,540	-1,90	-1,32	
222	FTIR	6,66	-0,030	-0,11	-0,07	
223	FTIR	5,40	-1,290	-4,54	-3,16	
224	FTIR	6,60	-0,090	-0,32	-0,22	
225	FTIR	6,62	-0,070	-0,25	-0,17	
226	FTIR	6,28	-0,410	-1,44	-1,00	
227	FTIR	7,00	0,310	1,09	0,76	
228	FTIR	7,21	0,520	1,83	1,27	
229	FTIR	6,64	-0,050	-0,18	-0,12	
230	FTIR	6,18	-0,510	-1,79	-1,25	
232	FTIR	6,05	-0,640	-2,25	-1,57	
234	FTIR	6,81	0,120	0,42	0,29	
235	FTIR	5,40	-1,290	-4,54	-3,16	
236	FTIR	6,70	0,010	0,04	0,02	
237	FTIR	8,25	1,560	5,49	3,82	
240	FTIR	6,18	-0,510	-1,79	-1,25	
241	FTIR	6,30	-0,390	-1,37	-0,96	
242	FTIR	6,37	-0,320	-1,13	-0,78	
243	FTIR	6,80	0,110	0,39	0,27	
244	FTIR	7,41	0,720	2,53	1,76	
245	FTIR	6,10	-0,590	-2,08	-1,45	
246	FTIR	6,70	0,010	0,04	0,02	
248	FTIR	7,00	0,310	1,09	0,76	
249	FTIR	7,03	0,340	1,20	0,83	
250	FTIR	6,00	-0,690	-2,43	-1,69	
251	FTIR	6,74	0,050	0,18	0,12	
253	FTIR	7,00	0,310	1,09	0,76	
255	FTIR	5,60	-1,090	-3,83	-2,67	
256	FTIR	6,69	0,000	0,00	0,00	
257	FTIR	6,49	-0,200	-0,70	-0,49	
258	FTIR	6,00	-0,690	-2,43	-1,69	
259	FTIR	6,70	0,010	0,04	0,02	
260	FTIR	8,50	1,810	6,37	4,44	
261	FTIR	6,28	-0,410	-1,44	-1,00	
262	FTIR	6,60	-0,090	-0,32	-0,22	
263	FTIR	6,60	-0,090	-0,32	-0,22	
264	FTIR	6,41	-0,280	-0,98	-0,69	
265	FTIR	6,27	-0,420	-1,48	-1,03	
266	FTIR	6,27	-0,420	-1,48	-1,03	
267	FTIR	6,70	0,010	0,04	0,02	
269	FTIR	7,42	0,730	2,57	1,79	
270	FTIR	6,32	-0,370	-1,30	-0,91	
271	FTIR	6,72	0,030	0,11	0,07	
273	FTIR	6,75	0,060	0,21	0,15	
274	FTIR	6,04	-0,650	-2,29	-1,59	
275	FTIR	6,72	0,030	0,11	0,07	
276	FTIR	6,60	-0,090	-0,32	-0,22	
277	FTIR	6,80	0,110	0,39	0,27	

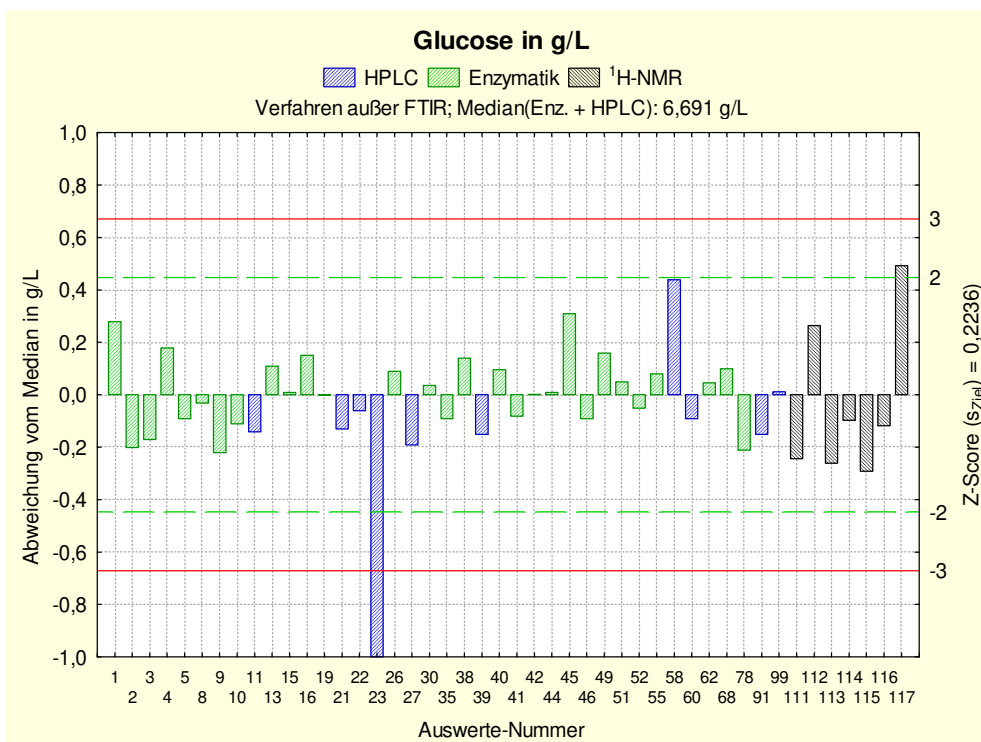
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

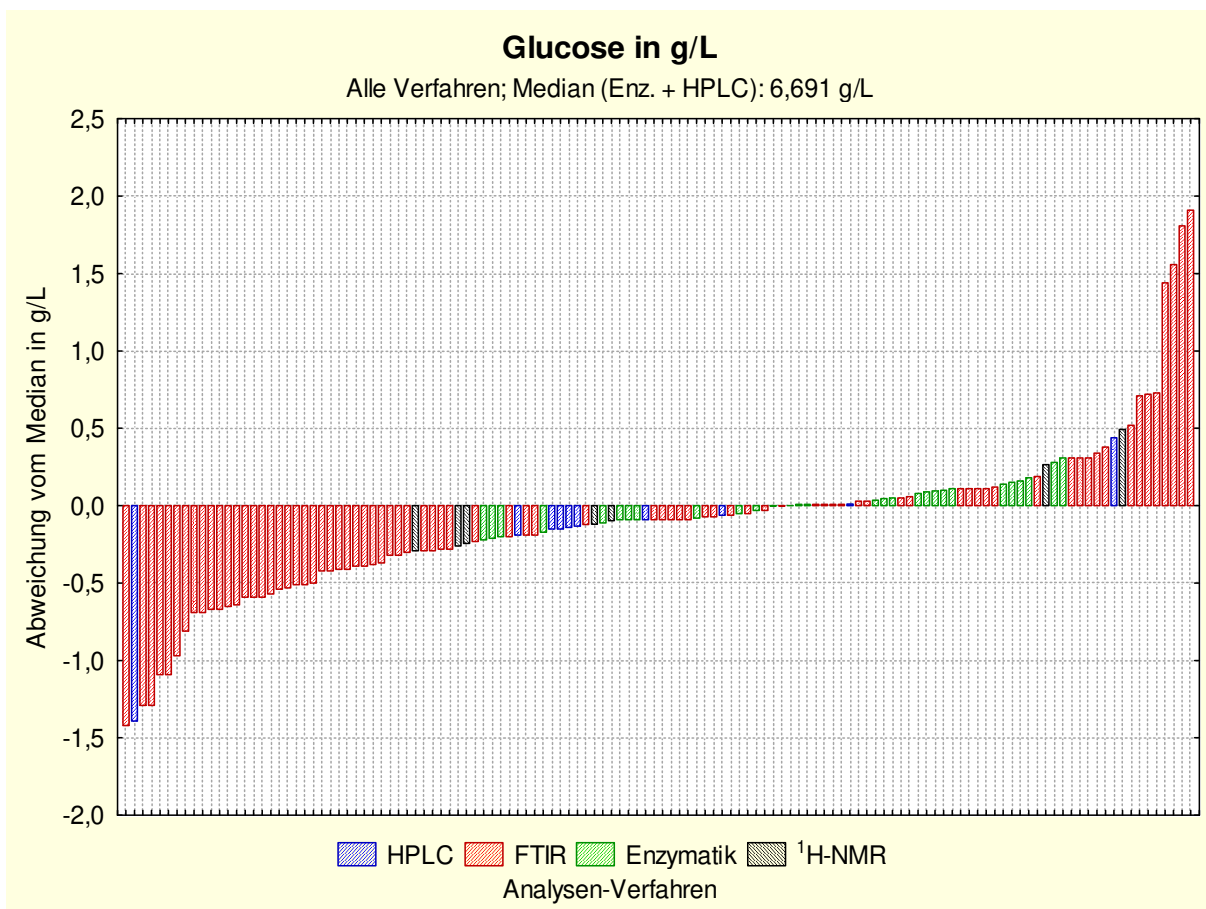
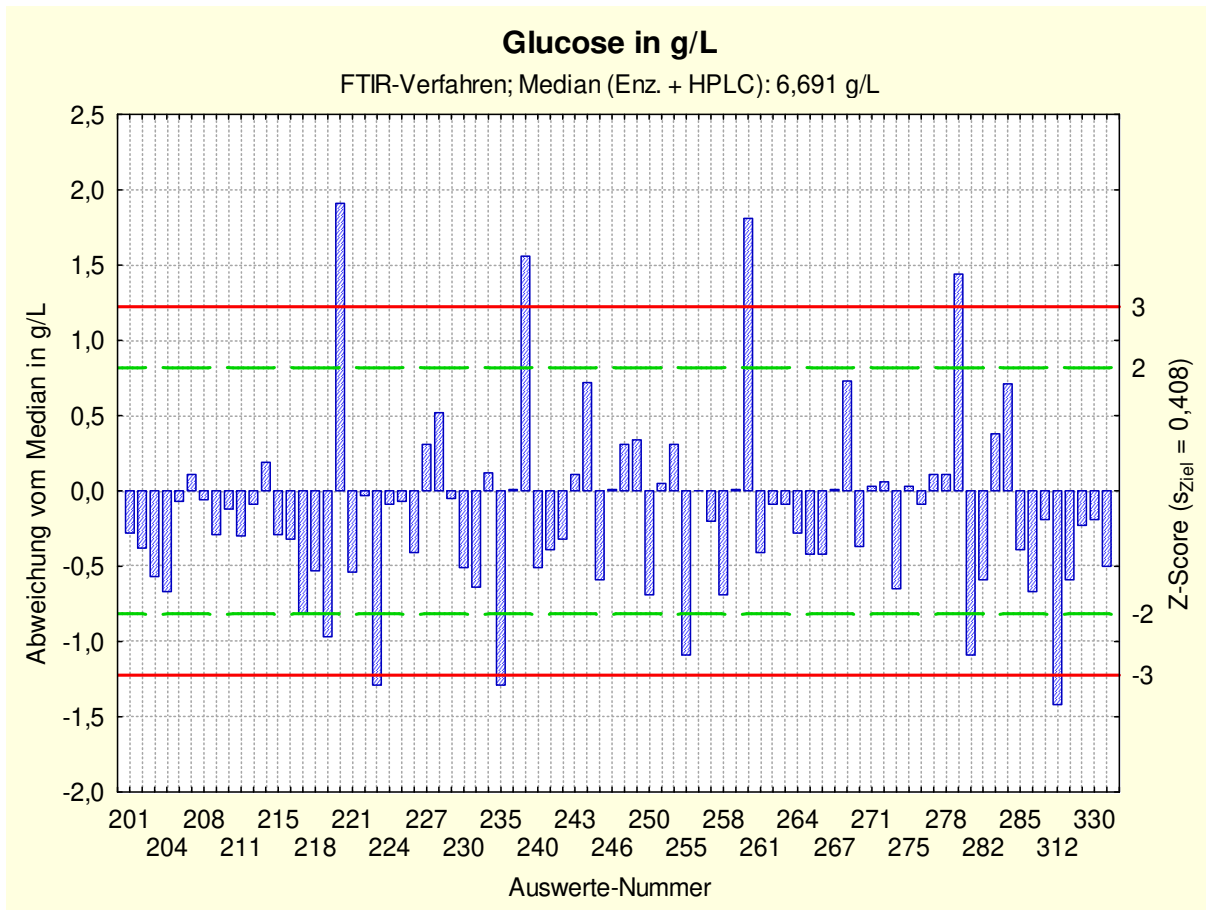
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	6,80	0,110	0,39	0,27	
280	FTIR	8,13	1,440	5,07	3,53	
281	FTIR	5,60	-1,090	-3,83	-2,67	
282	FTIR	6,10	-0,590	-2,08	-1,45	
283	FTIR	7,07	0,380	1,34	0,93	
284	FTIR	7,40	0,710	2,50	1,74	
285	FTIR	6,30	-0,390	-1,37	-0,96	
286	FTIR	6,02	-0,670	-2,36	-1,64	
287	FTIR	6,50	-0,190	-0,67	-0,47	
312	FTIR	5,27	-1,420	-4,99	-3,48	
321	FTIR	6,10	-0,590	-2,08	-1,45	
328	FTIR	6,46	-0,230	-0,81	-0,56	
330	FTIR	6,50	-0,190	-0,67	-0,47	
337	FTIR	6,19	-0,500	-1,76	-1,23	

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

4.5.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	39	38
Minimalwert	5,30	6,47
Mittelwert	6,656	6,691
Median	6,690	6,691
Maximalwert	7,13	7,13
Standardabweichung (s _L)	0,269	0,152
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,043	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,284	0,284
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,224	0,224
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,408	0,408
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,95	0,54
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,20	0,68
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,66	0,37
Quotient (u _M /s _H)	0,15	0,09
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,19	0,11
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,11	0,06





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	6,84	0,140	0,49	0,63	
02	enzymat., autom.	6,41	-0,290	-1,02	-1,30	
03	HPLC	7,08	0,380	1,33	1,70	
04	enzymat., autom.	6,75	0,050	0,18	0,22	
05	enzymat., autom.	6,53	-0,170	-0,60	-0,76	
08	enzymat. Hand	6,52	-0,180	-0,63	-0,80	
09	enzymat., autom.	6,09	-0,610	-2,14	-2,73	
10	enzymat., autom.	6,31	-0,390	-1,37	-1,74	
11	HPLC	6,50	-0,200	-0,70	-0,89	
13	enzymat., autom.	6,73	0,030	0,11	0,13	
15	enzymat., autom.	6,53	-0,170	-0,60	-0,76	
16	enzymat., autom.	6,90	0,200	0,70	0,89	
19	enzymat., autom.	6,67	-0,030	-0,11	-0,13	
21	HPLC	6,92	0,220	0,77	0,98	
22	HPLC	6,65	-0,050	-0,18	-0,22	
23	HPLC	7,60	0,900	3,16	4,02	
26	enzymat., autom.	6,62	-0,080	-0,28	-0,36	
27	HPLC	6,40	-0,300	-1,05	-1,34	
30	enzymat., autom.	6,89	0,187	0,66	0,84	
35	enzymat., autom.	6,70	0,000	0,00	0,00	
38	enzymat., autom.	7,34	0,640	2,25	2,86	
39	HPLC	6,65	-0,050	-0,18	-0,22	
40	enzymat., autom.	6,96	0,265	0,93	1,18	
41	enzymat., autom.	6,65	-0,050	-0,18	-0,22	
42	enzymat., autom.	6,83	0,128	0,45	0,57	
44	enzymat., autom.	6,50	-0,200	-0,70	-0,89	
45	enzymat., autom.	6,70	0,000	0,00	0,00	
46	enzymat., autom.	6,70	0,000	0,00	0,00	
49	enzymat., autom.	7,00	0,300	1,05	1,34	
51	enzymat., autom.	6,82	0,120	0,42	0,54	
52	enzymat., autom.	6,74	0,040	0,14	0,18	
55	enzymat., autom.	6,58	-0,120	-0,42	-0,54	
58	HPLC	7,50	0,800	2,81	3,57	
60	HPLC	6,90	0,200	0,70	0,89	
62	enzymat., autom.	6,75	0,052	0,18	0,23	
68	enzymat., autom.	6,70	0,000	0,00	0,00	
78	enzymat. Hand	6,19	-0,510	-1,79	-2,28	
91	HPLC	7,04	0,340	1,19	1,52	
99	HPLC	6,98	0,279	0,98	1,25	
111	NMR	6,30	-0,399	-1,40	-1,78	
112	NMR	6,64	-0,062	-0,22	-0,28	
113	NMR	6,30	-0,400	-1,41	-1,79	
114	NMR	6,36	-0,339	-1,19	-1,51	
115	NMR	6,70	0,000	0,00	0,00	
116	NMR	6,57	-0,126	-0,44	-0,56	
117	NMR	6,97	0,271	0,95	1,21	

4.6.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	11	6,925	0,421
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	24	6,696	0,205
enzymat. autom. 2	OIV-MA-AS313-29; enzymatisch, automatisiert	1	6,750	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	3	6,517	0,369
	herkömmliche Verfahren	39	6,732	0,257
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	6,974	0,450
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	6,549	0,281

4.6.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,11	0,410	1,44	1,24	
202	FTIR	6,77	0,070	0,25	0,21	
203	FTIR	7,46	0,760	2,67	2,30	
204	FTIR	7,04	0,340	1,19	1,03	
205	FTIR	6,56	-0,140	-0,49	-0,42	
207	FTIR	7,20	0,500	1,76	1,52	
208	FTIR	6,81	0,110	0,39	0,33	
209	FTIR	6,80	0,100	0,35	0,30	
210	FTIR	5,90	-0,800	-2,81	-2,42	
211	FTIR	6,51	-0,190	-0,67	-0,58	
212	FTIR	6,97	0,270	0,95	0,82	
213	FTIR	6,80	0,100	0,35	0,30	
215	FTIR	6,60	-0,100	-0,35	-0,30	
216	FTIR	7,01	0,310	1,09	0,94	
217	FTIR	6,85	0,150	0,53	0,45	
218	FTIR	6,86	0,160	0,56	0,48	
219	FTIR	7,14	0,440	1,55	1,33	
220	FTIR	6,80	0,100	0,35	0,30	
221	FTIR	7,02	0,320	1,12	0,97	
222	FTIR	7,99	1,290	4,53	3,91	
223	FTIR	7,50	0,800	2,81	2,42	
224	FTIR	7,40	0,700	2,46	2,12	
225	FTIR	6,87	0,170	0,60	0,52	
226	FTIR	7,25	0,550	1,93	1,67	
227	FTIR	7,40	0,700	2,46	2,12	
228	FTIR	6,51	-0,190	-0,67	-0,58	
229	FTIR	6,91	0,210	0,74	0,64	
230	FTIR	7,04	0,340	1,19	1,03	
232	FTIR	6,62	-0,080	-0,28	-0,24	
234	FTIR	7,21	0,510	1,79	1,55	
235	FTIR	5,80	-0,900	-3,16	-2,73	
236	FTIR	6,60	-0,100	-0,35	-0,30	
237	FTIR	6,56	-0,140	-0,49	-0,42	
240	FTIR	6,66	-0,040	-0,14	-0,12	
241	FTIR	7,21	0,510	1,79	1,55	
242	FTIR	6,87	0,170	0,60	0,52	
243	FTIR	7,20	0,500	1,76	1,52	
244	FTIR	7,98	1,280	4,50	3,88	
245	FTIR	6,47	-0,230	-0,81	-0,70	
246	FTIR	6,80	0,100	0,35	0,30	
248	FTIR	7,40	0,700	2,46	2,12	
249	FTIR	6,92	0,220	0,77	0,67	
250	FTIR	6,60	-0,100	-0,35	-0,30	
251	FTIR	6,95	0,250	0,88	0,76	
253	FTIR	6,70	0,000	0,00	0,00	
255	FTIR	8,50	1,800	6,32	5,45	
256	FTIR	7,01	0,310	1,09	0,94	
257	FTIR	7,35	0,650	2,28	1,97	
258	FTIR	7,50	0,800	2,81	2,42	
259	FTIR	6,40	-0,300	-1,05	-0,91	
260	FTIR	6,70	0,000	0,00	0,00	
261	FTIR	6,54	-0,160	-0,56	-0,48	
262	FTIR	6,20	-0,500	-1,76	-1,52	
263	FTIR	7,40	0,700	2,46	2,12	
264	FTIR	7,18	0,480	1,69	1,45	
265	FTIR	6,72	0,020	0,07	0,06	
266	FTIR	7,11	0,410	1,44	1,24	
267	FTIR	7,48	0,780	2,74	2,36	
269	FTIR	6,36	-0,340	-1,19	-1,03	
270	FTIR	7,71	1,010	3,55	3,06	
271	FTIR	7,31	0,610	2,14	1,85	
273	FTIR	7,19	0,490	1,72	1,48	
274	FTIR	6,61	-0,090	-0,32	-0,27	
275	FTIR	6,06	-0,640	-2,25	-1,94	
276	FTIR	6,00	-0,700	-2,46	-2,12	
277	FTIR	6,43	-0,270	-0,95	-0,82	

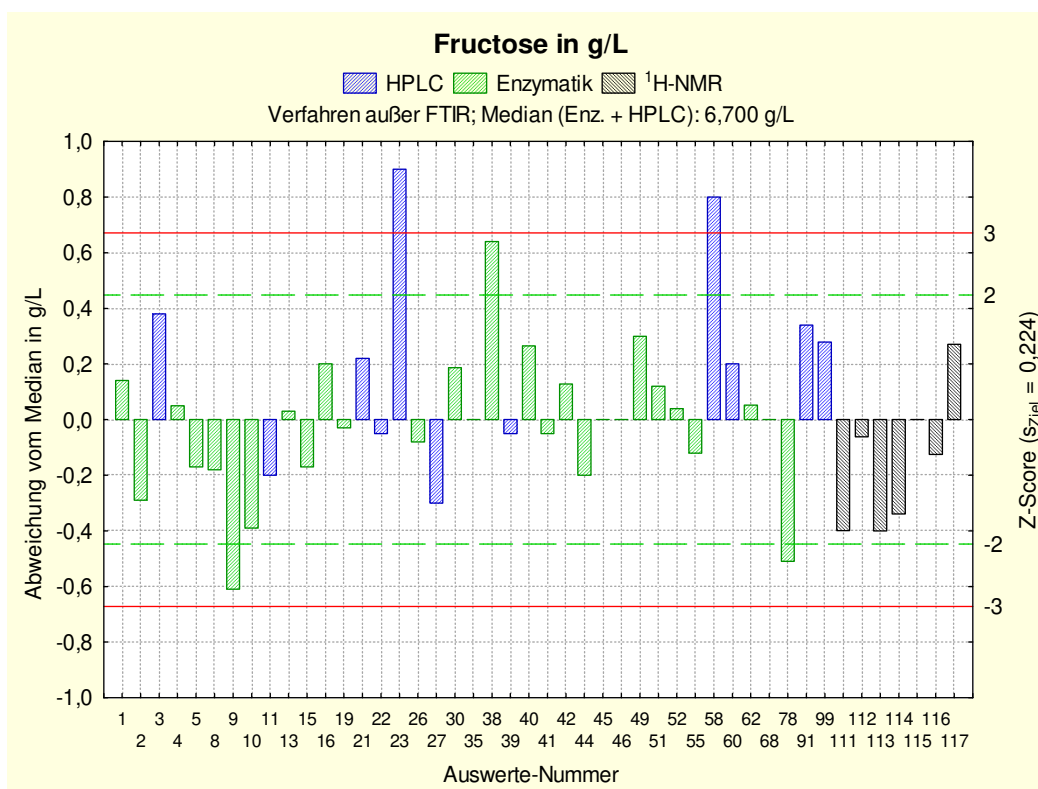
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

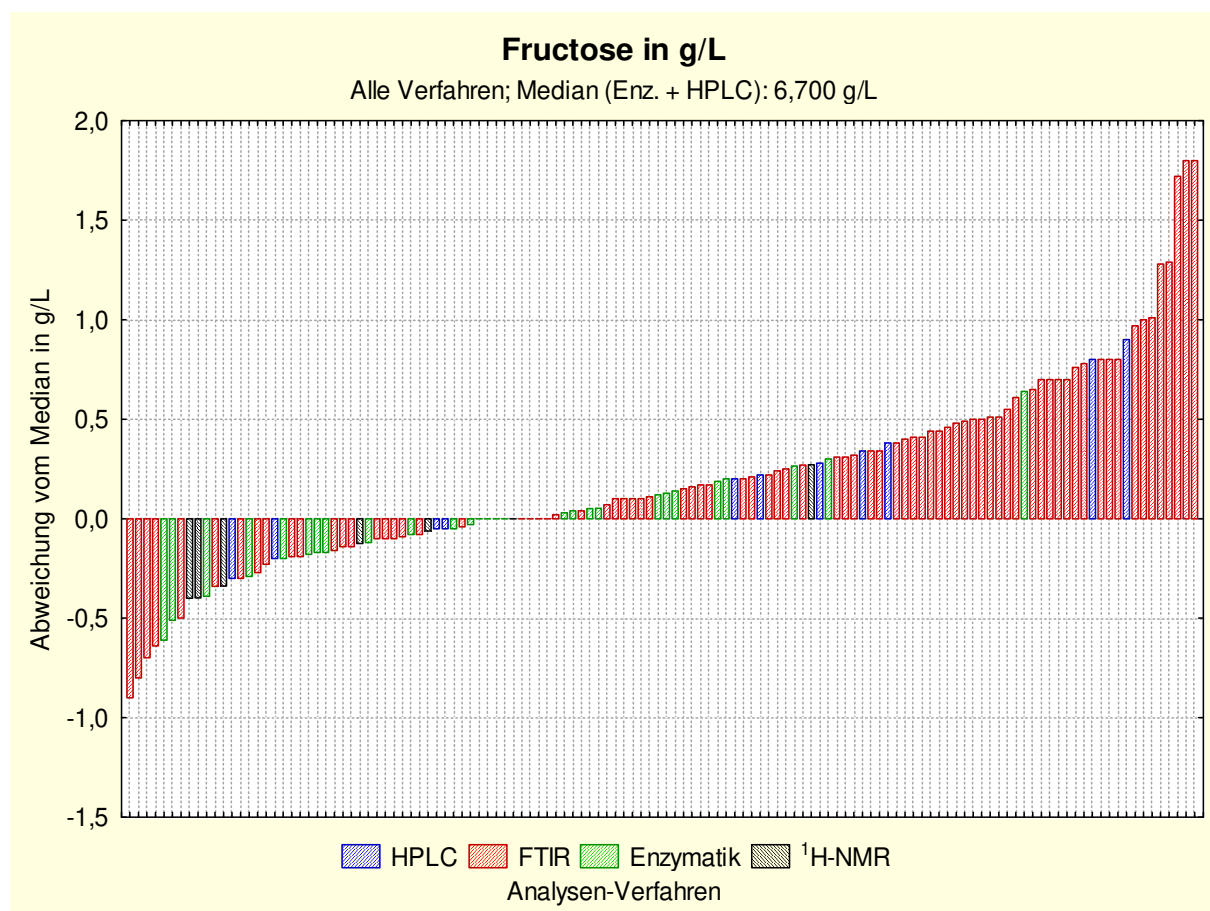
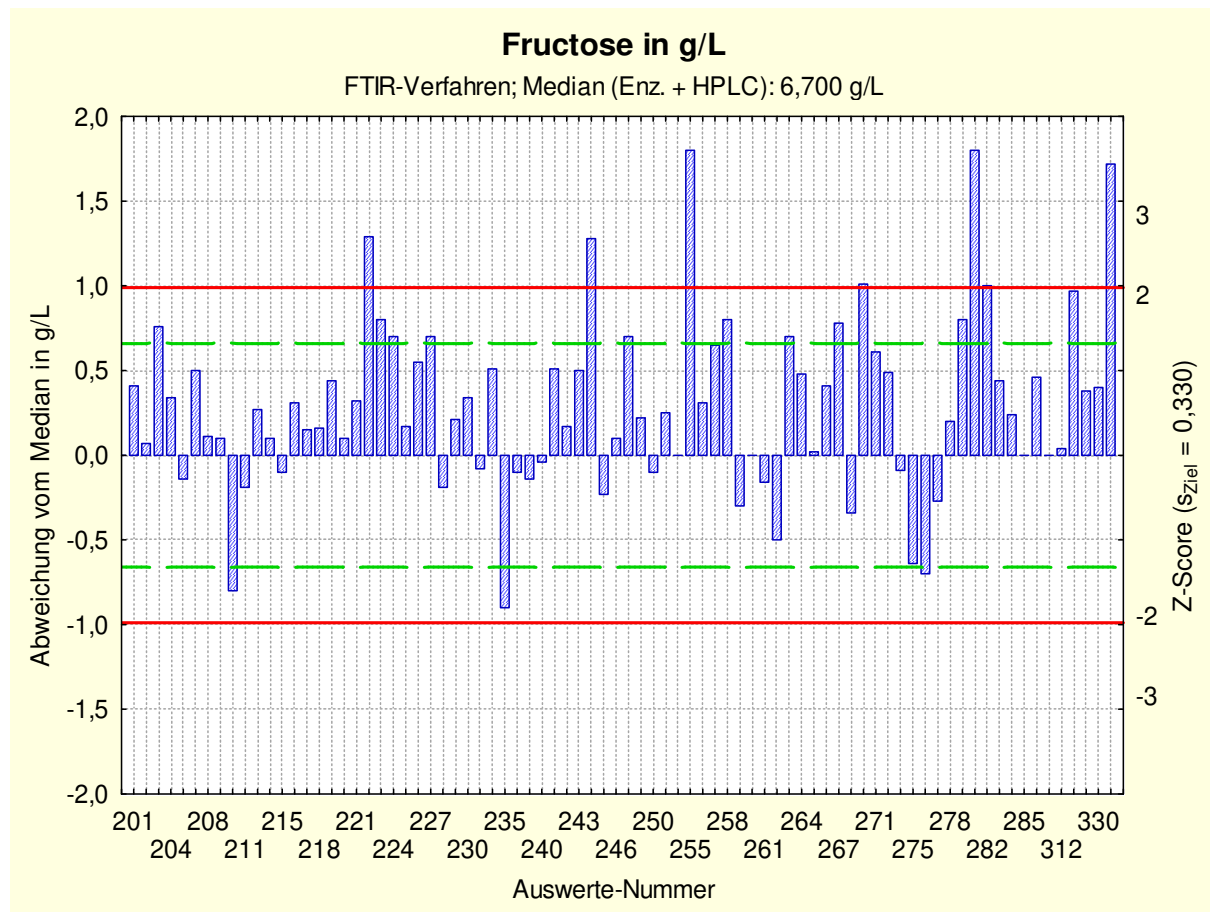
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	6,90	0,200	0,70	0,61	
280	FTIR	7,50	0,800	2,81	2,42	
281	FTIR	8,50	1,800	6,32	5,45	
282	FTIR	7,70	1,000	3,51	3,03	
283	FTIR	7,14	0,440	1,55	1,33	
284	FTIR	6,94	0,240	0,84	0,73	
285	FTIR	6,70	0,000	0,00	0,00	
286	FTIR	7,16	0,460	1,62	1,39	
287	FTIR	6,70	0,000	0,00	0,00	
312	FTIR	6,74	0,040	0,14	0,12	
321	FTIR	7,67	0,970	3,41	2,94	
328	FTIR	7,08	0,380	1,33	1,15	
330	FTIR	7,10	0,400	1,41	1,21	
337	FTIR	8,42	1,720	6,04	5,21	

4.6.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	39
Minimalwert	6,09
Mittelwert	6,748
Median	6,700
Maximalwert	7,60
Standardabweichung (s _L)	0,310
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,050
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,285
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,224
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,330
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,09
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,38
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,94
Quotient (u _M /s _H)	0,17
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,22
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,15





4.7 Glycerin [g/L]

4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	8,98	0,810	2,40	
02	enzymat. autom.	8,20	0,030	0,09	
03	enzymat. autom.	7,75	-0,420	-1,25	
04	enzymat. autom.	8,10	-0,070	-0,21	
05	enzymat. autom.	8,10	-0,070	-0,21	
06	enzymat. Hand	8,35	0,183	0,54	
08	HPLC	9,73	1,560	4,63	
09	enzymat. autom.	7,68	-0,490	-1,45	
10	enzymat. Hand	7,94	-0,230	-0,68	
11	HPLC	8,12	-0,050	-0,15	
15	enzymat. autom.	8,17	0,000	0,00	
21	HPLC	7,87	-0,300	-0,89	
22	HPLC	6,25	-1,920	-5,70	(**)
23	HPLC	8,30	0,130	0,39	
27	HPLC	8,80	0,630	1,87	
39	HPLC	8,47	0,300	0,89	
42	HPLC	8,08	-0,086	-0,26	
58	enzymat. autom.	8,40	0,230	0,68	
60	HPLC	8,10	-0,070	-0,21	
78	enzymat. Hand	7,79	-0,380	-1,13	
91	HPLC	8,39	0,220	0,65	
99	HPLC	8,23	0,063	0,19	
111	NMR	8,36	0,186	0,55	
112	NMR	8,36	0,187	0,56	
113	NMR	7,81	-0,360	-1,07	
114	NMR	8,37	0,196	0,58	
115	NMR	7,71	-0,460	-1,37	
116	NMR	8,00	-0,171	-0,51	

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

4.7.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	8,22	0,050	0,15	0,14	
202	FTIR	7,50	-0,670	-1,99	-1,93	
203	FTIR	7,95	-0,220	-0,65	-0,63	
205	FTIR	8,06	-0,110	-0,33	-0,32	
206	FTIR	6,97	-1,200	-3,56	-3,45	
207	FTIR	8,40	0,230	0,68	0,66	
208	FTIR	8,60	0,430	1,28	1,24	
210	FTIR	7,69	-0,480	-1,42	-1,38	
211	FTIR	8,11	-0,060	-0,18	-0,17	
212	FTIR	6,96	-1,210	-3,59	-3,48	
213	FTIR	7,52	-0,650	-1,93	-1,87	
215	FTIR	8,20	0,030	0,09	0,09	
216	FTIR	8,56	0,390	1,16	1,12	
217	FTIR	8,94	0,770	2,29	2,21	
218	FTIR	6,29	-1,880	-5,58	-5,40	(***)
219	FTIR	7,70	-0,470	-1,40	-1,35	
220	FTIR	9,10	0,930	2,76	2,67	
221	FTIR	8,46	0,290	0,86	0,83	
222	FTIR	8,71	0,540	1,60	1,55	
223	FTIR	8,15	-0,020	-0,06	-0,06	
224	FTIR	7,90	-0,270	-0,80	-0,78	
225	FTIR	7,77	-0,400	-1,19	-1,15	
226	FTIR	8,19	0,020	0,06	0,06	
227	FTIR	8,10	-0,070	-0,21	-0,20	
228	FTIR	8,37	0,200	0,59	0,57	
229	FTIR	8,08	-0,090	-0,27	-0,26	
230	FTIR	9,53	1,360	4,04	3,91	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

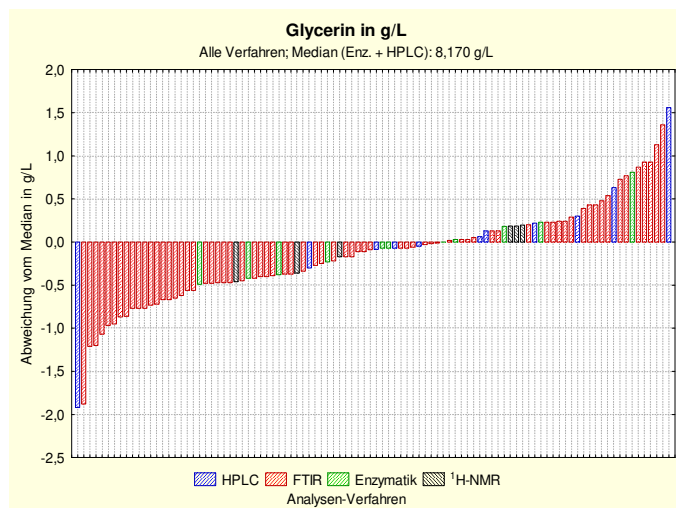
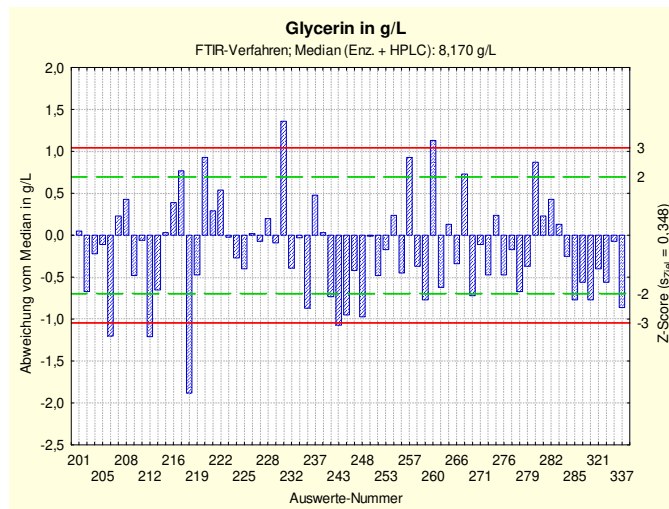
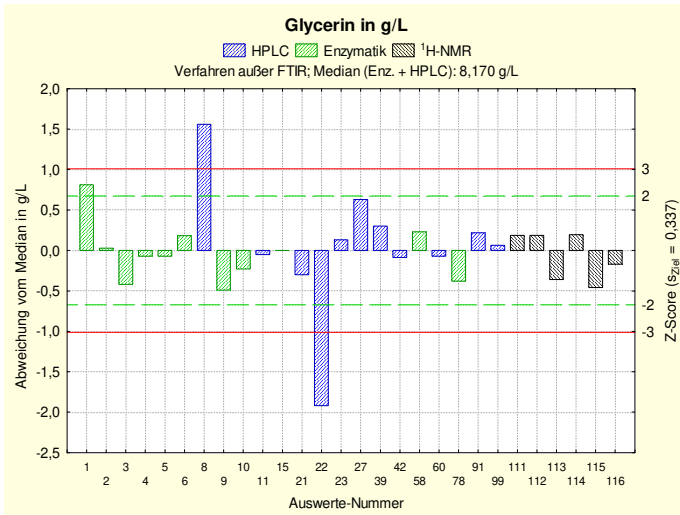
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
232	FTIR	7,78	-0,390	-1,16	-1,12	
234	FTIR	8,14	-0,030	-0,09	-0,09	
236	FTIR	7,30	-0,870	-2,58	-2,50	
237	FTIR	8,65	0,480	1,42	1,38	
240	FTIR	8,20	0,030	0,09	0,09	
241	FTIR	7,44	-0,730	-2,17	-2,10	
243	FTIR	7,10	-1,070	-3,18	-3,07	
244	FTIR	7,22	-0,950	-2,82	-2,73	
245	FTIR	7,75	-0,420	-1,25	-1,21	
248	FTIR	7,20	-0,970	-2,88	-2,79	
249	FTIR	8,16	-0,010	-0,03	-0,03	
251	FTIR	7,69	-0,480	-1,42	-1,38	
253	FTIR	8,00	-0,170	-0,50	-0,49	
255	FTIR	8,41	0,240	0,71	0,69	
256	FTIR	7,72	-0,450	-1,34	-1,29	
257	FTIR	9,10	0,930	2,76	2,67	
258	FTIR	7,80	-0,370	-1,10	-1,06	
259	FTIR	7,40	-0,770	-2,29	-2,21	
260	FTIR	9,30	1,130	3,35	3,25	
262	FTIR	7,55	-0,620	-1,84	-1,78	
265	FTIR	8,30	0,130	0,39	0,37	
266	FTIR	7,83	-0,340	-1,01	-0,98	
267	FTIR	8,90	0,730	2,17	2,10	
270	FTIR	7,45	-0,720	-2,14	-2,07	
271	FTIR	8,06	-0,110	-0,33	-0,32	
273	FTIR	7,70	-0,470	-1,40	-1,35	
274	FTIR	8,41	0,240	0,71	0,69	
276	FTIR	7,70	-0,470	-1,40	-1,35	
277	FTIR	8,00	-0,170	-0,50	-0,49	
278	FTIR	7,50	-0,670	-1,99	-1,93	
279	FTIR	7,80	-0,370	-1,10	-1,06	
280	FTIR	9,04	0,870	2,58	2,50	
281	FTIR	8,40	0,230	0,68	0,66	
282	FTIR	8,60	0,430	1,28	1,24	
283	FTIR	8,30	0,130	0,39	0,37	
284	FTIR	7,92	-0,250	-0,74	-0,72	
285	FTIR	7,40	-0,770	-2,29	-2,21	
286	FTIR	7,61	-0,560	-1,66	-1,61	
287	FTIR	7,40	-0,770	-2,29	-2,21	
321	FTIR	7,77	-0,400	-1,19	-1,15	
328	FTIR	7,61	-0,560	-1,66	-1,61	
330	FTIR	8,10	-0,070	-0,21	-0,20	
337	FTIR	7,31	-0,860	-2,55	-2,47	

4.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	22	21
Minimalwert	6,25	7,68
Mittelwert	8,173	8,265
Median	8,145	8,170
Maximalwert	9,73	9,73
Standardabweichung (s_L)	0,623	0,462
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,133	0,101
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,336	0,337
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\text{ü FTIR}}$)	0,348	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,85	1,37
Quotient ($s_L/s_{\text{ü FTIR}}$)	1,79	1,33
Quotient (u_M/s_H)	0,40	0,30
Quotient ($u_M/s_{\text{ü FTIR}}$)	0,38	0,29

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	8,263	0,412
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	7	8,063	0,267
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	8,262	0,597
	herkömmliche Verfahren	22	8,175	0,366
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	7,972	0,566
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	8,109	0,323



4.8 pH-Wert

4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,78	0,050	1,05	
02	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
03	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
04	potentiometr.	3,78	0,050	1,05	
05	potentiometr.	3,71	-0,020	-0,42	
06	potentiometr.	3,75	0,020	0,42	
08	potentiometr.	3,71	-0,020	-0,42	
09	potentiometr.	3,81	0,080	1,68	
10	potentiometr.	3,76	0,030	0,63	
11	potentiometr.	3,69	-0,040	-0,84	
13	potentiometr.	3,77	0,040	0,84	
15	potentiometr.	3,70	-0,030	-0,63	
16	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
19	potentiometr.	3,73	0,000	0,00	
21	potentiometr.	3,60	-0,130	-2,73	
22	potentiometr.	3,75	0,020	0,42	
23	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
26	k. A.	3,84	0,110	2,31	
27	potentiometr.	3,80	0,070	1,47	
28	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
30	potentiometr.	3,67	-0,060	-1,26	
35	potentiometr.	3,65	-0,080	-1,68	
37	potentiometr.	3,60	-0,130	-2,73	
38	potentiometr.	3,69	-0,040	-0,84	
39	potentiometr.	3,77	0,040	0,84	
40	potentiometr.	3,76	0,030	0,63	
41	potentiometr.	3,66	-0,070	-1,47	
44	potentiometr.	3,68	-0,050	-1,05	
45	potentiometr.	3,69	-0,040	-0,84	
46	potentiometr.	3,60	-0,130	-2,73	
48	potentiometr.	3,80	0,070	1,47	
49	potentiometr.	3,73	0,000	0,00	
51	potentiometr.	3,66	-0,070	-1,47	
52	potentiometr.	3,62	-0,110	-2,31	
55	potentiometr.	3,76	0,030	0,63	
58	potentiometr.	3,74	0,010	0,21	
59	potentiometr.	3,82	0,090	1,89	
60	potentiometr.	3,80	0,070	1,47	
62	potentiometr.	3,73	0,000	0,00	
63	potentiometr.	3,78	0,050	1,05	
66	potentiometr.	3,50	-0,230	-4,83	
68	potentiometr.	3,72	-0,010	-0,21	
72	potentiometr.	3,62	-0,110	-2,31	
73	potentiometr.	3,70	-0,030	-0,63	
74	potentiometr.	3,70	-0,030	-0,63	
78	potentiometr.	3,83	0,100	2,10	
79	potentiometr.	3,76	0,030	0,63	
80	potentiometr.	3,73	0,000	0,00	
94	potentiometr.	3,70	-0,030	-0,63	

4.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	48	3,724	0,0620
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,687	0,0661
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	3,840	
	alle Verfahren	130	3,701	0,0694

4.8.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,63	-0,100	-2,03	
202	FTIR	3,69	-0,040	-0,81	
203	FTIR	3,65	-0,080	-1,62	
204	FTIR	3,75	0,020	0,41	
205	FTIR	3,76	0,030	0,61	
206	FTIR	3,75	0,020	0,41	
207	FTIR	3,61	-0,120	-2,43	
208	FTIR	3,78	0,050	1,01	
209	FTIR	3,79	0,060	1,22	
210	FTIR	3,59	-0,140	-2,84	
211	FTIR	3,80	0,070	1,42	
212	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	
213	FTIR	3,74	0,010	0,20	
215	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
216	FTIR	3,71	-0,020	-0,41	
217	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
218	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
219	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	
220	FTIR	3,79	0,060	1,22	
221	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
222	FTIR	3,73	0,000	0,00	
223	FTIR	3,82	0,090	1,83	
224	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
225	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
226	FTIR	3,65	-0,080	-1,62	
227	FTIR	3,79	0,060	1,22	
228	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
229	FTIR	3,73	0,000	0,00	
230	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
232	FTIR	3,64	-0,090	-1,83	
234	FTIR	3,69	-0,040	-0,81	
235	FTIR	3,62	-0,110	-2,23	
236	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
237	FTIR	3,73	0,000	0,00	
240	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
241	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	
242	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	
243	FTIR	3,66	-0,070	-1,42	
244	FTIR	3,62	-0,110	-2,23	
245	FTIR	3,69	-0,040	-0,81	
246	FTIR	3,66	-0,070	-1,42	
248	FTIR	3,75	0,020	0,41	
249	FTIR	3,66	-0,070	-1,42	
250	FTIR	3,87	0,140	2,84	
251	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
253	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
255	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
256	FTIR	3,68	-0,050	-1,01	
257	FTIR	3,57	-0,160	-3,25	
258	FTIR	3,65	-0,080	-1,62	
259	FTIR	3,83	0,100	2,03	
260	FTIR	3,78	0,050	1,01	
262	FTIR	3,84	0,110	2,23	
263	FTIR	3,72	-0,010	-0,20	
264	FTIR	3,73	0,000	0,00	
265	FTIR	3,58	-0,150	-3,04	
266	FTIR	3,72	-0,010	-0,20	
267	FTIR	3,66	-0,070	-1,42	
268	FTIR	3,61	-0,120	-2,43	
269	FTIR	3,62	-0,110	-2,23	
270	FTIR	3,65	-0,080	-1,62	
271	FTIR	3,57	-0,160	-3,25	
273	FTIR	3,74	0,010	0,20	
274	FTIR	3,69	-0,040	-0,81	
275	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
276	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	

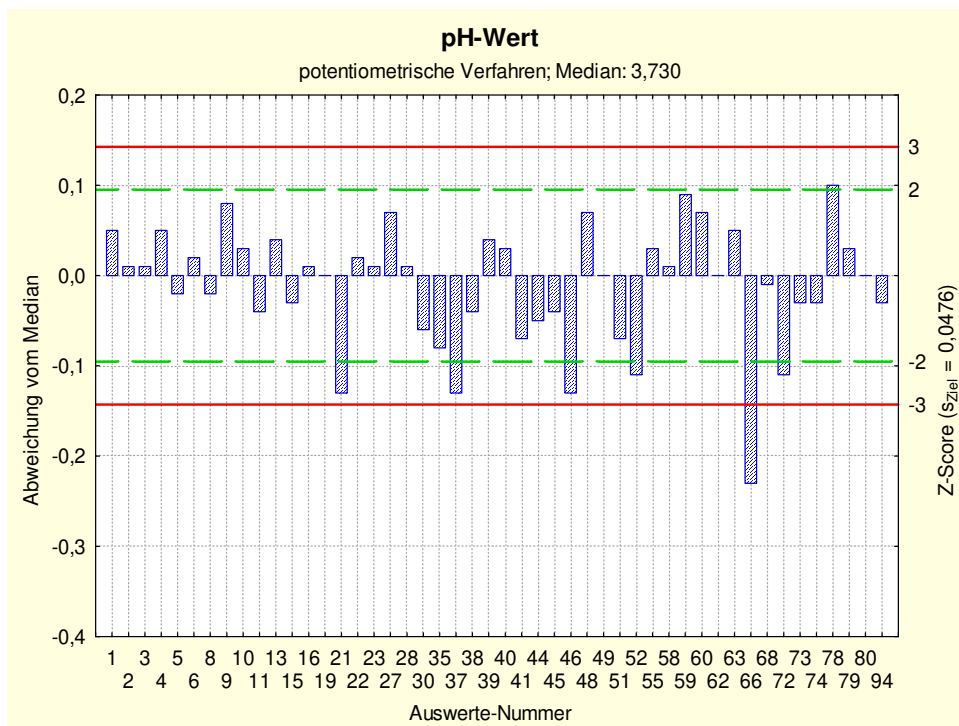
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

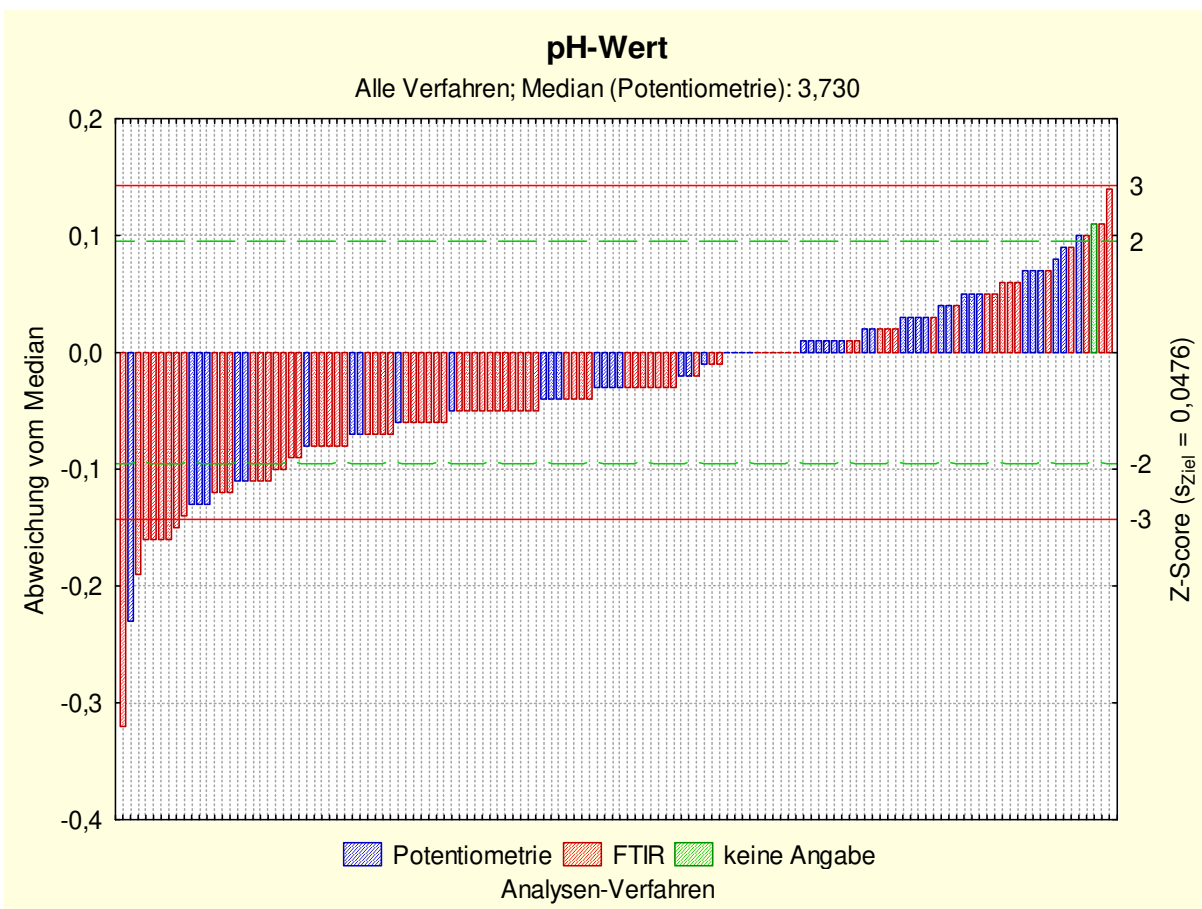
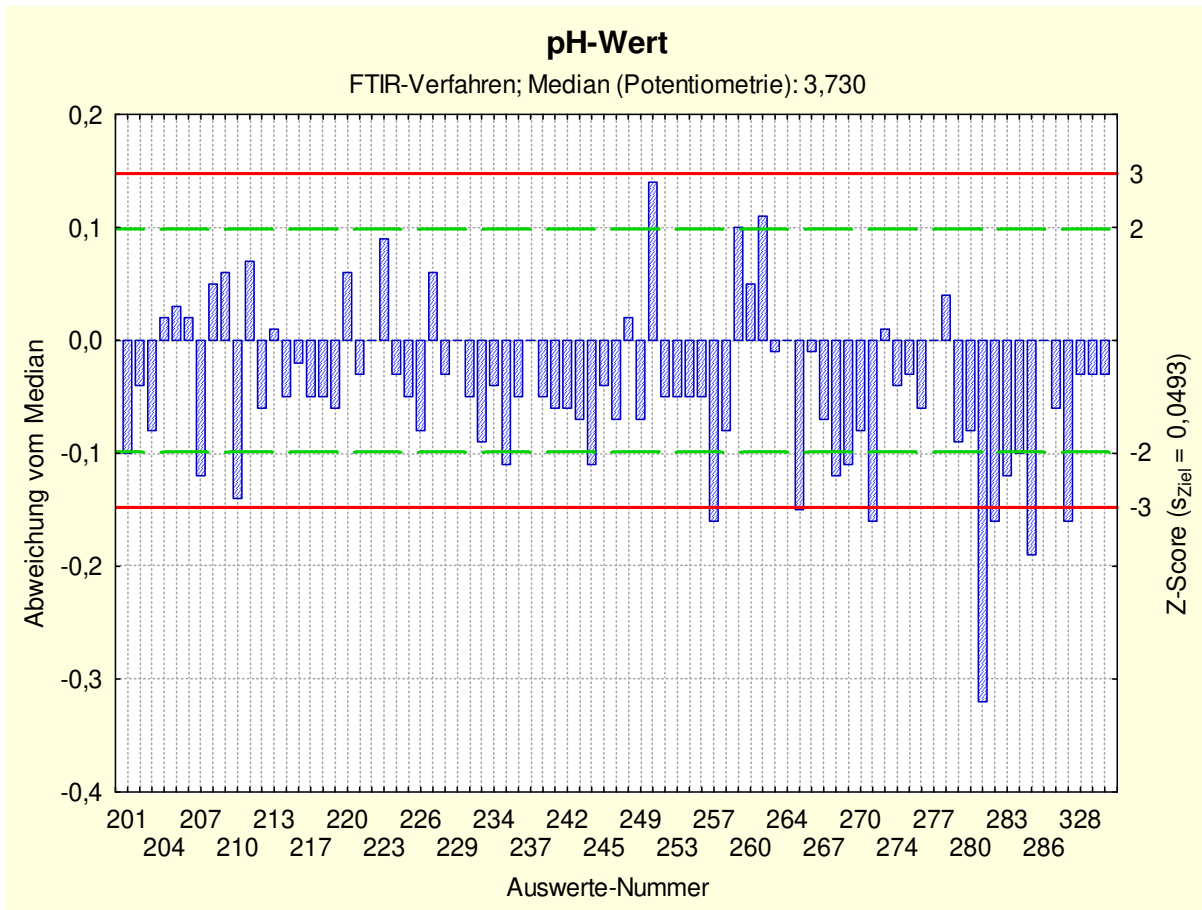
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	3,73	0,000	0,00	
278	FTIR	3,77	0,040	0,81	
279	FTIR	3,64	-0,090	-1,83	
280	FTIR	3,65	-0,080	-1,62	
281	FTIR	3,41	-0,320	-6,49	(***)
282	FTIR	3,57	-0,160	-3,25	
283	FTIR	3,61	-0,120	-2,43	
284	FTIR	3,63	-0,100	-2,03	
285	FTIR	3,54	-0,190	-3,85	
286	FTIR	3,73	0,000	0,00	
287	FTIR	3,67	-0,060	-1,22	
321	FTIR	3,57	-0,160	-3,25	
328	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
330	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	
337	FTIR	3,70	-0,030	-0,61	

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

4.8.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	48
Minimalwert	3,50
Mittelwert	3,719
Median	3,730
Maximalwert	3,83
Standardabweichung (s _L)	0,0666
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0096
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0493
Horrat-Wert (s _L /s _H)	
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,40
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,40
Quotient (u _M /s _H)	
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,20
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,19





4.9 Gesamtsäure [g/L]

4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,02	-0,080	-0,35	-0,75	
02	LwK 5.2.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
03	LwK 5.2.1	5,06	-0,040	-0,18	-0,37	
04	LwK 5.2.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
05	LwK 5.1	5,08	-0,020	-0,09	-0,19	
06	LwK 5.2.1	5,12	0,020	0,09	0,19	
07	LwK 5.2.1	5,30	0,200	0,89	1,87	
08	LwK 5.2.1	5,17	0,070	0,31	0,65	
09	LwK 5.2.1	5,03	-0,070	-0,31	-0,65	
10	LwK 5.1	4,95	-0,150	-0,66	-1,40	
11	LwK 5.2.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
13	LwK 5.1	5,10	0,000	0,00	0,00	
15	LwK 5.1	5,29	0,190	0,84	1,77	
16	LwK 5.2.1	5,01	-0,090	-0,40	-0,84	
19	LwK 5.2.1	5,18	0,080	0,35	0,75	
21	LwK 5.1	5,30	0,200	0,89	1,87	
22	LwK 5.1	4,86	-0,240	-1,06	-2,24	
23	LwK 5.1	5,10	0,000	0,00	0,00	
24	LwK 5.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
26	LwK 5.1	5,12	0,020	0,09	0,19	
27	LwK 5.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
28	LwK 5.1	5,05	-0,050	-0,22	-0,47	
30	LwK 5.2.1	5,05	-0,050	-0,22	-0,47	
34	LwK 5.2.1	5,06	-0,040	-0,18	-0,37	
37	LwK 5.1	5,10	0,000	0,00	0,00	
38	LwK 5.1	5,11	0,010	0,04	0,09	
39	LwK 5.2.1	5,17	0,070	0,31	0,65	
40	LwK 5.1	5,18	0,077	0,34	0,72	
41	LwK 5.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
42	LwK 5.1	5,04	-0,060	-0,27	-0,56	
44	LwK 5.1	5,07	-0,030	-0,13	-0,28	
45	LwK 5.2.1	5,10	0,000	0,00	0,00	
46	LwK 5.2.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
48	LwK 5.1	4,82	-0,280	-1,24	-2,61	
49	LwK 5.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
51	LwK 5.2.1	5,35	0,250	1,11	2,33	
52	LwK 5.2.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
54	LwK 5.2.1	5,40	0,300	1,33	2,80	
55	LwK 5.2.1	5,08	-0,020	-0,09	-0,19	
58	LwK 5.1	4,94	-0,160	-0,71	-1,49	
59	LwK 5.2.1	5,13	0,030	0,13	0,28	
60	LwK 5.2.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
62	LwK 5.2.1	5,31	0,210	0,93	1,96	
63	LwK 5.1	5,16	0,060	0,27	0,56	
66	LwK 5.1	5,10	0,000	0,00	0,00	
68	LwK 5.1	5,20	0,100	0,44	0,93	
72	LwK 5.1	5,32	0,220	0,97	2,05	
73	LwK 5.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
74	LwK 5.2.1	5,03	-0,070	-0,31	-0,65	
78	LwK 5.1	5,16	0,060	0,27	0,56	
79	LwK 5.2.2	5,10	0,000	0,00	0,00	
80	LwK 5.1	5,00	-0,100	-0,44	-0,93	
94	LwK 5.2.1	5,10	0,000	0,00	0,00	

4.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	27	5,102	0,125
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	25	5,124	0,115
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	1	5,100	
	herkömmliche Verfahren	53	5,112	0,114
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	5,203	0,177

4.9.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,31	0,210	0,93	1,45	
202	LwK 5.3	5,15	0,050	0,22	0,34	
203	LwK 5.3	5,01	-0,090	-0,40	-0,62	
204	LwK 5.3	5,01	-0,090	-0,40	-0,62	
205	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
206	LwK 5.3	5,38	0,280	1,24	1,93	
207	LwK 5.3	5,10	0,000	0,00	0,00	
208	LwK 5.3	5,21	0,110	0,49	0,76	
209	LwK 5.3	5,09	-0,010	-0,04	-0,07	
210	LwK 5.3	4,90	-0,200	-0,89	-1,38	
211	LwK 5.3	5,05	-0,050	-0,22	-0,34	
212	LwK 5.3	5,12	0,020	0,09	0,14	
213	LwK 5.3	5,33	0,230	1,02	1,59	
215	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
216	LwK 5.3	5,10	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 5.3	5,17	0,070	0,31	0,48	
218	LwK 5.3	5,14	0,040	0,18	0,28	
219	LwK 5.3	5,23	0,130	0,58	0,90	
220	LwK 5.3	5,39	0,290	1,28	2,00	
221	LwK 5.3	5,19	0,090	0,40	0,62	
222	LwK 5.3	5,23	0,130	0,58	0,90	
223	LwK 5.3	4,10	-1,000	-4,43	-6,90	(***)
224	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
225	LwK 5.3	5,32	0,220	0,97	1,52	
226	LwK 5.3	5,35	0,250	1,11	1,72	
227	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
228	LwK 5.3	5,34	0,240	1,06	1,66	
229	LwK 5.3	5,54	0,440	1,95	3,03	
230	LwK 5.3	5,19	0,090	0,40	0,62	
232	LwK 5.3	5,37	0,270	1,20	1,86	
234	LwK 5.3	5,24	0,140	0,62	0,97	
235	LwK 5.3	4,90	-0,200	-0,89	-1,38	
236	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
237	LwK 5.3	5,33	0,230	1,02	1,59	
240	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
241	LwK 5.3	5,33	0,230	1,02	1,59	
242	LwK 5.3	4,85	-0,250	-1,11	-1,72	
243	LwK 5.3	5,00	-0,100	-0,44	-0,69	
244	LwK 5.3	5,34	0,240	1,06	1,66	
245	LwK 5.3	5,24	0,140	0,62	0,97	
246	LwK 5.3	5,30	0,200	0,89	1,38	
247	LwK 5.3	5,42	0,320	1,42	2,21	
248	LwK 5.3	5,10	0,000	0,00	0,00	
249	LwK 5.3	5,37	0,270	1,20	1,86	
250	LwK 5.3	5,30	0,200	0,89	1,38	
251	LwK 5.3	5,41	0,310	1,37	2,14	
253	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
254	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
255	LwK 5.3	5,31	0,210	0,93	1,45	
256	LwK 5.3	5,37	0,270	1,20	1,86	
257	LwK 5.3	5,54	0,440	1,95	3,03	
258	LwK 5.3	5,10	0,000	0,00	0,00	
259	LwK 5.3	4,90	-0,200	-0,89	-1,38	
260	LwK 5.3	5,40	0,300	1,33	2,07	
261	LwK 5.3	5,04	-0,060	-0,27	-0,41	
262	LwK 5.3	5,30	0,200	0,89	1,38	
263	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
264	LwK 5.3	5,12	0,020	0,09	0,14	
265	LwK 5.3	5,04	-0,060	-0,27	-0,41	
266	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
267	LwK 5.3	5,35	0,250	1,11	1,72	
268	LwK 5.3	5,00	-0,100	-0,44	-0,69	
269	LwK 5.3	5,14	0,040	0,18	0,28	
270	LwK 5.3	5,08	-0,020	-0,09	-0,14	
271	LwK 5.3	5,07	-0,030	-0,13	-0,21	

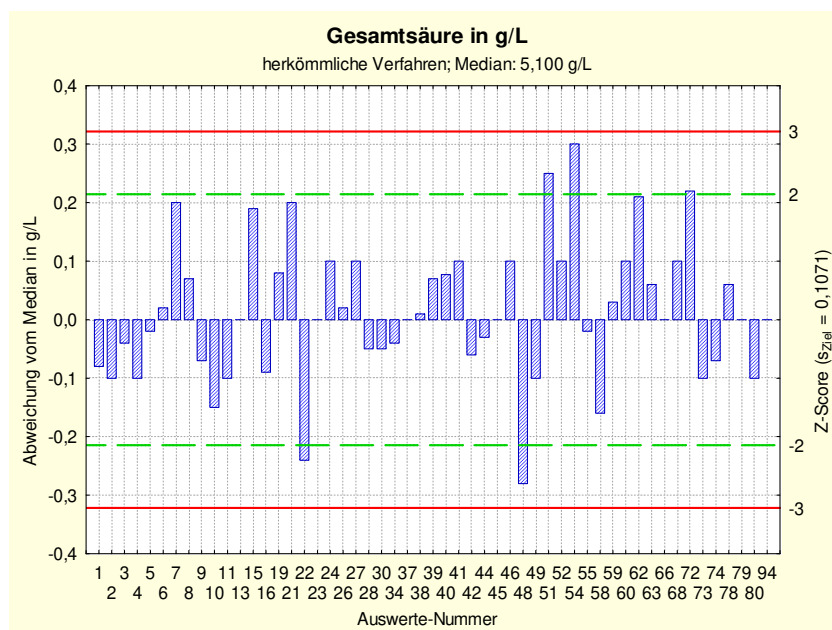
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

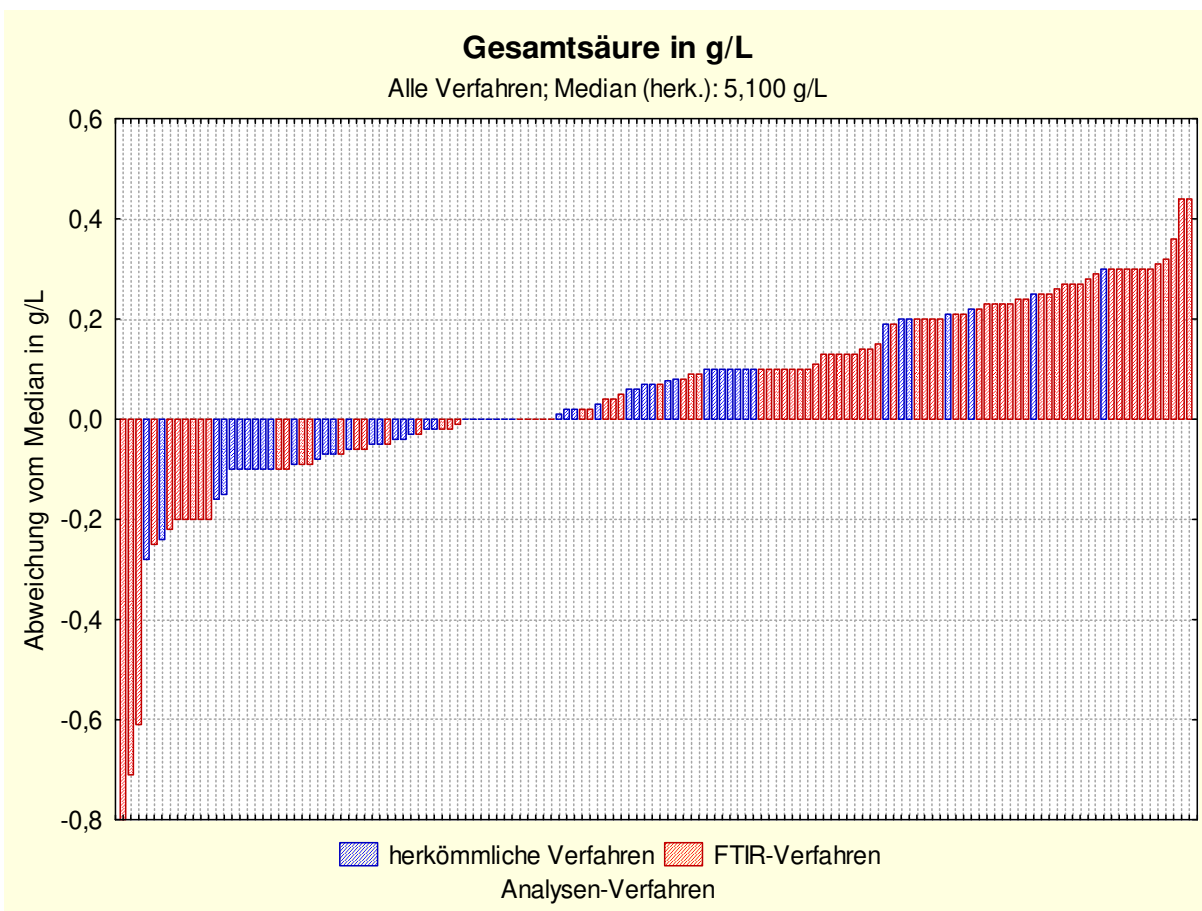
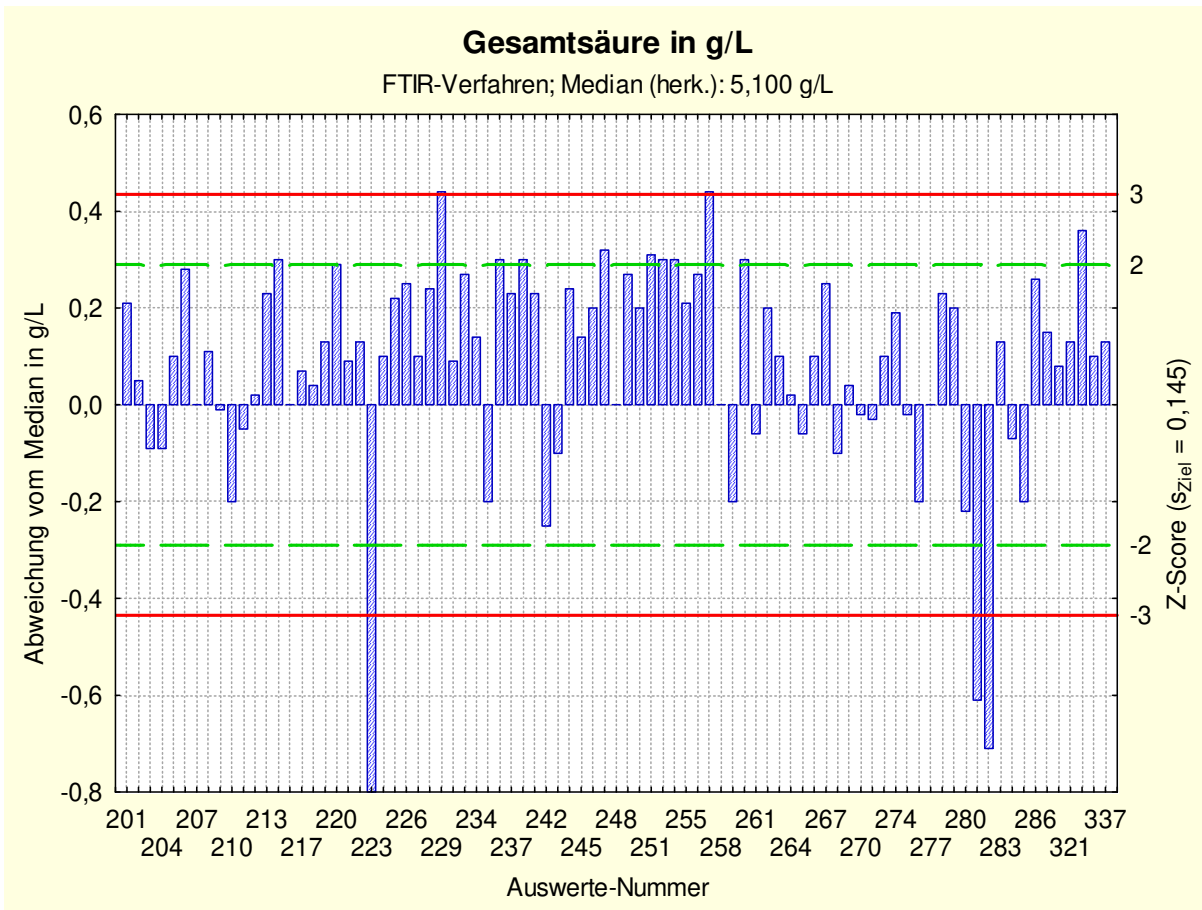
Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
274	LwK 5.3	5,29	0,190	0,84	1,31	
275	LwK 5.3	5,08	-0,020	-0,09	-0,14	
276	LwK 5.3	4,90	-0,200	-0,89	-1,38	
277	LwK 5.3	5,10	0,000	0,00	0,00	
278	LwK 5.3	5,33	0,230	1,02	1,59	
279	LwK 5.3	5,30	0,200	0,89	1,38	
280	LwK 5.3	4,88	-0,220	-0,97	-1,52	
281	LwK 5.3	4,49	-0,610	-2,70	-4,21	
282	LwK 5.3	4,39	-0,710	-3,14	-4,90	
283	LwK 5.3	5,23	0,130	0,58	0,90	
284	LwK 5.3	5,03	-0,070	-0,31	-0,48	
285	LwK 5.3	4,90	-0,200	-0,89	-1,38	
286	LwK 5.3	5,36	0,260	1,15	1,79	
287	LwK 5.3	5,25	0,150	0,66	1,03	
312	LwK 5.3	5,18	0,080	0,35	0,55	
321	LwK 5.3	5,23	0,130	0,58	0,90	
328	LwK 5.3	5,46	0,360	1,59	2,48	
330	LwK 5.3	5,20	0,100	0,44	0,69	
337	LwK 5.3	5,23	0,130	0,58	0,90	

4.9.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	53
Minimalwert	4,82
Mittelwert	5,114
Median	5,100
Maximalwert	5,40
Standardabweichung (s_L)	0,119
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,226
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,53
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,11
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,82
Quotient (u_M/s_H)	0,07
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,15
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,11





4.10 Weinsäure [g/L]

4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,99	0,170	1,81	
02	HPLC	1,46	-0,360	-3,83	
03	HPLC	1,51	-0,305	-3,24	
04	photometr.	1,58	-0,240	-2,55	
05	photometr.	1,99	0,170	1,81	
06	HPLC	1,71	-0,113	-1,20	
07	HPLC	1,45	-0,370	-3,93	
09	photometr., autom.	1,49	-0,330	-3,51	
10	photometr.	1,90	0,080	0,85	
13	photometr., autom.	2,24	0,420	4,46	
16	photometr., autom.	2,20	0,380	4,04	
19	photometr., autom.	1,75	-0,070	-0,74	
22	HPLC	1,97	0,150	1,59	
23	HPLC	1,75	-0,070	-0,74	
27	HPLC	1,90	0,080	0,85	
30	photometr., autom.	1,91	0,090	0,96	
38	photometr., autom.	1,44	-0,380	-4,04	
39	HPLC	1,82	0,000	0,00	
40	photometr., autom.	1,95	0,130	1,38	
41	photometr., autom.	1,92	0,100	1,06	
44	photometr., autom.	2,12	0,300	3,19	
45	photometr., autom.	1,93	0,110	1,17	
49	photometr., autom.	1,73	-0,090	-0,96	
55	photometr., autom.	1,82	0,000	0,00	
58	HPLC	1,69	-0,135	-1,43	
60	photometr., autom.	1,70	-0,120	-1,28	
62	HPLC	2,02	0,200	2,13	
68	photometr., autom.	1,20	-0,620	-6,59	(**)
78	photometr.	1,82	0,000	0,00	
97	HPLC	1,61	-0,210	-2,23	
102	photometr., autom.	1,76	-0,060	-0,64	
111	NMR	1,58	-0,237	-2,52	
112	NMR	1,86	0,038	0,40	
113	NMR	1,60	-0,220	-2,34	
114	NMR	1,46	-0,362	-3,85	
115	NMR	1,44	-0,380	-4,04	
116	NMR	1,90	0,080	0,85	

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

4.10.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC	HPLC + Photomerie	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	31	30
Minimalwert	1,45	1,20	1,44
Mittelwert	1,740	1,785	1,804
Median	1,728	1,820	1,820
Maximalwert	2,02	2,24	2,24
Standardabweichung (s_L)	0,205	0,239	0,217
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,059	0,043	0,040
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,090	0,094	0,094
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)			
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,27	2,54	2,31
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)			
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,50	1,05	0,96
Quotient (u_M/s_H)	0,66	0,46	0,42
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)			
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,20	0,19	0,17

4.10.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,73	-0,090	-0,96	-0,40	
202	FTIR	1,71	-0,110	-1,17	-0,48	
203	FTIR	1,57	-0,250	-2,66	-1,10	
204	FTIR	1,66	-0,160	-1,70	-0,70	
205	FTIR	1,81	-0,010	-0,11	-0,04	
207	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
208	FTIR	1,75	-0,070	-0,74	-0,31	
209	FTIR	1,40	-0,420	-4,46	-1,85	
210	FTIR	2,23	0,410	4,36	1,81	
211	FTIR	1,66	-0,160	-1,70	-0,70	
212	FTIR	2,09	0,270	2,87	1,19	
213	FTIR	1,97	0,150	1,59	0,66	
215	FTIR	1,60	-0,220	-2,34	-0,97	
216	FTIR	1,51	-0,310	-3,30	-1,37	
217	FTIR	1,84	0,020	0,21	0,09	
218	FTIR	2,05	0,230	2,44	1,01	
219	FTIR	1,93	0,110	1,17	0,48	
220	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
221	FTIR	1,72	-0,100	-1,06	-0,44	
222	FTIR	2,12	0,300	3,19	1,32	
223	FTIR	1,78	-0,040	-0,43	-0,18	
224	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
225	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
226	FTIR	2,14	0,320	3,40	1,41	
227	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
228	FTIR	1,93	0,110	1,17	0,48	
229	FTIR	1,99	0,170	1,81	0,75	
230	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
232	FTIR	1,72	-0,100	-1,06	-0,44	
234	FTIR	1,94	0,120	1,28	0,53	
235	FTIR	0,40	-1,420	-15,09	-6,26	(*)
236	FTIR	1,50	-0,320	-3,40	-1,41	
237	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
240	FTIR	1,88	0,060	0,64	0,26	
241	FTIR	1,84	0,020	0,21	0,09	
242	FTIR	1,76	-0,060	-0,64	-0,26	
243	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
244	FTIR	1,85	0,030	0,32	0,13	
245	FTIR	0,30	-1,524	-16,20	-6,71	(*)
246	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
248	FTIR	2,10	0,280	2,98	1,23	
249	FTIR	2,34	0,520	5,53	2,29	
250	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
251	FTIR	1,91	0,090	0,96	0,40	
253	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
255	FTIR	1,86	0,040	0,43	0,18	
256	FTIR	2,19	0,370	3,93	1,63	
257	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
258	FTIR	1,60	-0,220	-2,34	-0,97	
259	FTIR	1,50	-0,320	-3,40	-1,41	
260	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
263	FTIR	1,50	-0,320	-3,40	-1,41	
264	FTIR	1,74	-0,080	-0,85	-0,35	
265	FTIR	2,21	0,390	4,15	1,72	
266	FTIR	1,64	-0,180	-1,91	-0,79	
267	FTIR	2,02	0,200	2,13	0,88	
268	FTIR	2,17	0,350	3,72	1,54	
269	FTIR	1,73	-0,090	-0,96	-0,40	
270	FTIR	2,18	0,360	3,83	1,59	
271	FTIR	1,77	-0,050	-0,53	-0,22	
273	FTIR	1,55	-0,270	-2,87	-1,19	
274	FTIR	2,07	0,250	2,66	1,10	
275	FTIR	1,77	-0,050	-0,53	-0,22	
276	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
277	FTIR	3,09	1,270	13,50	5,59	(*)

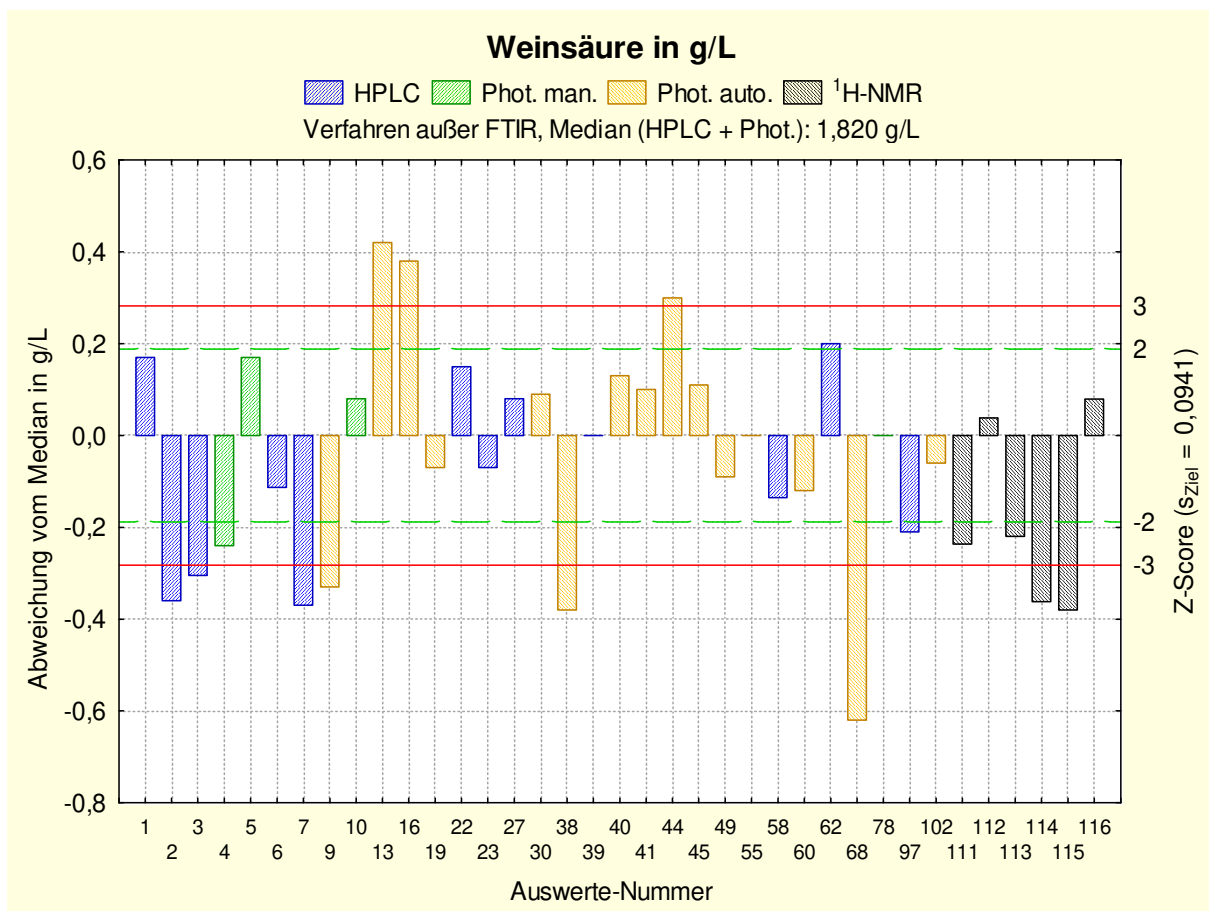
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

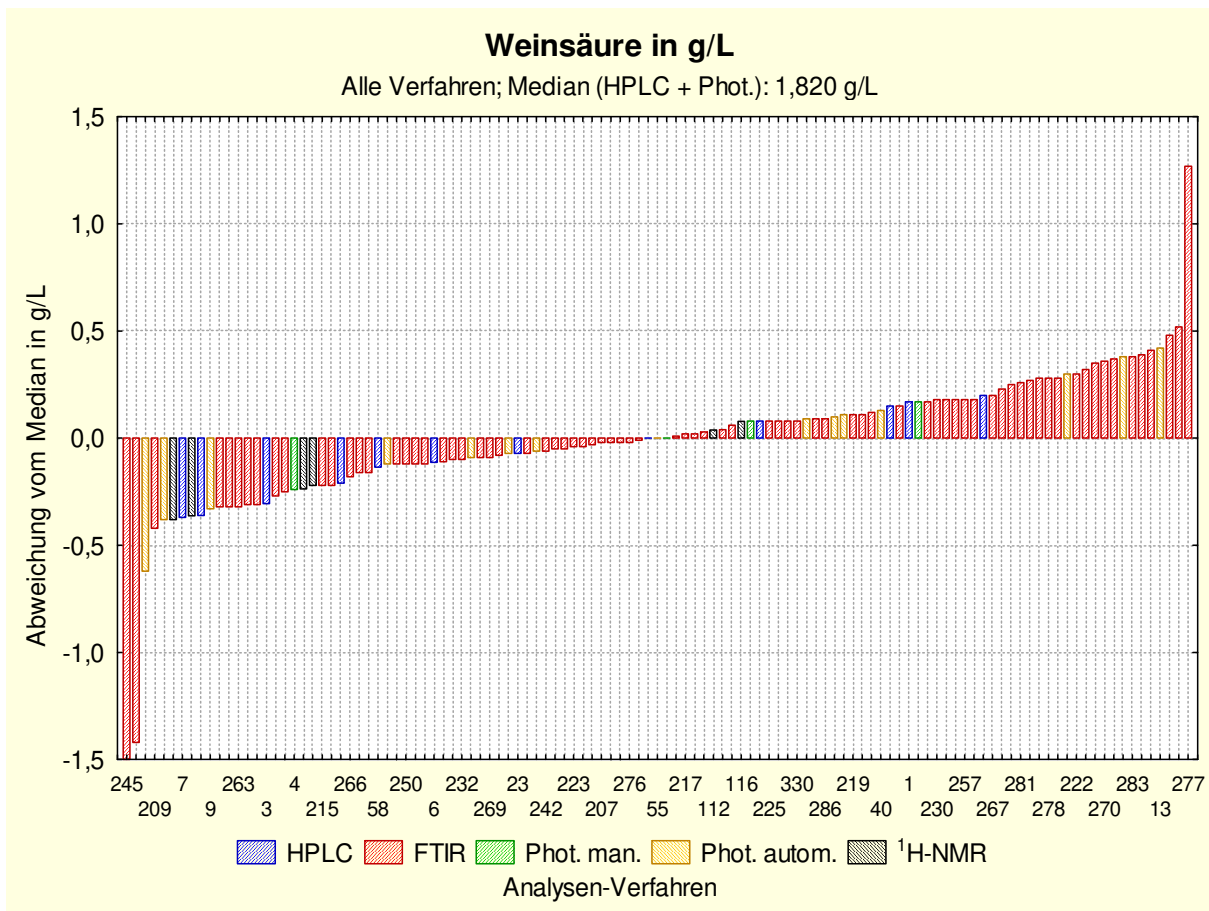
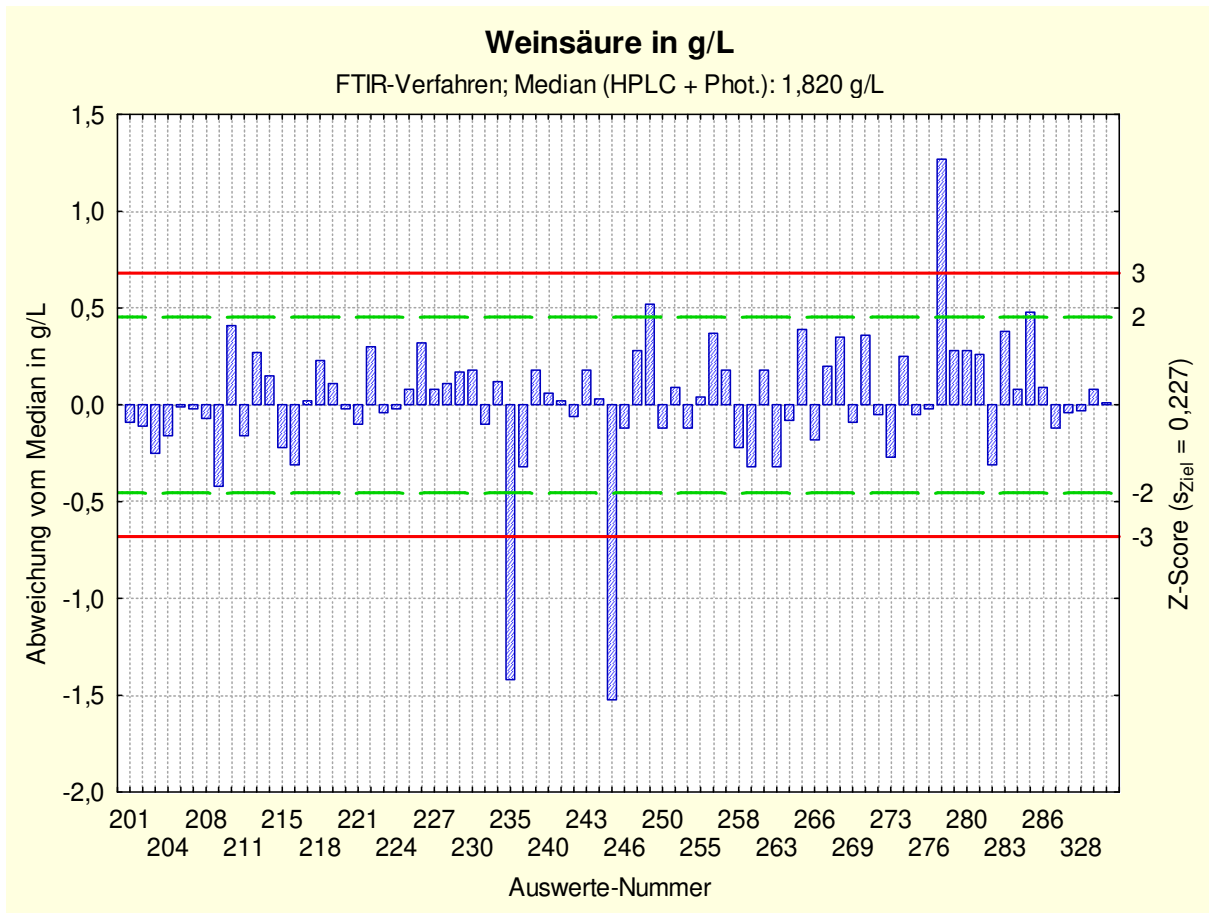
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	2,10	0,280	2,98	1,23	
280	FTIR	2,10	0,280	2,98	1,23	
281	FTIR	2,08	0,260	2,76	1,15	
282	FTIR	1,51	-0,310	-3,30	-1,37	
283	FTIR	2,20	0,380	4,04	1,67	
284	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
285	FTIR	2,30	0,480	5,10	2,11	
286	FTIR	1,91	0,090	0,96	0,40	
287	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
321	FTIR	1,78	-0,040	-0,43	-0,18	
328	FTIR	1,79	-0,030	-0,32	-0,13	
330	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
337	FTIR	1,83	0,010	0,11	0,04	

4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

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





4.11 Flüchtige Säure [g/L]

4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,680	0,0465	1,21	
02	OIV o. SO2-korr.	0,852	0,2185	5,69	(***)
03	Gerhardt SO2 korr.	0,659	0,0255	0,66	
04	OIV SO2-korr.	0,701	0,0675	1,76	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,642	0,0085	0,22	
06	OIV SO2-korr.	0,542	-0,0915	-2,38	
07	OIV o. SO2-korr.	0,580	-0,0535	-1,39	
08	OIV SO2-korr.	0,625	-0,0085	-0,22	
09	OIV SO2-korr.	0,692	0,0585	1,52	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,690	0,0565	1,47	
11	OIV SO2-korr.	0,541	-0,0925	-2,41	
22	Halbmikro SO2 unber.	0,630	-0,0035	-0,09	
26	Gerhardt SO2 korr.	0,581	-0,0525	-1,37	
28	Halbmikro SO2 ausg.	0,680	0,0465	1,21	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,600	-0,0335	-0,87	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,620	-0,0135	-0,35	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,637	0,0035	0,09	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,580	-0,0535	-1,39	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,678	0,0445	1,16	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,630	-0,0035	-0,09	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,620	-0,0135	-0,35	
46	Halbmikro SO2 korr.	0,570	-0,0635	-1,65	
55	Rentschler mod. korr.	0,639	0,0055	0,14	
59	Wädenswil SO2 korr.	0,490	-0,1435	-3,74	
62	Gerhardt SO2 korr.	0,720	0,0865	2,25	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,650	0,0165	0,43	
65	Wädenswil SO2 korr.	0,683	0,0495	1,29	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,730	0,0965	2,51	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,670	0,0365	0,95	
72	Wädenswil SO2 unber.	0,700	0,0665	1,73	
78	Halbmikro SO2 korr.	0,740	0,1065	2,77	
79	Halbmikro SO2 unber.	0,700	0,0665	1,73	
80	Wädenswil SO2 korr.	0,610	-0,0235	-0,61	

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

4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,680	0,0465	1,21	0,52	
202	FTIR	0,707	0,0735	1,91	0,82	
203	FTIR	0,741	0,1075	2,80	1,21	
204	FTIR	0,730	0,0965	2,51	1,08	
205	FTIR	0,670	0,0365	0,95	0,41	
207	FTIR	0,600	-0,0335	-0,87	-0,38	
208	FTIR	0,675	0,0415	1,08	0,47	
209	FTIR	0,750	0,1165	3,04	1,31	
210	FTIR	0,840	0,2065	5,38	2,32	
211	FTIR	0,562	-0,0715	-1,86	-0,80	
212	FTIR	0,630	-0,0035	-0,09	-0,04	
213	FTIR	0,610	-0,0235	-0,61	-0,26	
215	FTIR	0,780	0,1465	3,82	1,64	
216	FTIR	0,530	-0,1035	-2,70	-1,16	
217	FTIR	0,450	-0,1835	-4,78	-2,06	
218	FTIR	0,640	0,0065	0,17	0,07	
219	FTIR	0,660	0,0265	0,69	0,30	
220	FTIR	0,850	0,2165	5,64	2,43	
222	FTIR	0,700	0,0665	1,73	0,75	
224	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
225	FTIR	0,600	-0,0335	-0,87	-0,38	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	0,735	0,1015	2,64	1,14	
227	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
228	FTIR	0,800	0,1665	4,34	1,87	
229	FTIR	0,730	0,0965	2,51	1,08	
230	FTIR	0,702	0,0685	1,78	0,77	
232	FTIR	0,800	0,1665	4,34	1,87	
234	FTIR	0,580	-0,0535	-1,39	-0,60	
235	FTIR	0,630	-0,0035	-0,09	-0,04	
236	FTIR	0,620	-0,0135	-0,35	-0,15	
237	FTIR	0,780	0,1465	3,82	1,64	
240	FTIR	0,750	0,1165	3,04	1,31	
241	FTIR	0,650	0,0165	0,43	0,19	
242	FTIR	0,730	0,0965	2,51	1,08	
243	FTIR	0,610	-0,0235	-0,61	-0,26	
244	FTIR	0,790	0,1565	4,08	1,76	
245	FTIR	0,760	0,1265	3,30	1,42	
246	FTIR	0,830	0,1965	5,12	2,21	
248	FTIR	0,780	0,1465	3,82	1,64	
249	FTIR	0,580	-0,0535	-1,39	-0,60	
250	FTIR	0,680	0,0465	1,21	0,52	
251	FTIR	0,720	0,0865	2,25	0,97	
253	FTIR	0,680	0,0465	1,21	0,52	
254	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
255	FTIR	0,770	0,1365	3,56	1,53	
256	FTIR	0,670	0,0365	0,95	0,41	
257	FTIR	0,480	-0,1535	-4,00	-1,72	
259	FTIR	0,630	-0,0035	-0,09	-0,04	
260	FTIR	0,590	-0,0435	-1,13	-0,49	
262	FTIR	0,730	0,0965	2,51	1,08	
263	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
264	FTIR	0,780	0,1465	3,82	1,64	
265	FTIR	0,820	0,1865	4,86	2,09	
266	FTIR	0,750	0,1165	3,04	1,31	
267	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
268	FTIR	0,970	0,3365	8,77	3,78	
269	FTIR	0,530	-0,1035	-2,70	-1,16	
270	FTIR	0,610	-0,0235	-0,61	-0,26	
271	FTIR	0,590	-0,0435	-1,13	-0,49	
273	FTIR	0,650	0,0165	0,43	0,19	
274	FTIR	0,680	0,0465	1,21	0,52	
275	FTIR	0,630	-0,0035	-0,09	-0,04	
276	FTIR	0,590	-0,0435	-1,13	-0,49	
277	FTIR	0,540	-0,0935	-2,44	-1,05	
278	FTIR	0,710	0,0765	1,99	0,86	
279	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
280	FTIR	0,580	-0,0535	-1,39	-0,60	
281	FTIR	0,720	0,0865	2,25	0,97	
282	FTIR	0,830	0,1965	5,12	2,21	
283	FTIR	0,630	-0,0035	-0,09	-0,04	
284	FTIR	0,670	0,0365	0,95	0,41	
285	FTIR	0,690	0,0565	1,47	0,63	
286	FTIR	0,620	-0,0135	-0,35	-0,15	
287	FTIR	0,670	0,0365	0,95	0,41	
328	FTIR	0,640	0,0065	0,17	0,07	
330	FTIR	0,710	0,0765	1,99	0,86	
337	FTIR	0,730	0,0965	2,51	1,08	

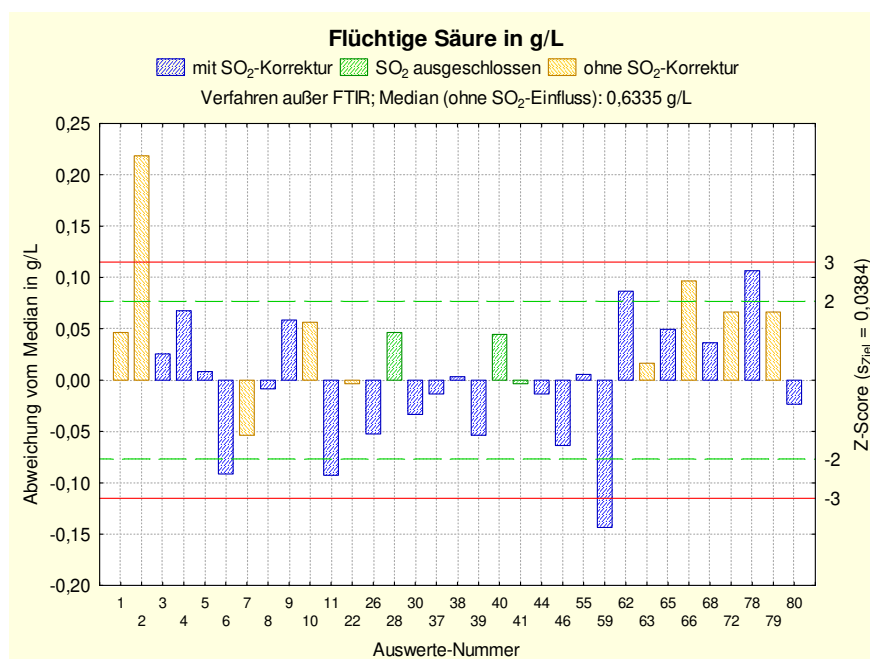
4.11.3 Deskriptive Ergebnisse

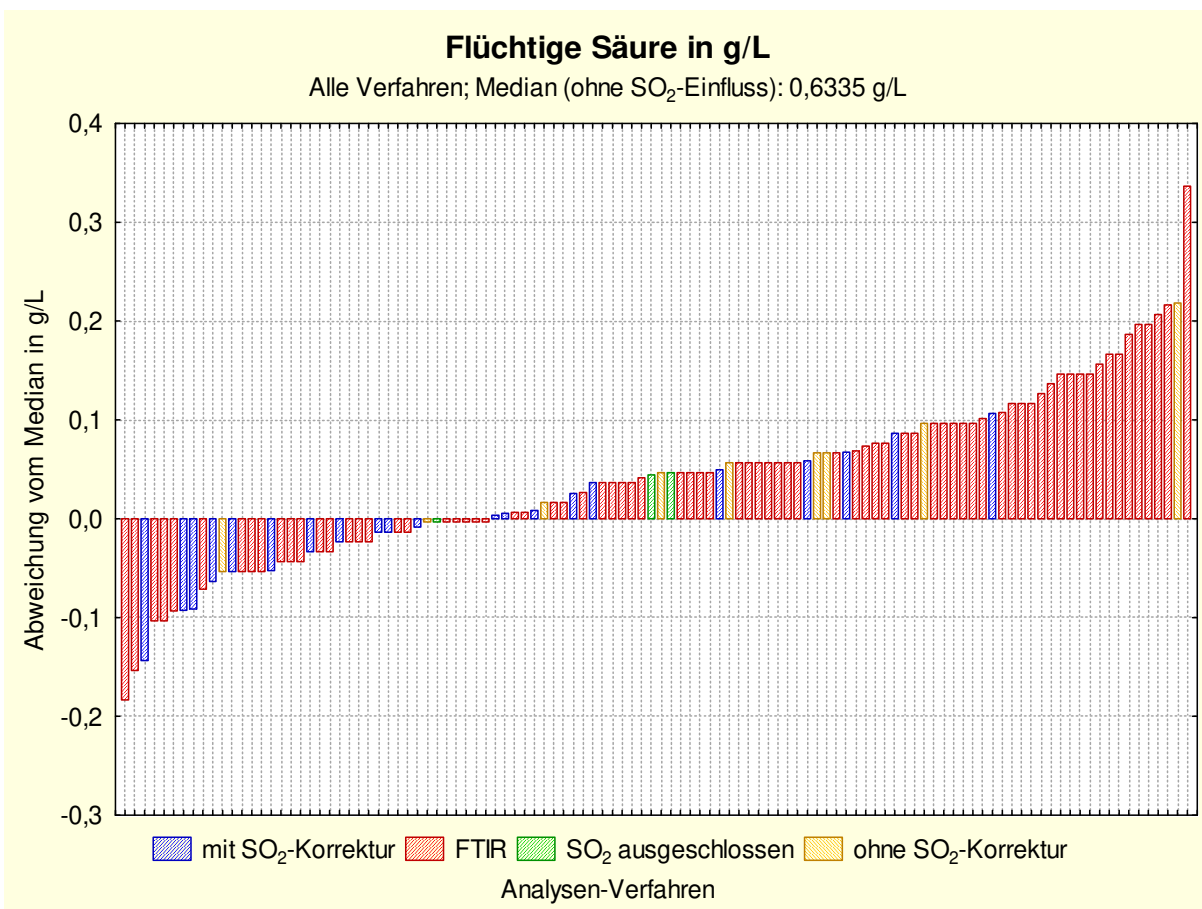
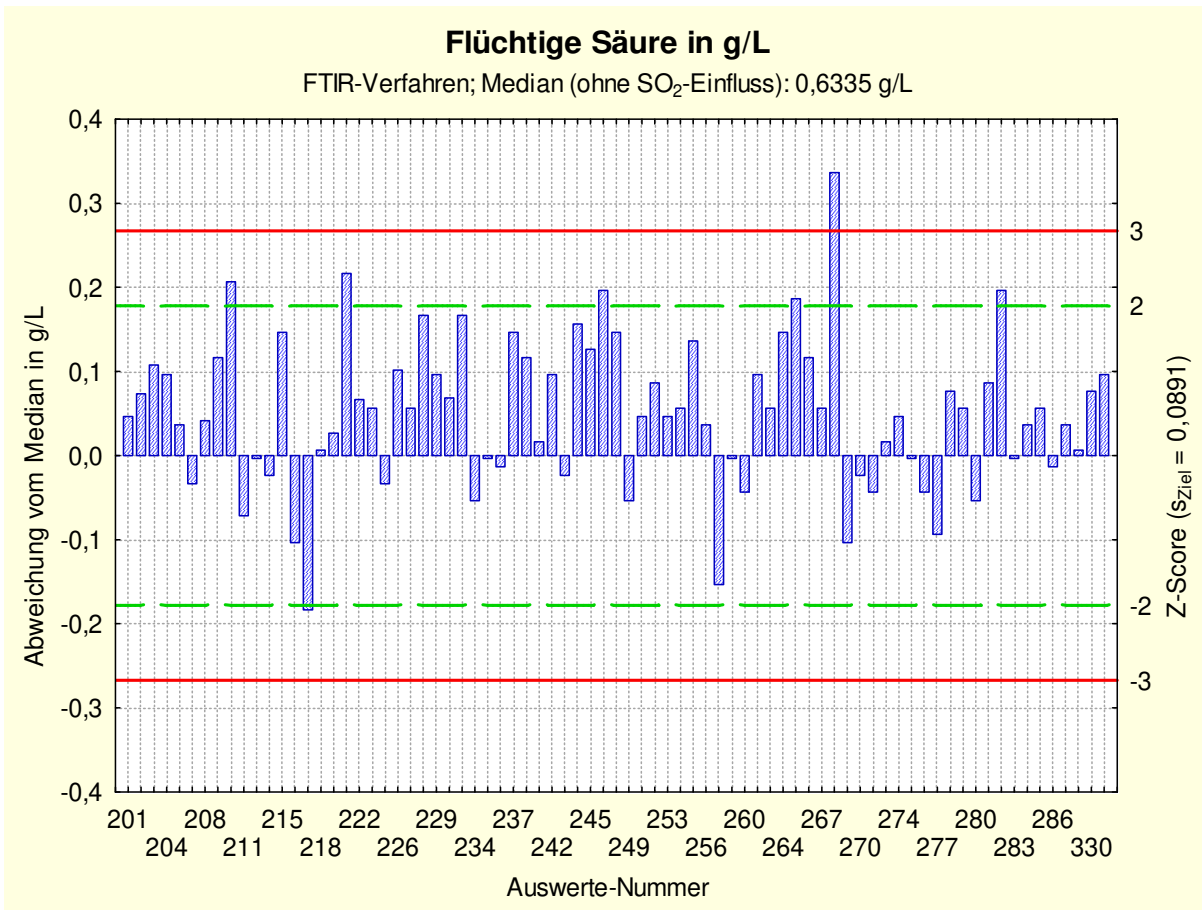
Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	0,490
Mittelwert	0,6312
Median	0,6335
Maximalwert	0,740
Standardabweichung (s _L)	0,061
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,038
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.}) ^{*)}	(0,0286)
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0891
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,58
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	(2,13)
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,68
Quotient (u _M /s _H)	0,32
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	(0,42)
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,14

^{*)} Die Bewertung der Laborergebnisse durch Z-Scores erfolgte mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz.

4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO ₂ unber.	Halbmikrodestillation n. AVV			
	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	6	0,6800	0,0406
Halbmikro SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,6800	
Halbmikro SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	3	0,6404	0,0936
Wädenswil SO ₂ unber.	Wädenswil-Verfahren			
	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,7000	
Wädenswil SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,5943	0,1105
Gerhardt SO ₂ ausg.	Destillationsapparat Gerhardt			
	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	2	0,6540	0,0385
Gerhardt SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	9	0,6325	0,0472
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	5	0,6202	0,0880
OIV o. SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 ohne SO ₂ -Korrektur	2	0,7160	0,2181
Rentschler mod. ausg.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,6390	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	24	0,6327	0,0628
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,6841	0,0867





4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

4.12.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: alle herkömmlichen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,525	-0,065	-1,80	
02	HPLC	0,486	-0,104	-2,88	
03	HPLC	0,630	0,040	1,11	
05	enzymat. autom.	0,601	0,011	0,30	
06	HPLC	0,416	-0,174	-4,82	
10	enzymat. autom.	0,550	-0,040	-1,11	
13	enzymat. autom.	0,620	0,030	0,83	
15	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
16	enzymat. autom.	0,420	-0,170	-4,70	
19	enzymat. autom.	0,580	-0,010	-0,28	
23	HPLC	0,610	0,020	0,55	
26	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
27	enzymat. autom.	0,619	0,029	0,81	
30	enzymat. autom.	0,650	0,060	1,66	
38	enzymat. autom.	0,630	0,040	1,11	
41	enzymat. autom.	0,630	0,040	1,11	
44	enzymat. autom.	0,520	-0,070	-1,94	
45	enzymat. autom.	0,670	0,080	2,21	
46	enzymat. autom.	0,540	-0,050	-1,38	
49	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
52	enzymat. autom.	0,650	0,060	1,66	
54	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
55	enzymat. autom.	0,610	0,020	0,55	
58	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
60	enzymat. autom.	0,590	0,000	0,00	
61	enzymat. Hand	0,534	-0,056	-1,55	
62	enzymat. autom.	0,541	-0,049	-1,36	
68	enzymat. autom.	0,530	-0,060	-1,66	
78	enzymat. autom.	0,520	-0,070	-1,94	
102	enzymat. autom.	0,570	-0,020	-0,55	
111	NMR	0,583	-0,007	-0,18	
112	NMR	0,634	0,044	1,21	
113	NMR	0,590	0,000	0,00	
114	NMR	0,581	-0,009	-0,26	
115	NMR	0,507	-0,083	-2,30	
116	NMR	0,587	-0,003	-0,08	
117	NMR	0,613	0,023	0,64	
221	FTIR	0,635	0,045	1,25	
223	FTIR	0,635	0,045	1,25	
241	FTIR	0,620	0,030	0,83	
258	FTIR	0,800	0,210	5,81	(***)
259	FTIR	0,600	0,010	0,28	
321	FTIR	0,650	0,060	1,66	

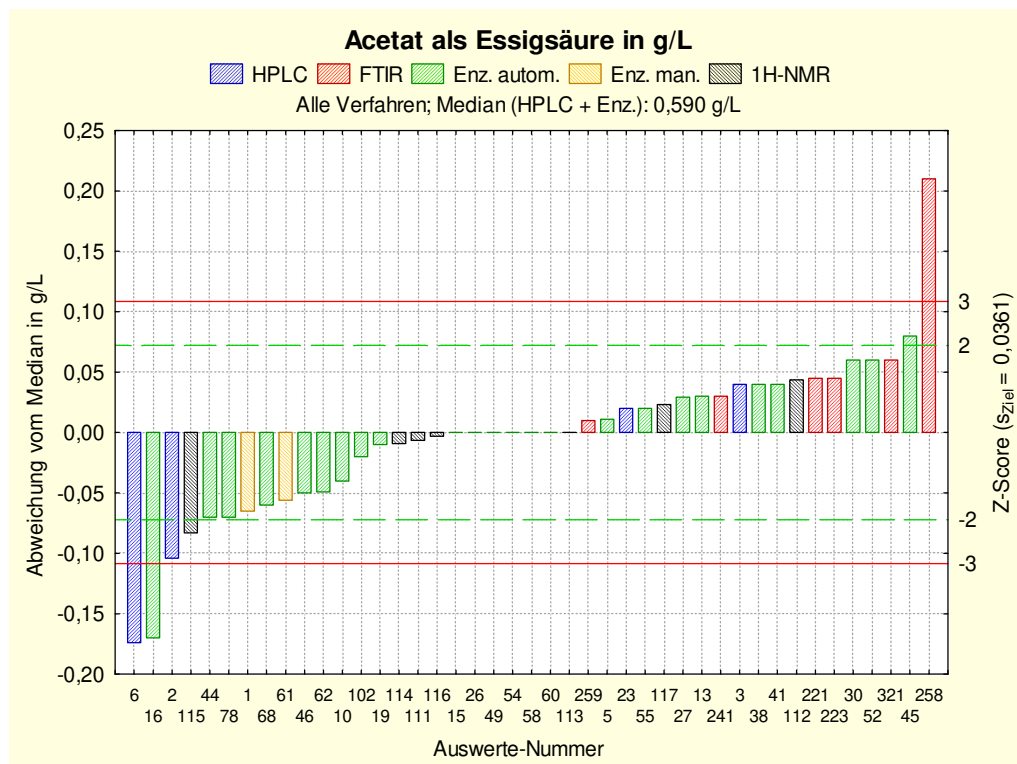
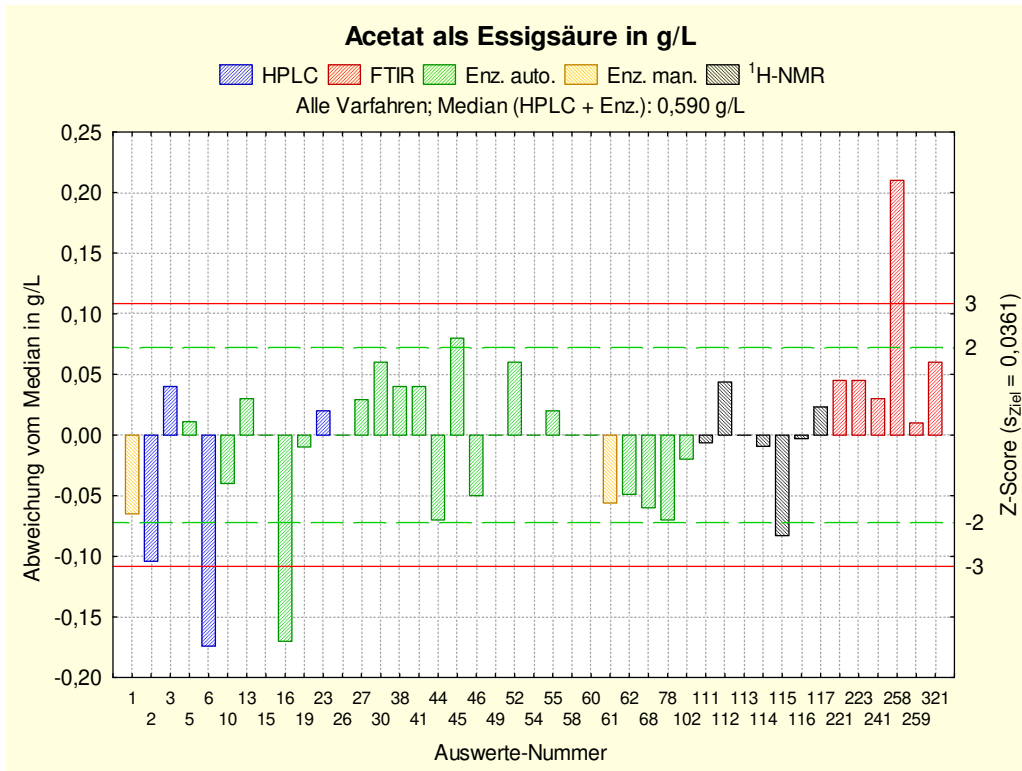
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

4.12.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L] Verfahren außer NMR + FTIR	alle Daten
Gültige Werte	30
Minimalwert	0,416
Mittelwert	0,573
Median	0,590
Maximalwert	0,670
Standardabweichung (s _L)	0,062
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,036
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,71
Quotient (u _M /s _H)	0,31

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,5355	0,1157
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	24	0,5864	0,0495
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,5295	0,0072
	alle herkömmlichen Verfahren	30	0,5782	0,0561
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	7	0,5896	0,0313
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,6384	0,0335



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

4.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,340	0,060	3,13	2,40	
02	HPLC	0,648	0,368	19,18	14,71	(*)
03	HPLC	0,230	-0,050	-2,61	-2,00	
06	HPLC	0,132	-0,148	-7,71	-5,92	(*)
07	enzymat. Hand	0,290	0,010	0,52	0,40	
22	HPLC	0,200	-0,080	-4,17	-3,20	
23	HPLC	0,230	-0,050	-2,61	-2,00	
33	IC	0,280	0,000	0,00	0,00	
39	IC	0,280	0,000	0,00	0,00	
58	HPLC	0,300	0,020	1,04	0,80	
62	HPLC	0,420	0,140	7,30	5,60	(**)
97	HPLC	0,220	-0,060	-3,13	-2,40	
111	NMR	0,289	0,009	0,49	0,38	
112	NMR	0,294	0,014	0,75	0,58	
113	NMR	0,258	-0,022	-1,15	-0,88	
114	NMR	0,277	-0,003	-0,16	-0,12	
115	NMR	0,250	-0,030	-1,56	-1,20	
116	NMR	0,288	0,008	0,41	0,31	
117	NMR	0,283	0,003	0,16	0,12	

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

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

4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,343	0,021	0,97	0,81	
02	enz.(L-), autom.	0,333	0,011	0,51	0,42	
03	enz.(L-), autom.	0,355	0,033	1,53	1,27	
04	enz.(L-), autom.	0,280	-0,042	-1,94	-1,61	
05	enz.(L-), autom.	0,322	0,000	0,00	0,00	
07	enz.(L-) Hand	0,280	-0,042	-1,94	-1,61	
08	enz.(L-) Hand	0,298	-0,024	-1,11	-0,92	
09	enz.(L-), autom.	0,331	0,009	0,42	0,35	
10	enz.(L-), autom.	0,330	0,008	0,37	0,31	
11	enz.(L-), autom.	0,345	0,023	1,06	0,88	
13	enz.(L-), autom.	0,320	-0,002	-0,09	-0,08	
15	enz.(L-), autom.	0,330	0,008	0,37	0,31	
16	enz.(L-), autom.	0,300	-0,022	-1,02	-0,84	
19	enz.(L-), autom.	0,320	-0,002	-0,09	-0,08	
27	enz.(L-), autom.	0,300	-0,022	-1,02	-0,84	
30	enz.(L-), autom.	0,322	0,000	0,00	0,00	
38	enz.(L-), autom.	0,270	-0,052	-2,41	-1,99	
40	enz.(L-), autom.	0,290	-0,032	-1,48	-1,23	
41	enz.(L-), autom.	0,370	0,048	2,22	1,84	
42	enz.(L-), autom.	0,380	0,058	2,68	2,22	
44	enz.(L-), autom.	0,330	0,008	0,37	0,31	
45	enz.(L-), autom.	0,320	-0,002	-0,09	-0,08	
46	enz.(L-), autom.	0,400	0,078	3,61	2,99	
49	enz.(L-), autom.	0,290	-0,032	-1,48	-1,23	
52	enz.(L-), autom.	0,320	-0,002	-0,09	-0,08	
54	enz.(L-), autom.	0,300	-0,022	-1,02	-0,84	
55	enz.(L-), autom.	0,314	-0,008	-0,37	-0,31	
58	enz.(L-), autom.	0,360	0,038	1,76	1,46	
60	enz.(L-), autom.	0,300	-0,022	-1,02	-0,84	
62	enz.(L-), autom.	0,329	0,007	0,32	0,27	
63	enz.(L-) Hand	0,400	0,078	3,61	2,99	
68	enz.(L-), autom.	0,330	0,008	0,37	0,31	
78	enz.(L-) Hand	0,300	-0,022	-1,02	-0,84	
102	enz.(L-), autom.	0,400	0,078	3,61	2,99	
109	enz.(L-), autom.	0,370	0,048	2,22	1,84	

4.13.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,230	-0,050			
202	FTIR	0,118	-0,162			(*)
203	FTIR	0,420	0,140			
204	FTIR	0,060	-0,220			(*)
205	FTIR	0,290	0,010			
207	FTIR	0,300	0,020			
208	FTIR	0,540	0,260			(*)
209	FTIR	<= 0				
210	FTIR	0,060	-0,220			(*)
211	FTIR	0,210	-0,070			
212	FTIR	0,270	-0,010			
213	FTIR	0,280	0,000			
215	FTIR	0,600	0,320			(*)
216	FTIR	0,130	-0,150			(*)
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	0,010	-0,270			(*)
219	FTIR	0,140	-0,140			
220	FTIR	<= 0				
221	FTIR	<= 0				
222	FTIR	-0,180	-0,460			(*)
223	FTIR	0,624	0,344			(*)
224	FTIR	<= 0				
225	FTIR	0,070	-0,210			(*)
226	FTIR	0,170	-0,110			
227	FTIR	0,100	-0,180			(*)
228	FTIR	-0,150	-0,430			(*)
229	FTIR	<= 0				
230	FTIR	<= 0				
232	FTIR	-0,020	-0,300			(*)
234	FTIR	0,260	-0,020			
236	FTIR	0,200	-0,080			
237	FTIR	0,050	-0,230			(*)
240	FTIR	-0,050	-0,330			(*)
241	FTIR	0,330	0,050			
242	FTIR	0,370	0,090			
243	FTIR	0,400	0,120			
244	FTIR	-0,190	-0,470			(*)
245	FTIR	0,290	0,010			
246	FTIR	0,100	-0,180			(*)
248	FTIR	0,100	-0,180			(*)
249	FTIR	-0,300	-0,580			(*)
250	FTIR	<= 0				
251	FTIR	0,100	-0,180			(*)
253	FTIR	<= 0				
254	FTIR	<= 0				
255	FTIR	-0,150	-0,430			(*)
256	FTIR	-0,160	-0,440			(*)
257	FTIR	<= 0				
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	<= 0				
260	FTIR	<= 0				
263	FTIR	<= 0				
264	FTIR	1,200	0,920			(*)
265	FTIR	0,280	0,000			
266	FTIR	0,130	-0,150			(*)
267	FTIR	0,140	-0,140			
268	FTIR	0,410	0,130			
269	FTIR	-0,050	-0,330			(*)
270	FTIR	0,460	0,180			(*)
271	FTIR	-0,010	-0,290			(*)
273	FTIR	-0,190	-0,470			(*)
274	FTIR	-0,870	-1,150			(*)
275	FTIR	<= 0				

Die Messwerte liegen unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Daher erfolgt keine Auswertung.
 (*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	<= 0				
277	FTIR	0,030	-0,250			(*)
278	FTIR	0,100	-0,180			(*)
280	FTIR	0,080	-0,200			(*)
281	FTIR	<= 0				
282	FTIR	<= 0				
284	FTIR	0,350	0,070			
285	FTIR	0,200	-0,080			
286	FTIR	0,180	-0,100			
287	FTIR	0,200	-0,080			
321	FTIR	<= 0				
328	FTIR	0,130	-0,150			(*)
330	FTIR	0,300	0,020			
337	FTIR	0,060	-0,220			(*)

Die Messwerte liegen unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Daher erfolgt keine Auswertung.

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

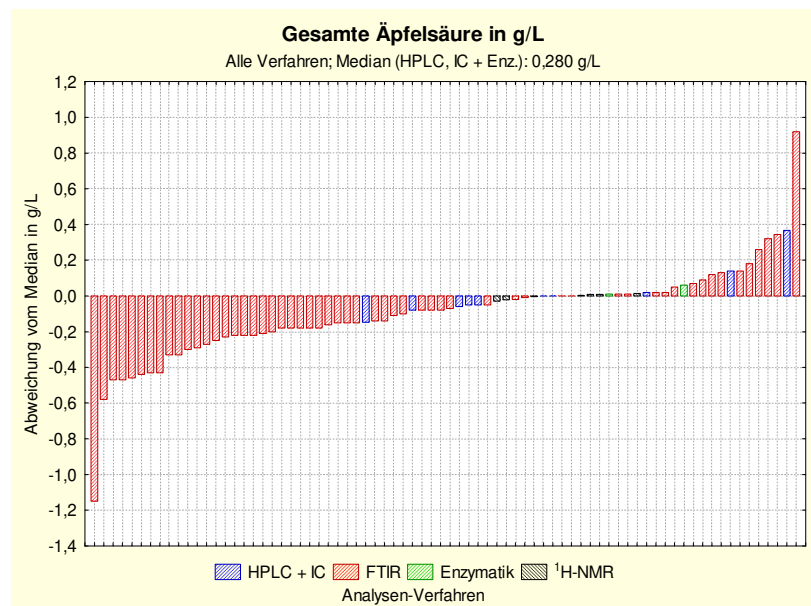
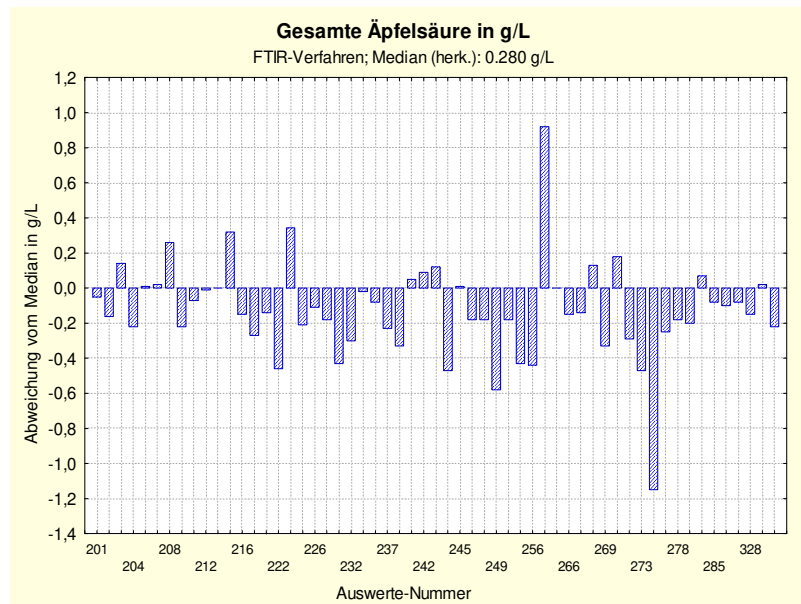
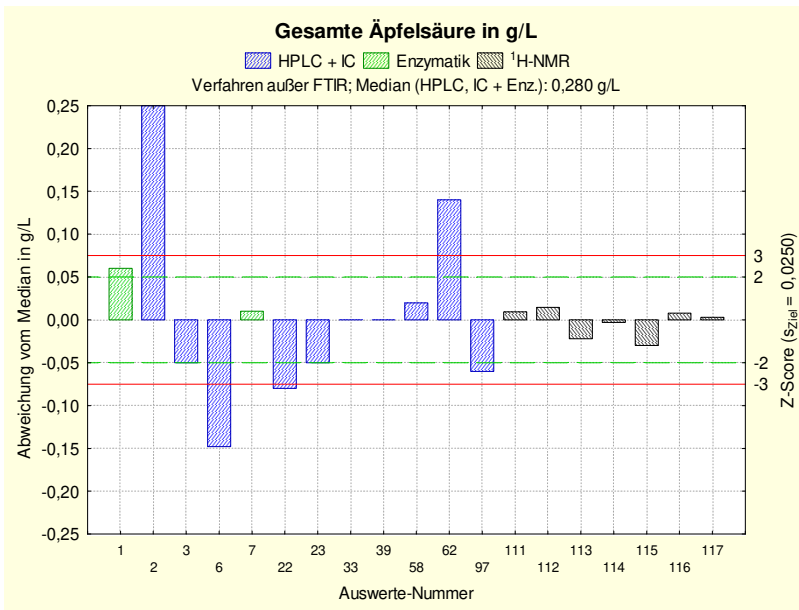
4.13.4 Deskriptive Ergebnisse

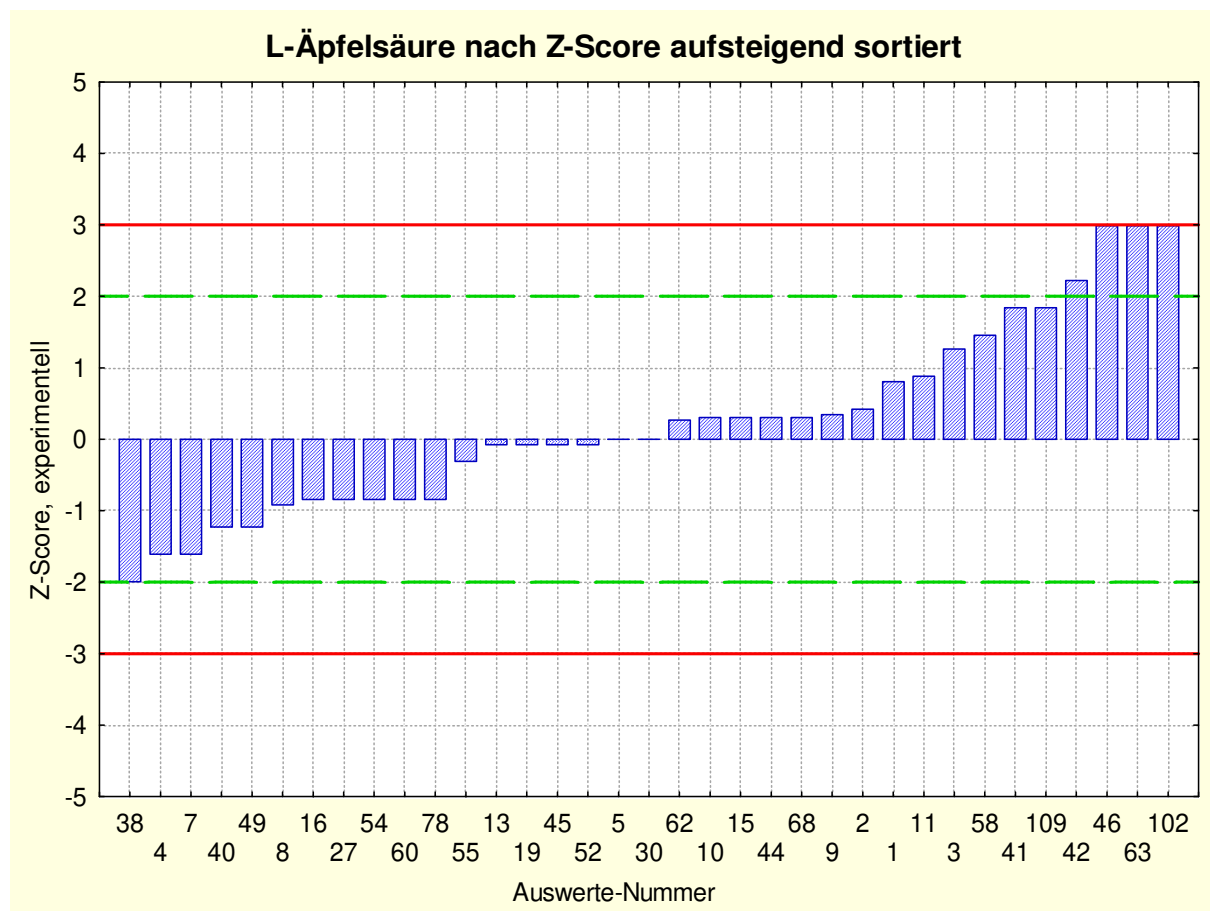
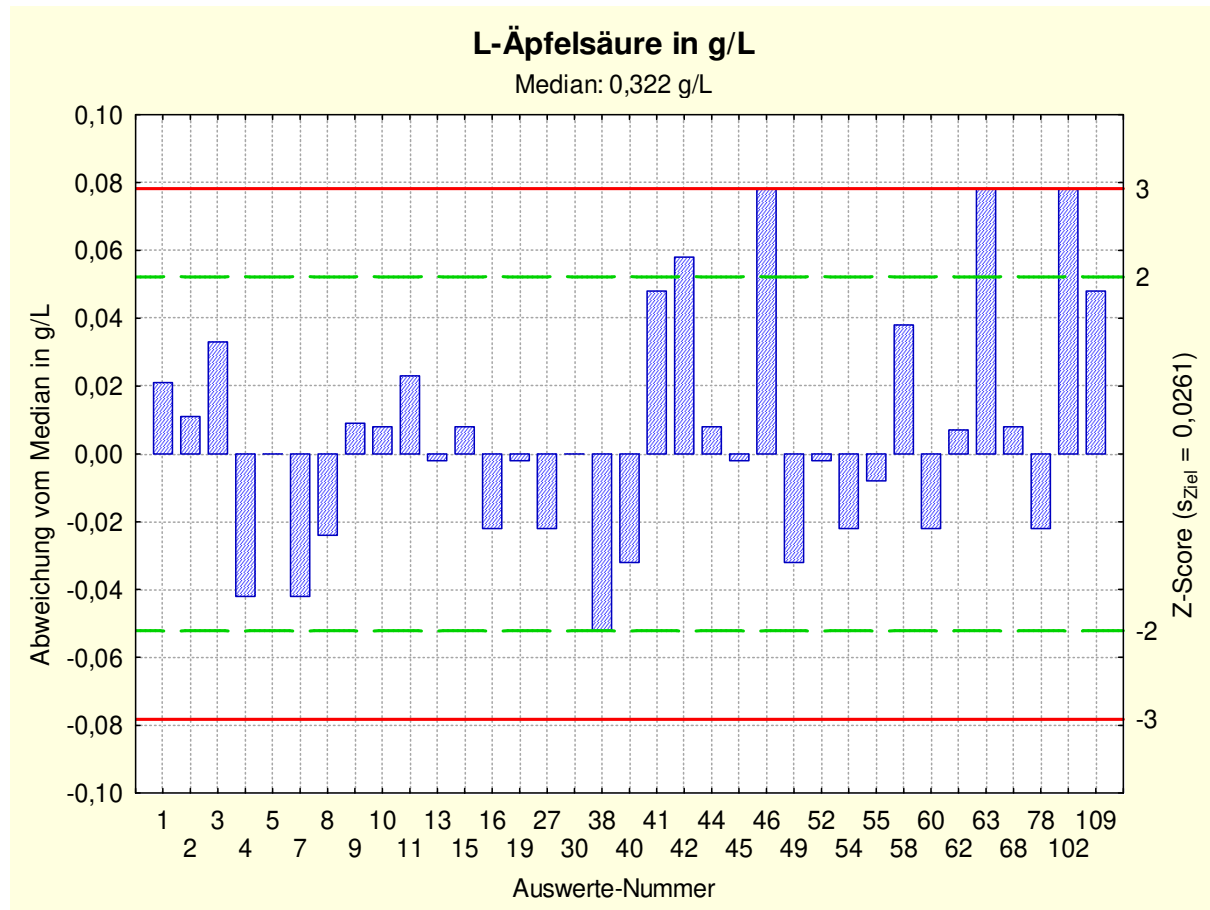
Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	ber. Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	10	9	35
Minimalwert	0,20	0,20	0,27
Mittelwert	0,279	0,263	0,328
Median	0,280	0,280	0,322
Maximalwert	0,42	0,34	0,40
Standardabweichung (s_L)	0,066	0,046	0,034
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,021	0,015	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,019	0,019	0,022
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,025	0,025	0,026
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}_{FTIR}}^*)$)	(0,218)	(0,218)	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	3,42	2,37	1,59
Quotient (s_L/s_{exp})	2,62	1,82	1,32
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$)	(0,30)	(0,22)	
Quotient (u_M/s_H)	1,08	0,79	0,27
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,83	0,61	0,22
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$)	(0,10)	(0,07)	

^{*)} Der Gehalt an Gesamter Äpfelsäure lag unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens.

4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	0,2712	0,2300
IC	Ionenchromatographie	2	0,2800	0,2800
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, manuell	2	0,3150	0,3150
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	12	0,2786	0,0964
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,1006	0,0700
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,2773	0,2830
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	30	0,3273	0,0325
enz.(L-), Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,3230	0,0521
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	35	0,3262	0,0344





4.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]**4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,36	0,195	1,30	
02	HPLC	3,21	0,050	0,33	
03	HPLC	2,98	-0,185	-1,23	
04	enzymat. autom.	3,18	0,020	0,13	
05	enzymat. autom.	3,16	0,000	0,00	
06	HPLC	3,33	0,174	1,16	
07	enzymat. Hand	3,35	0,189	1,26	
08	enzymat. Hand	3,27	0,114	0,76	
09	enzymat. autom.	3,23	0,070	0,47	
11	enzymat. autom.	3,17	0,010	0,07	
19	enzymat. autom.	3,10	-0,060	-0,40	
22	HPLC	2,02	-1,140	-7,58	(**)
23	HPLC	3,06	-0,100	-0,67	
58	HPLC	3,01	-0,150	-1,00	
62	enzymat. autom.	2,71	-0,452	-3,01	
63	enzymat. Hand	3,08	-0,080	-0,53	
68	enzymat. autom.	3,02	-0,140	-0,93	
97	HPLC	3,07	-0,090	-0,60	
111	NMR	2,87	-0,291	-1,94	
112	NMR	3,21	0,048	0,32	
113	NMR	3,02	-0,140	-0,93	
114	NMR	2,92	-0,244	-1,62	
115	NMR	2,96	-0,200	-1,33	
116	NMR	2,96	-0,195	-1,30	

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

4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,66	0,127	1,02	0,97	
02	enz.(L-) autom.	2,53	-0,007	-0,06	-0,05	
03	enz.(L-) autom.	2,68	0,144	1,16	1,10	
04	enz.(L-) autom.	2,51	-0,023	-0,18	-0,18	
05	enz.(L-) autom.	2,50	-0,033	-0,26	-0,25	
07	enz.(L-) Hand	2,64	0,108	0,87	0,83	
08	enz.(L-) Hand	2,58	0,047	0,38	0,36	
09	enz.(L-) autom.	2,70	0,167	1,34	1,28	
10	enz.(L-) autom.	2,66	0,127	1,02	0,97	
11	enz.(L-) autom.	2,44	-0,098	-0,79	-0,75	
13	enz.(L-) autom.	2,54	0,007	0,06	0,05	
15	enz.(L-) autom.	2,50	-0,034	-0,27	-0,26	
16	enz.(L-) autom.	2,80	0,267	2,14	2,04	
19	enz.(L-) autom.	2,47	-0,063	-0,51	-0,48	
27	enz.(L-) autom.	2,80	0,267	2,14	2,04	
30	enz.(L-) autom.	2,68	0,149	1,20	1,14	
38	enz.(L-) autom.	2,27	-0,263	-2,11	-2,01	
40	enz.(L-) autom.	2,48	-0,058	-0,47	-0,44	
41	enz.(L-) autom.	2,58	0,047	0,38	0,36	
42	enz.(L-) autom.	2,91	0,377	3,03	2,89	
44	enz.(L-) autom.	2,49	-0,043	-0,35	-0,33	
45	enz.(L-) autom.	2,67	0,137	1,10	1,05	
46	enz.(L-) autom.	0,54	-1,993	-16,00	-15,26	(*)
49	enz.(L-) autom.	2,30	-0,233	-1,87	-1,78	
54	enz.(L-) autom.	2,60	0,067	0,54	0,51	
55	enz.(L-) autom.	2,40	-0,138	-1,11	-1,06	
58	enz.(L-) autom.	2,62	0,087	0,70	0,67	
60	enz.(L-) autom.	2,20	-0,333	-2,67	-2,55	
62	enz.(L-) autom.	3,40	0,869	6,98	6,66	(**)
63	enz.(L-) Hand	2,46	-0,073	-0,59	-0,56	
68	enz.(L-) autom.	2,41	-0,123	-0,99	-0,94	
78	enz.(L-) Hand	2,52	-0,013	-0,10	-0,10	
102	enz.(L-) autom.	2,91	0,377	3,03	2,89	
109	enz.(L-) autom.	2,39	-0,140	-1,12	-1,07	

Anmerkungen zur vorseitigen Tabelle für Laborergebnisse L-Milchsäure:

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

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

4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,09	-0,070	-0,47	-0,33	
202	FTIR	2,92	-0,238	-1,58	-1,14	
203	FTIR	2,96	-0,200	-1,33	-0,96	
204	FTIR	3,03	-0,130	-0,86	-0,62	
205	FTIR	3,38	0,220	1,46	1,05	
207	FTIR	3,00	-0,160	-1,06	-0,77	
208	FTIR	3,34	0,180	1,20	0,86	
209	FTIR	2,80	-0,360	-2,39	-1,72	
210	FTIR	2,44	-0,720	-4,79	-3,44	
211	FTIR	3,01	-0,150	-1,00	-0,72	
212	FTIR	2,45	-0,710	-4,72	-3,40	
213	FTIR	2,78	-0,380	-2,53	-1,82	
215	FTIR	3,10	-0,060	-0,40	-0,29	
216	FTIR	2,55	-0,610	-4,06	-2,92	
217	FTIR	2,86	-0,300	-2,00	-1,44	
218	FTIR	2,79	-0,370	-2,46	-1,77	
219	FTIR	3,06	-0,100	-0,67	-0,48	
220	FTIR	2,50	-0,660	-4,39	-3,16	
221	FTIR	3,09	-0,070	-0,47	-0,33	
222	FTIR	2,13	-1,030	-6,85	-4,93	
223	FTIR	3,03	-0,129	-0,86	-0,62	
224	FTIR	2,80	-0,360	-2,39	-1,72	
225	FTIR	2,85	-0,310	-2,06	-1,48	
226	FTIR	2,65	-0,510	-3,39	-2,44	
227	FTIR	2,90	-0,260	-1,73	-1,24	
228	FTIR	2,74	-0,420	-2,79	-2,01	
229	FTIR	3,04	-0,120	-0,80	-0,57	
230	FTIR	3,17	0,010	0,07	0,05	
232	FTIR	2,86	-0,300	-2,00	-1,44	
234	FTIR	3,29	0,130	0,86	0,62	
236	FTIR	2,70	-0,460	-3,06	-2,20	
237	FTIR	2,44	-0,720	-4,79	-3,44	
240	FTIR	2,80	-0,360	-2,39	-1,72	
241	FTIR	2,87	-0,290	-1,93	-1,39	
242	FTIR	3,24	0,080	0,53	0,38	
243	FTIR	2,50	-0,660	-4,39	-3,16	
244	FTIR	2,66	-0,500	-3,33	-2,39	
245	FTIR	2,79	-0,370	-2,46	-1,77	
246	FTIR	2,50	-0,660	-4,39	-3,16	
248	FTIR	3,00	-0,160	-1,06	-0,77	
249	FTIR	1,79	-1,370	-9,11	-6,56	(***)
250	FTIR	1,70	-1,460	-9,71	-6,99	(***)
251	FTIR	2,87	-0,290	-1,93	-1,39	
253	FTIR	2,80	-0,360	-2,39	-1,72	
254	FTIR	2,70	-0,460	-3,06	-2,20	
255	FTIR	2,81	-0,350	-2,33	-1,67	
256	FTIR	3,08	-0,080	-0,53	-0,38	
257	FTIR	2,33	-0,830	-5,52	-3,97	
258	FTIR	2,70	-0,460	-3,06	-2,20	
259	FTIR	2,20	-0,960	-6,39	-4,59	
260	FTIR	2,60	-0,560	-3,73	-2,68	
263	FTIR	3,20	0,040	0,27	0,19	
264	FTIR	3,26	0,100	0,67	0,48	
265	FTIR	2,26	-0,900	-5,99	-4,31	
266	FTIR	0,75	-2,410	-16,03	-11,53	(*)
267	FTIR	2,88	-0,280	-1,86	-1,34	
268	FTIR	2,12	-1,040	-6,92	-4,98	
269	FTIR	2,41	-0,750	-4,99	-3,59	
270	FTIR	2,61	-0,550	-3,66	-2,63	

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

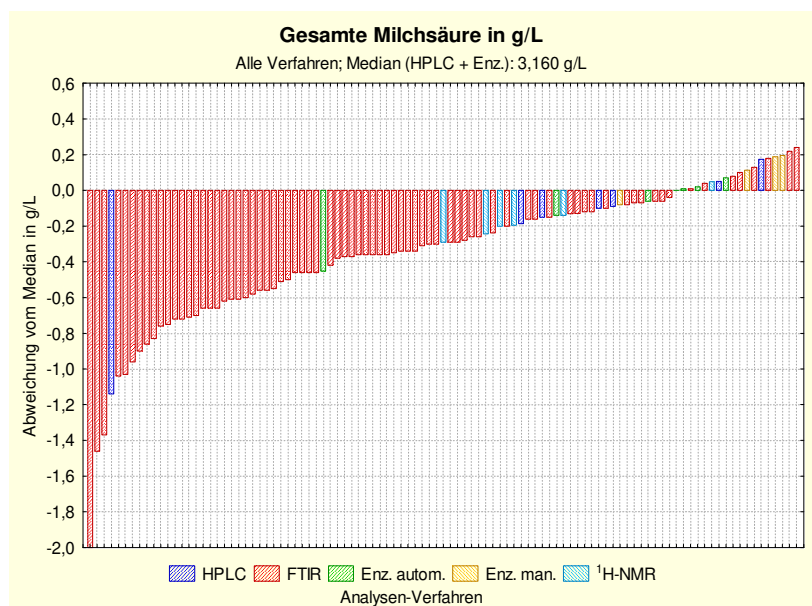
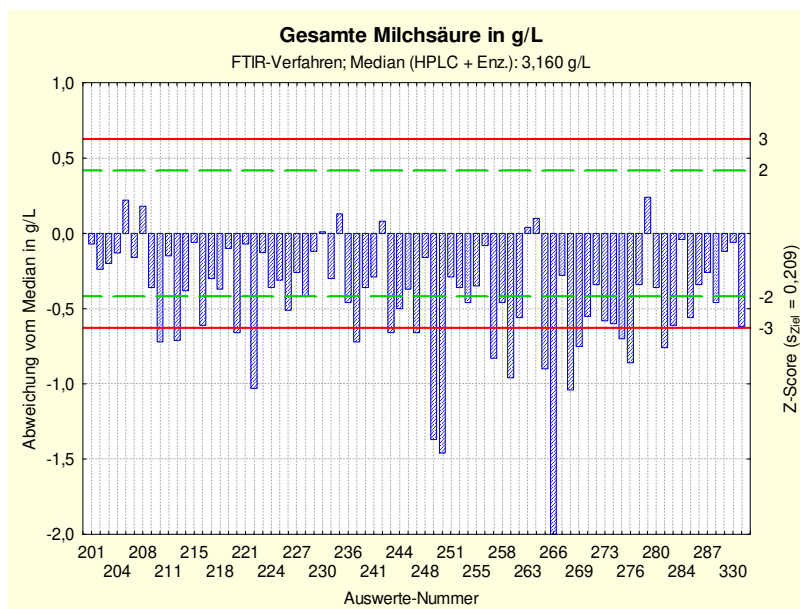
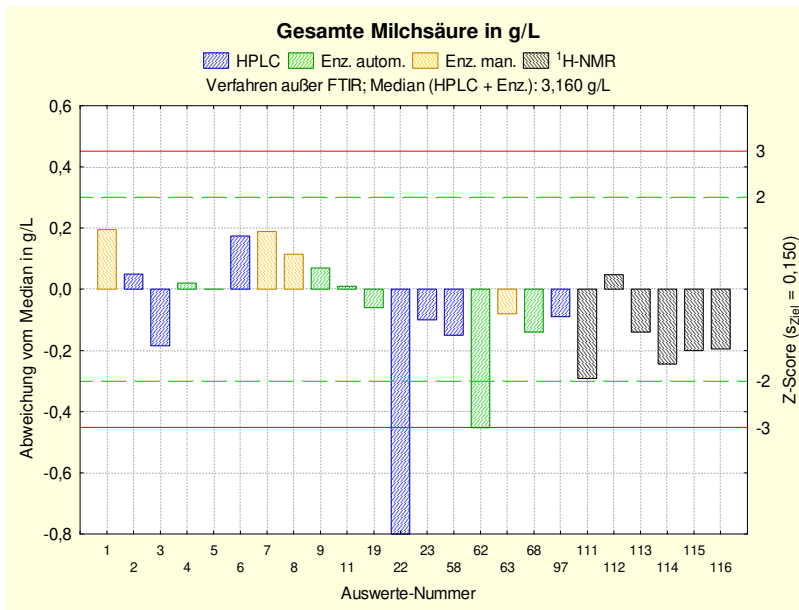
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
271	FTIR	2,82	-0,340	-2,26	-1,63	
273	FTIR	2,58	-0,580	-3,86	-2,78	
274	FTIR	2,56	-0,600	-3,99	-2,87	
275	FTIR	2,46	-0,700	-4,66	-3,35	
276	FTIR	2,30	-0,860	-5,72	-4,11	
277	FTIR	2,82	-0,340	-2,26	-1,63	
278	FTIR	3,40	0,240	1,60	1,15	
280	FTIR	2,80	-0,360	-2,39	-1,72	
281	FTIR	2,40	-0,760	-5,06	-3,64	
282	FTIR	2,55	-0,610	-4,06	-2,92	
284	FTIR	3,12	-0,040	-0,27	-0,19	
285	FTIR	2,60	-0,560	-3,73	-2,68	
286	FTIR	2,82	-0,340	-2,26	-1,63	
287	FTIR	2,90	-0,260	-1,73	-1,24	
321	FTIR	2,70	-0,460	-3,06	-2,20	
328	FTIR	3,04	-0,120	-0,80	-0,57	
330	FTIR	3,10	-0,060	-0,40	-0,29	
337	FTIR	2,54	-0,620	-4,12	-2,97	

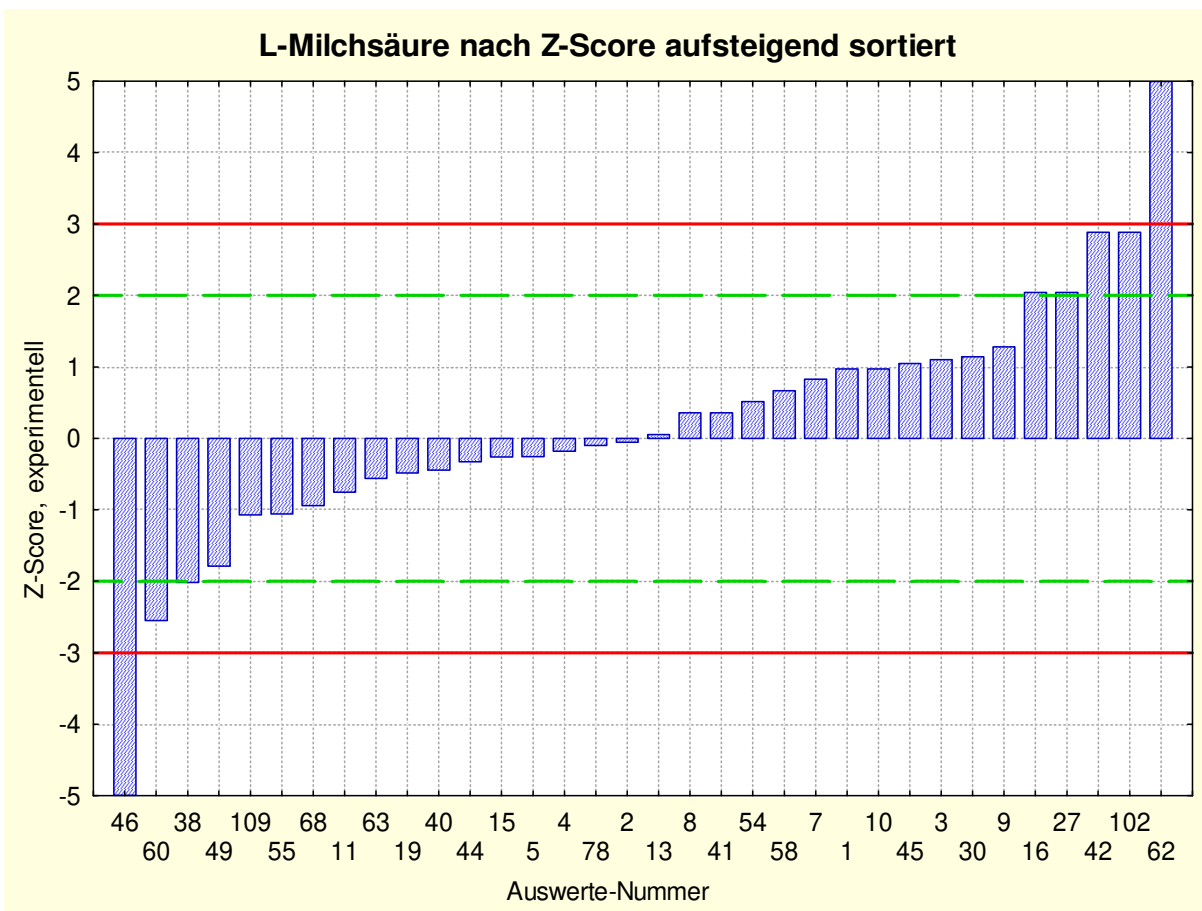
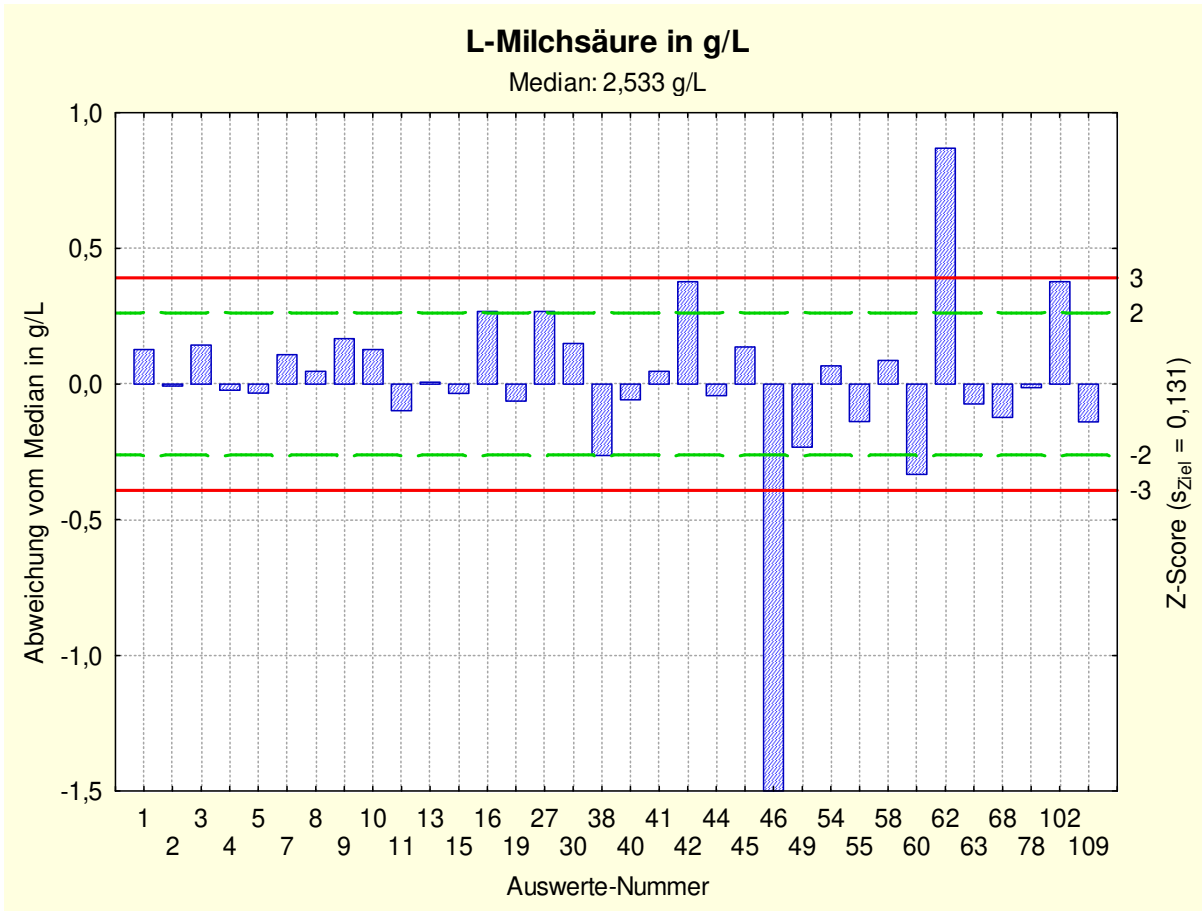
4.14.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	17	33	32
Minimalwert	2,02	2,71	2,20	2,20
Mittelwert	3,072	3,134	2,584	2,559
Median	3,130	3,160	2,540	2,533
Maximalwert	3,36	3,36	3,40	2,91
Standardabweichung (s _L)	0,306	0,163	0,221	0,168
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,072	0,039	0,038	0,030
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,149	0,150	0,125	0,125
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,131	0,131
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,209	0,209		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,05	1,08	1,77	1,35
Quotient (s _L /s _{exp})			1,69	1,28
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,47	0,78		
Quotient (u _M /s _H)	0,48	0,26	0,31	0,24
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,29	0,23
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,35	0,19		

4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes	
			Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	3,056	0,204
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	7	3,117	0,111
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	4	3,270	0,135
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	18	3,130	0,168
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	2,770	0,333
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,977	0,104
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	29	2,555	0,210
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	2,572	0,095
	alle Verfahren L-Milchsäure	34	2,557	0,184





4.15 Reduktone [mg/L]

4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	3,0	-10,00	-7,07	(*)
10	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-8,00	-5,66	(*)
15	Glyoxal/potentiometr.	13,0	0,00	0,00	
18	Glyoxal/Stärke	14,0	1,00	0,71	
19	Glyoxal/potentiometr.	23,6	10,60	7,50	(*)
21	Glyoxal/Stärke	20,0	7,00	4,95	
22	Glyoxal/potentiometr.	33,0	20,00	14,15	(*)
23	Glyoxal/Stärke	18,0	5,00	3,54	
24	Glyoxal/Stärke	22,0	9,00	6,37	(*)
26	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-3,00	-2,12	
27	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-4,00	-2,83	
30	Glyoxal/Stärke	15,0	2,00	1,41	
34	Glyoxal/Stärke	11,0	-2,00	-1,41	
36	Glyoxal/Stärke	14,0	1,00	0,71	
37	Glyoxal/potentiometr.	23,2	10,20	7,21	(*)
38	Glyoxal/Stärke	2,0	-11,00	-7,78	(*)
39	Glyoxal/potentiometr.	6,7	-6,30	-4,46	
40	Glyoxal/Stärke	11,5	-1,50	-1,06	
41	Glyoxal/Stärke	17,0	4,00	2,83	
42	Glyoxal/Stärke	14,0	1,00	0,71	
48	Glyoxal/Stärke	22,0	9,00	6,37	(*)
49	Glyoxal/Stärke	8,0	-5,00	-3,54	
51	Propionaldehyd/Stärke	22,0	9,00	6,37	(*)
55	Glyoxal/MTT	7,0	-6,00	-4,24	
58	Acetaldehyd/potent.	17,6	4,60	3,25	
59	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-1,00	-0,71	
60	Glyoxal/Stärke	12,0	-1,00	-0,71	
62	Acetaldehyd/Stärke	15,7	2,70	1,91	
63	Glyoxal/Stärke	18,0	5,00	3,54	
64	Glyoxal/Stärke	17,0	4,00	2,83	
65	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-6,00	-4,24	
66	Glyoxal/Stärke	22,0	9,00	6,37	(*)
67	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-3,00	-2,12	
68	Acetaldehyd/potent.	16,0	3,00	2,12	
70	Glyoxal/potentiometr.	13,0	0,00	0,00	
72	Glyoxal/Stärke	6,0	-7,00	-4,95	
73	Glyoxal/Stärke	10,0	-3,00	-2,12	
76	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-3,00	-2,12	
78	Acetaldehyd/Stärke	17,0	4,00	2,83	
80	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-6,00	-4,24	
83	Glyoxal/potentiometr.	15,0	2,00	1,41	
84	Glyoxal/potentiometr.	17,0	4,00	2,83	
86	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-6,00	-4,24	
96	Glyoxal/potentiometr.	15,0	2,00	1,41	

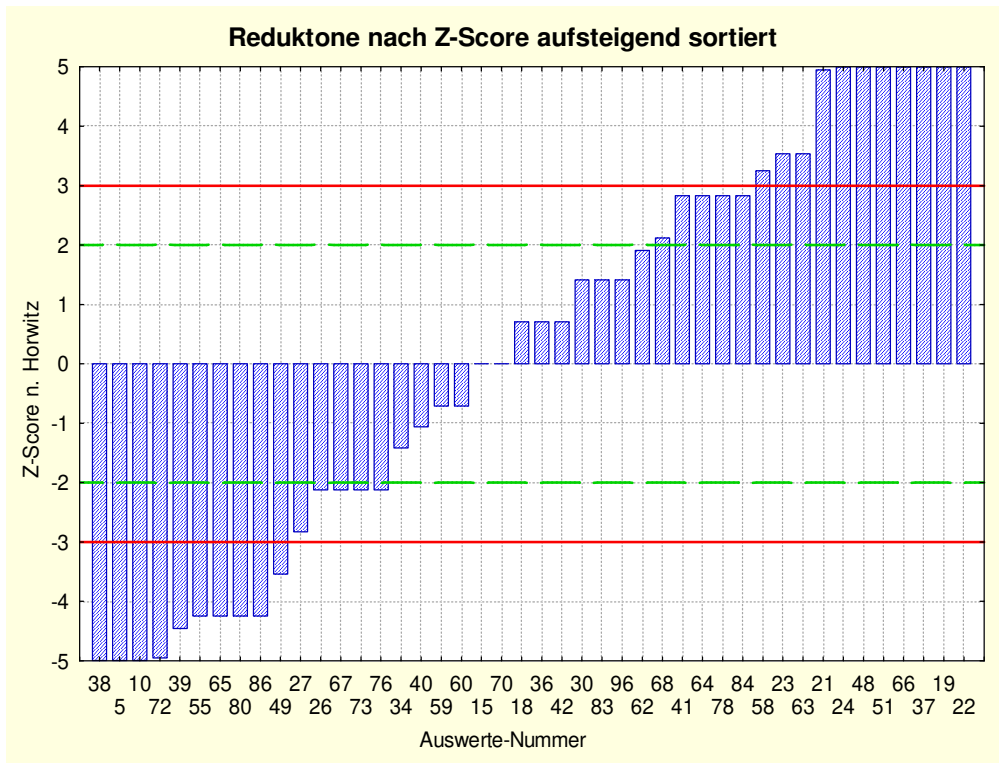
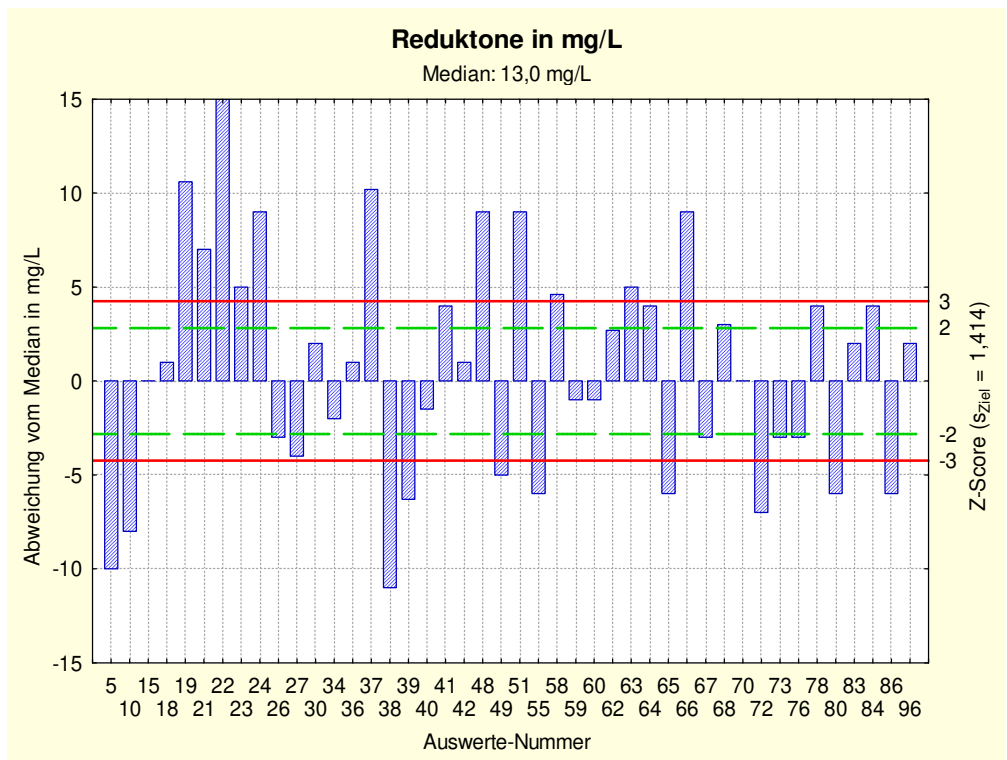
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	34
Minimalwert	6,0
Mittelwert	12,66
Median	13,00
Maximalwert	20,0
Standardabweichung (s_L)	4,006
Standardfehler des Mittelwertes	0,687
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,414
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,83
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 ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	2	16,350	1,042
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	3	13,263	7,006
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	1	22,000	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	19	14,598	5,817
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	18	12,229	5,948
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	7,000	
alle Verfahren		44	13,668	6,409



4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

4.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.2	33,0	3,80	1,35	
02	LwK 6.2	37,1	7,90	2,81	
04	LwK 6.3	39,0	9,80	3,49	
05	LwK 6.2	28,7	-0,50	-0,18	
06	LwK 6.2	31,7	2,48	0,88	
08	LwK 6.2	28,9	-0,30	-0,11	
09	LwK 6.2	30,4	1,20	0,43	
11	LwK 6.2	26,4	-2,80	-1,00	
13	LwK 6.3	21,0	-8,20	-2,92	
28	LwK 6.2	31,1	1,95	0,69	
41	LwK 6.3	24,0	-5,20	-1,85	
44	LwK 6.3	23,0	-6,20	-2,21	
45	LwK 6.3	34,0	4,80	1,71	
46	LwK 6.3	24,0	-5,20	-1,85	
52	LwK 6.3	21,0	-8,20	-2,92	
54	LwK 6.4	29,0	-0,20	-0,07	
55	LwK 6.4	29,2	0,00	0,00	
60	LwK 6.3	27,0	-2,20	-0,78	
74	LwK 6.4	27,0	-2,20	-0,78	
94	LwK 6.3	31,0	1,80	0,64	
97	LwK 6.2	33,1	3,90	1,39	
105	LwK 6.2	30,6	1,40	0,50	
106	LwK 6.2	31,0	1,80	0,64	
202	LwK 6.5	35,8	6,63	2,36	
205	LwK 6.5	23,0	-6,20	-2,21	
206	LwK 6.5	33,6	4,40	1,56	
208	LwK 6.5	28,4	-0,80	-0,28	
209	LwK 6.5	26,0	-3,20	-1,14	
210	LwK 6.5	27,0	-2,20	-0,78	
211	LwK 6.5	26,7	-2,46	-0,87	
213	LwK 6.5	18,0	-11,20	-3,98	
219	LwK 6.5	27,0	-2,20	-0,78	
220	LwK 6.5	31,0	1,80	0,64	
225	LwK 6.5	32,0	2,80	1,00	
237	LwK 6.5	26,0	-3,20	-1,14	
243	LwK 6.5	30,0	0,80	0,28	
248	LwK 6.5	30,0	0,80	0,28	
250	LwK 6.5	30,0	0,80	0,28	
251	LwK 6.5	31,0	1,80	0,64	
257	LwK 6.5	38,7	9,50	3,38	
261	LwK 6.5	37,9	8,73	3,11	
262	LwK 6.5	10,5	-18,70	-6,65	(*)
263	LwK 6.5	96,0	66,80	23,76	(*)
264	LwK 6.5	41,0	11,80	4,20	
265	LwK 6.5	23,0	-6,20	-2,21	
277	LwK 6.5	26,0	-3,20	-1,14	
278	LwK 6.5	32,0	2,80	1,00	
279	LwK 6.5	31,0	1,80	0,64	
280	LwK 6.5	27,0	-2,20	-0,78	
287	LwK 6.5	29,0	-0,20	-0,07	
328	LwK 6.5	29,2	0,00	0,00	
330	LwK 6.5	16,0	-13,20	-4,69	
337	LwK 6.5	26,0	-3,20	-1,14	

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

4.16.2 Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
10	Redox incl.	33,0	-3,00	-0,89	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-6,00	-1,79	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	4,00	1,19	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	4,00	1,19	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	3,00	0,89	
30	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-2,00	-0,60	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-2,00	-0,60	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	39,6	3,60	1,07	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	-5,00	-1,49	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	32,5	-3,50	-1,04	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	2,00	0,60	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	1,00	0,30	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	3,00	0,89	
53	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-2,00	-0,60	
59	Redox incl.	37,0	1,00	0,30	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	46,0	10,00	2,98	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	1,00	0,30	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	6,00	1,79	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	30,7	-5,30	-1,58	
73	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-2,00	-0,60	
76	Redox incl.	34,0	-2,00	-0,60	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	9,00	2,68	
79	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-2,00	-0,60	
83	Redox incl.	36,0	0,00	0,00	
84	Redox incl.	39,0	3,00	0,89	
86	Redox incl.	36,0	0,00	0,00	

4.16.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
15	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	-1,50	-0,62	-0,45	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	15,50	6,40	4,61	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	-2,50	-1,03	-0,74	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	22,9	-1,59	-0,66	-0,47	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	5,50	2,27	1,64	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	-3,50	-1,45	-1,04	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	31,3	6,80	2,81	2,02	
48	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-10,50	-4,34	-3,13	
58	LwK 6.1(excl.Red.)	16,1	-8,40	-3,47	-2,50	
62	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	4,50	1,86	1,34	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	15,50	6,40	4,61	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-0,50	-0,21	-0,15	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	9,50	3,92	2,83	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	5,50	2,27	1,64	
96	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	0,50	0,21	0,15	

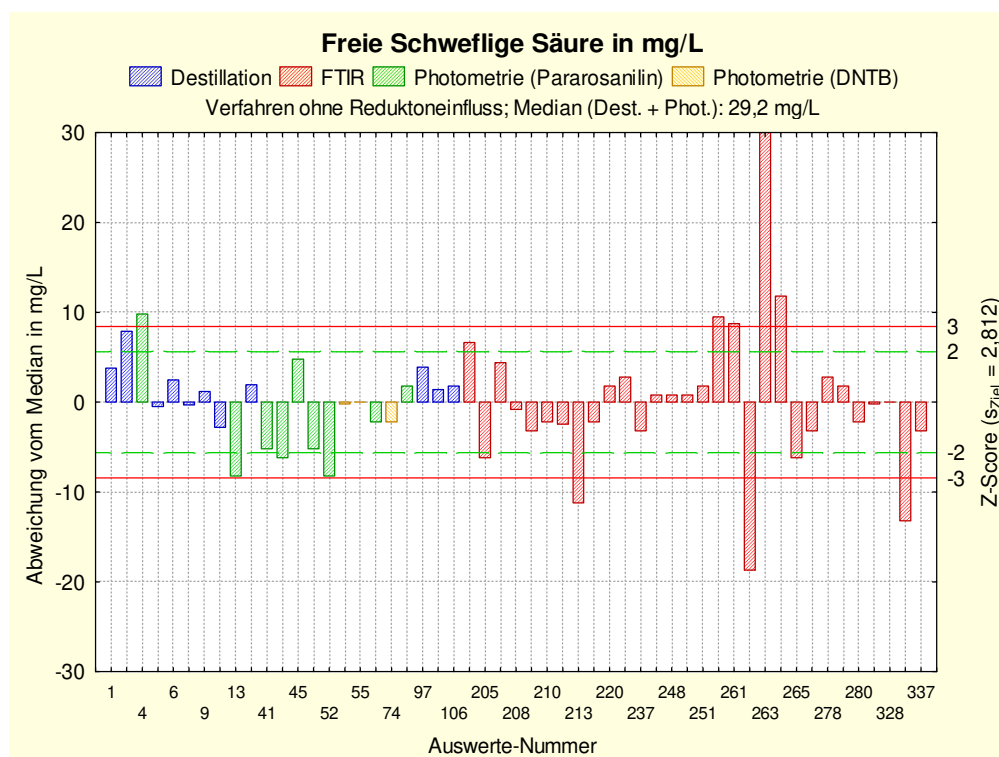
SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

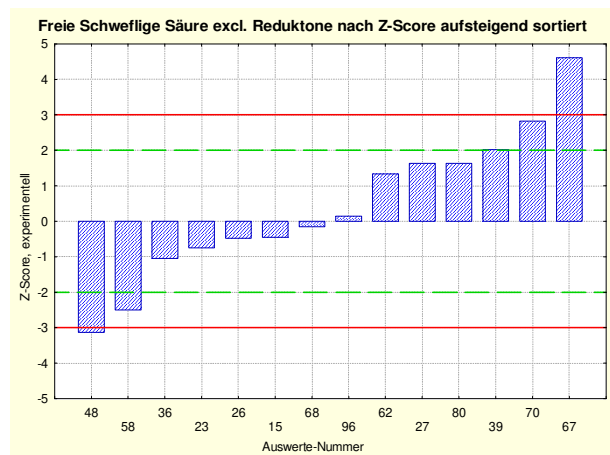
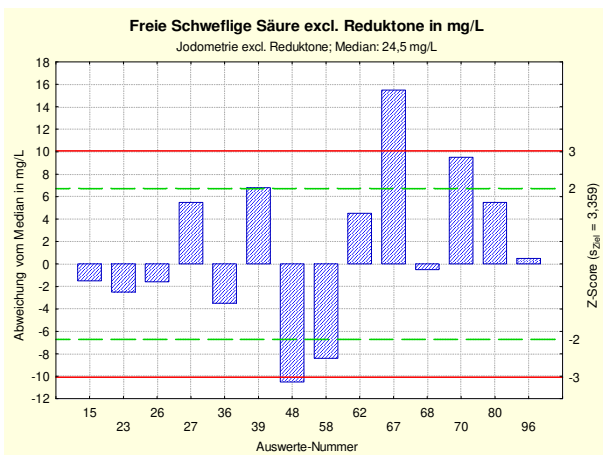
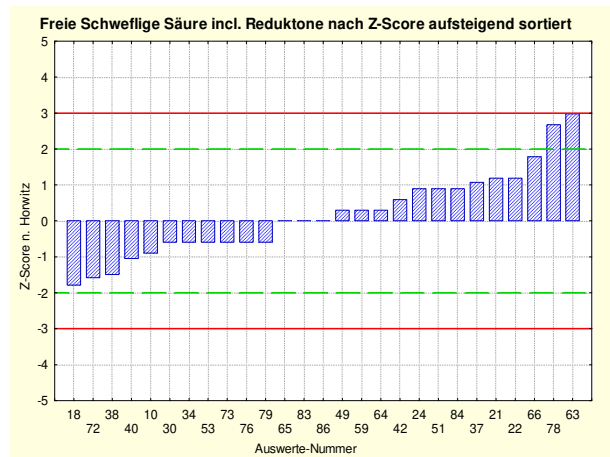
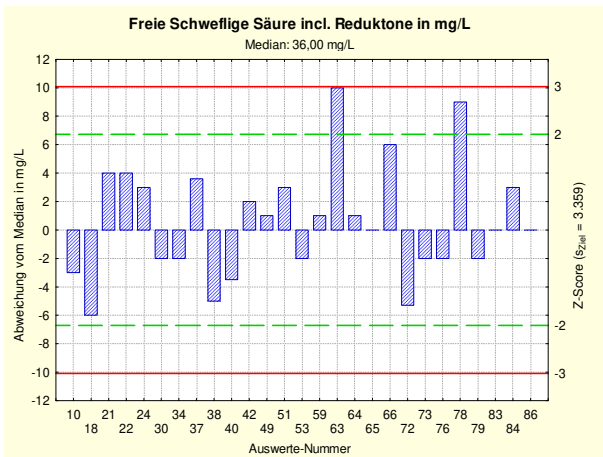
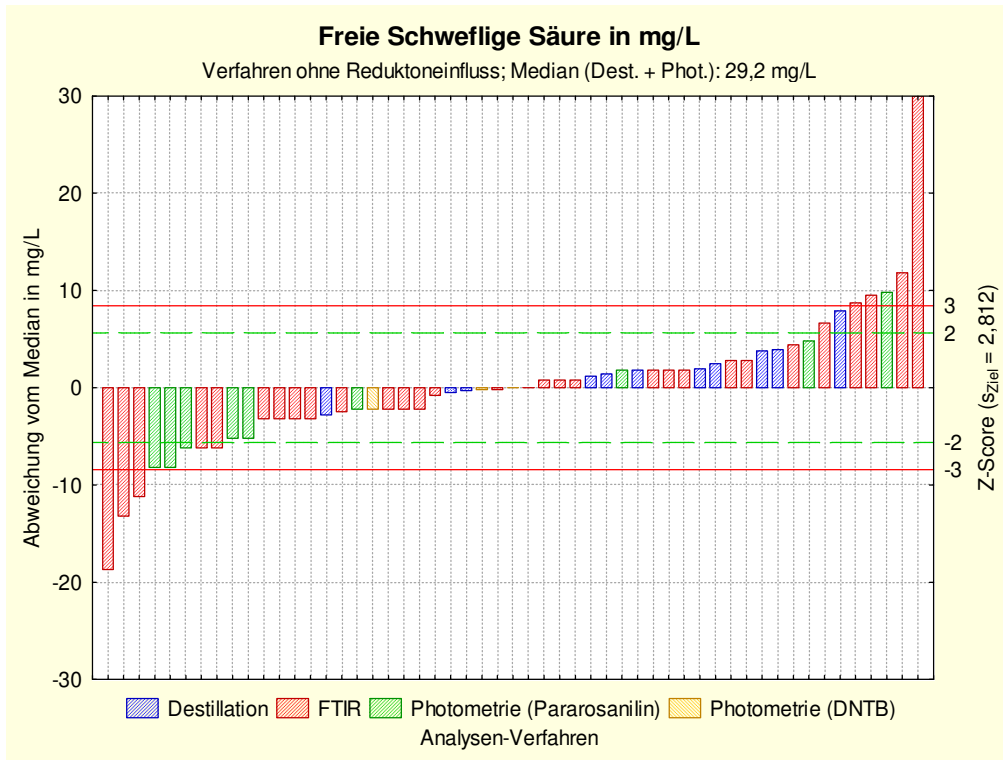
4.16.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation, Photometrie	Jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	23	27	14
Minimalwert	21,0	30,0	14,0
Mittelwert	29,18	36,59	25,88
Median	29,20	36,00	24,50
Maximalwert	39,0	46,0	40,0
Standardabweichung (s _L)	4,651	4,024	6,991
Standardfehler des Mittelwertes	0,970	0,774	1,869
Zielstandardabweichung			
- nach Horwitz (s _H)	2,812	3,359	2,422
- experimentell (s _H incl. Red.)			3,359
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,65	1,20	2,89
Quotient (s _L /s _H incl. Red.)			2,08
Quotient (u _M /s _H)	0,34	0,23	0,77
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,56

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	21	36,626	4,586
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	6	35,833	2,423
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	27	36,366	3,992
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - mit Abzug der Reduktone	14	25,690	7,245
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	30,948	2,416
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	9	26,545	5,985
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	28,515	1,155
	Destillations- und photometrische Verfahren	23	29,148	4,639
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	30	29,102	5,766





4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]**4.17.1 Laborergebnisse**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	106,0	6,00	0,75	1,12	
02	LwK 7.3	110,2	10,20	1,28	1,90	
04	LwK 7.7	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
05	LwK 7.3	100,9	0,90	0,11	0,17	
06	LwK 7.3	103,2	3,20	0,40	0,60	
07	LwK 7.4.2	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
08	LwK 7.3	97,0	-3,00	-0,38	-0,56	
09	LwK 7.3	90,6	-9,40	-1,18	-1,75	
10	LwK 7.4.2	108,0	8,00	1,00	1,49	
11	LwK 7.3	106,0	6,00	0,75	1,12	
13	LwK 7.4.1	105,0	5,00	0,63	0,93	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	-4,00	-0,50	-0,75	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-6,00	-0,75	-1,12	
21	LwK 7.4.2	108,0	8,00	1,00	1,49	
22	LwK 7.3	114,0	14,00	1,75	2,61	
23	LwK 7.4.2m	90,0	-10,00	-1,25	-1,87	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	15,00	1,88	2,80	
26	LwK 7.4.2	100,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	12,00	1,50	2,24	
28	LwK 7.3	108,2	8,20	1,03	1,53	
30	LwK 7.4.1	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	5,00	0,63	0,93	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	6,00	0,75	1,12	
37	LwK 7.4.1	86,0	-14,00	-1,75	-2,61	
38	LwK 7.7	86,0	-14,00	-1,75	-2,61	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	9,00	1,13	1,68	
40	LwK 7.4.1	96,5	-3,50	-0,44	-0,65	
41	LwK 7.6	92,0	-8,00	-1,00	-1,49	
42	LwK 7.4.2	102,0	2,00	0,25	0,37	
44	LwK 7.4.1	103,0	3,00	0,38	0,56	
45	LwK 7.7	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
46	LwK 7.7	91,0	-9,00	-1,13	-1,68	
48	LwK 7.4.2	110,0	10,00	1,25	1,87	
49	LwK 7.4.2	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	108,0	8,00	1,00	1,49	
52	LwK 7.7	87,0	-13,00	-1,63	-2,43	
53	LwK 7.4.2	111,0	11,00	1,38	2,05	
54	LwK 7.7	91,0	-9,00	-1,13	-1,68	
55	LwK 7.7	92,1	-7,90	-0,99	-1,47	
58	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,5	8,50	1,06	1,59	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	116,0	16,00	2,00	2,99	
60	LwK 7.3	66,0	-34,00	-4,25	-6,35	(***)
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,8	1,80	0,22	0,34	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,0	19,00	2,38	3,55	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	107,0	7,00	0,88	1,31	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	8,00	1,00	1,49	
66	LwK 7.4.2	104,0	4,00	0,50	0,75	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	100,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	4,00	0,50	0,75	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	7,00	0,88	1,31	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,2	-14,80	-1,85	-2,76	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
74	LwK 7.6	89,0	-11,00	-1,38	-2,05	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
78	LwK 7.4.1	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	114,0	14,00	1,75	2,61	
80	Redox excl.	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
83	Redox incl.	100,0	0,00	0,00	0,00	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	11,00	1,38	2,05	
90	LwK 7.4.2	92,0	-8,00	-1,00	-1,49	
94	LwK 7.6	94,0	-6,00	-0,75	-1,12	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
95	LwK 7.4.2	99,6	-0,40	-0,05	-0,07	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	-3,00	-0,38	-0,56	
97	LwK 7.3	94,9	-5,10	-0,64	-0,95	
98	LwK 7.4.2	80,0	-20,00	-2,50	-3,73	
99	LwK 7.4.2	100,0	0,00	0,00	0,00	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	3,00	0,38	0,56	
105	LwK 7.3	97,0	-3,00	-0,38	-0,56	
106	LwK 7.3	102,0	2,00	0,25	0,37	
107	LwK 7.4.2	100,0	0,00	0,00	0,00	
202	LwK 7.8	92,0	-8,00	-1,00	-1,49	
205	LwK 7.8	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
206	LwK 7.8	98,0	-2,00	-0,25	-0,37	
207	LwK 7.8	81,0	-19,00	-2,38	-3,55	
208	LwK 7.8	101,9	1,90	0,24	0,35	
209	LwK 7.8	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
210	LwK 7.8	95,0	-5,00	-0,63	-0,93	
211	LwK 7.8	104,3	4,34	0,54	0,81	
213	LwK 7.8	106,0	6,00	0,75	1,12	
219	LwK 7.8	84,0	-16,00	-2,00	-2,99	
220	LwK 7.8	105,0	5,00	0,63	0,93	
225	LwK 7.8	96,0	-4,00	-0,50	-0,75	
237	LwK 7.8	105,0	5,00	0,63	0,93	
243	LwK 7.8	83,0	-17,00	-2,13	-3,17	
248	LwK 7.8	97,0	-3,00	-0,38	-0,56	
250	LwK 7.8	88,0	-12,00	-1,50	-2,24	
251	LwK 7.8	89,0	-11,00	-1,38	-2,05	
257	LwK 7.8	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
261	LwK 7.8	92,7	-7,32	-0,91	-1,37	
262	LwK 7.8	57,5	-42,50	-5,31	-7,93	(***)
263	LwK 7.8	35,0	-65,00	-8,13	-12,13	(***)
264	LwK 7.8	85,0	-15,00	-1,88	-2,80	
265	LwK 7.8	86,0	-14,00	-1,75	-2,61	
277	LwK 7.8	99,0	-1,00	-0,13	-0,19	
278	LwK 7.8	109,0	9,00	1,13	1,68	
279	LwK 7.8	106,0	6,00	0,75	1,12	
280	LwK 7.8	96,0	-4,00	-0,50	-0,75	
287	LwK 7.8	91,0	-9,00	-1,13	-1,68	
328	LwK 7.8	85,1	-14,87	-1,86	-2,78	
330	LwK 7.8	73,0	-27,00	-3,38	-5,04	
337	LwK 7.8	105,0	5,00	0,63	0,93	

(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab. Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

4.17.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Verfahren incl. Reduktone; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-13,00	-1,53	-2,43	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	8,00	0,94	1,49	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	-2,00	-0,24	-0,37	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	108,0	1,00	0,12	0,19	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	116,0	9,00	1,06	1,68	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,0	12,00	1,42	2,24	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	107,0	0,00	0,00	0,00	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	1,00	0,12	0,19	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	0,00	0,00	0,00	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,2	-21,80	-2,57	-4,07	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	99,0	-8,00	-0,94	-1,49	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-8,00	-0,94	-1,49	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	114,0	7,00	0,83	1,31	
83	Redox incl.	100,0	-7,00	-0,83	-1,31	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	4,00	0,47	0,75	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	-4,00	-0,47	-0,75	

4.17.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Verfahren excl. Reduktone; informative Bewertung

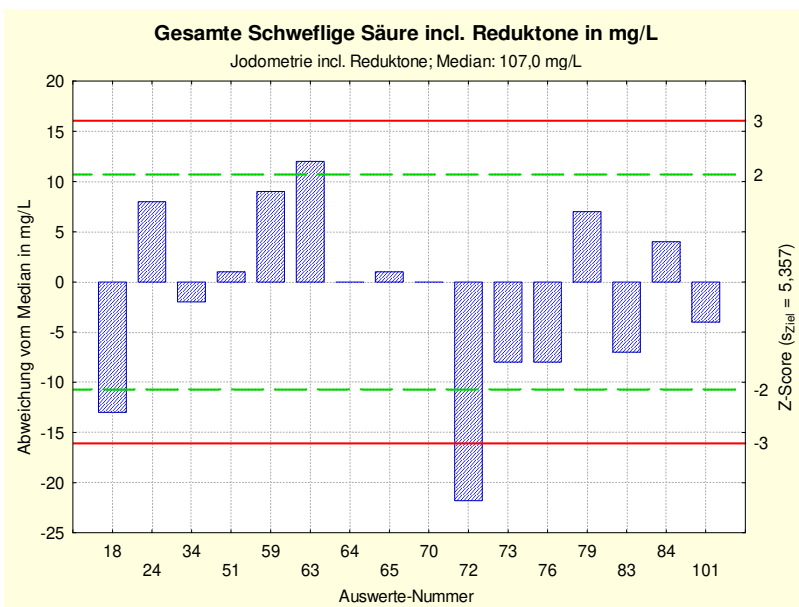
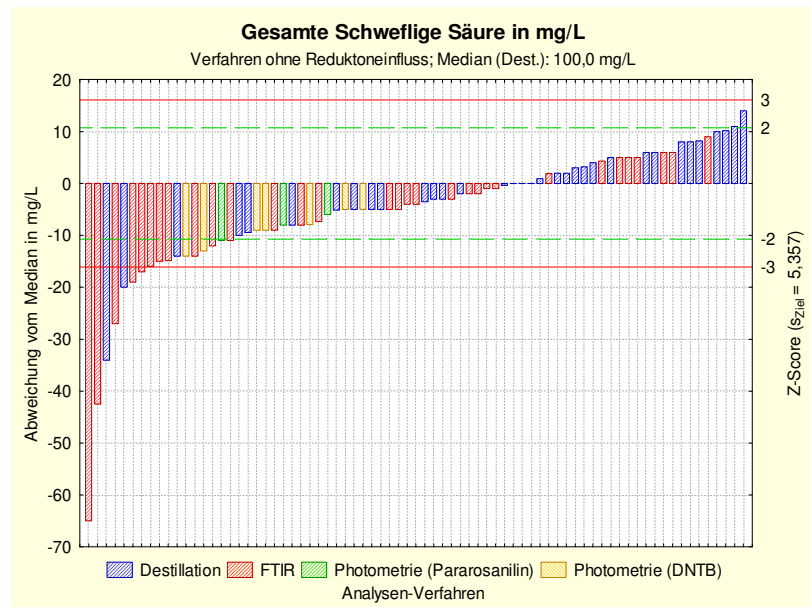
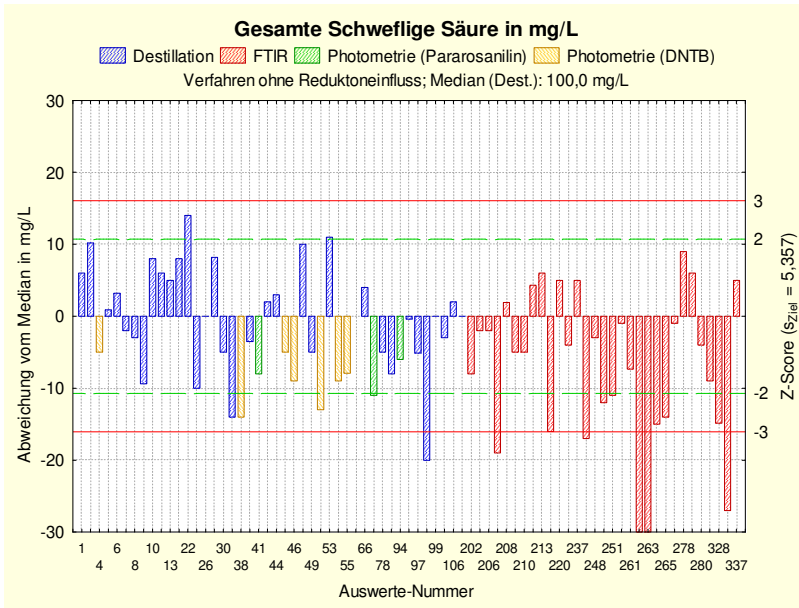
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	-6,90	-0,84	-1,29	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	9,10	1,11	1,70	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	3,10	0,38	0,58	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	6,10	0,74	1,14	
58	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,5	5,60	0,68	1,05	
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,8	-1,10	-0,13	-0,21	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	100,0	-2,90	-0,35	-0,54	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	1,10	0,13	0,21	
80	Redox excl.	95,0	-7,90	-0,96	-1,47	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	-5,90	-0,72	-1,10	

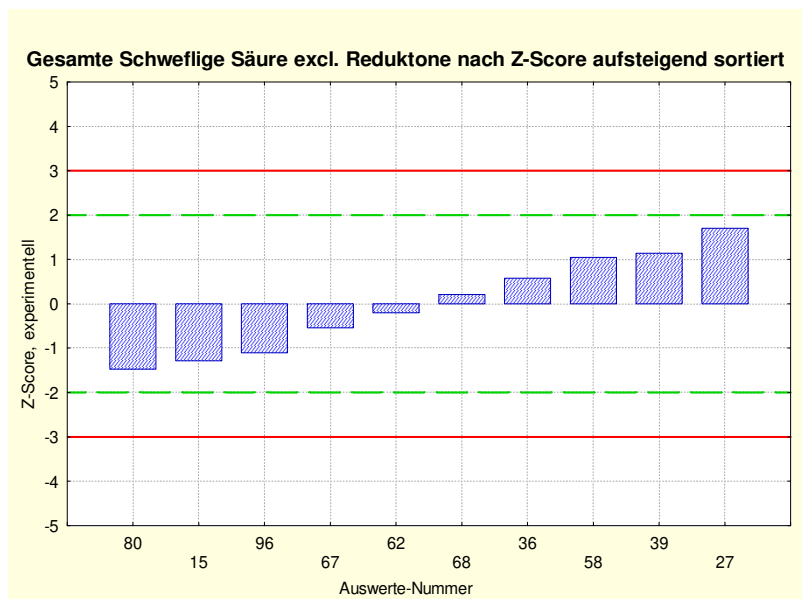
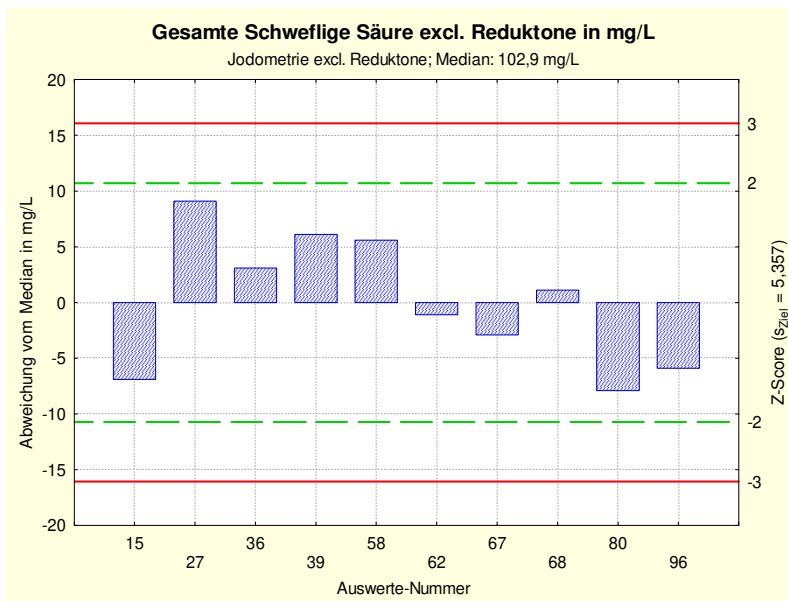
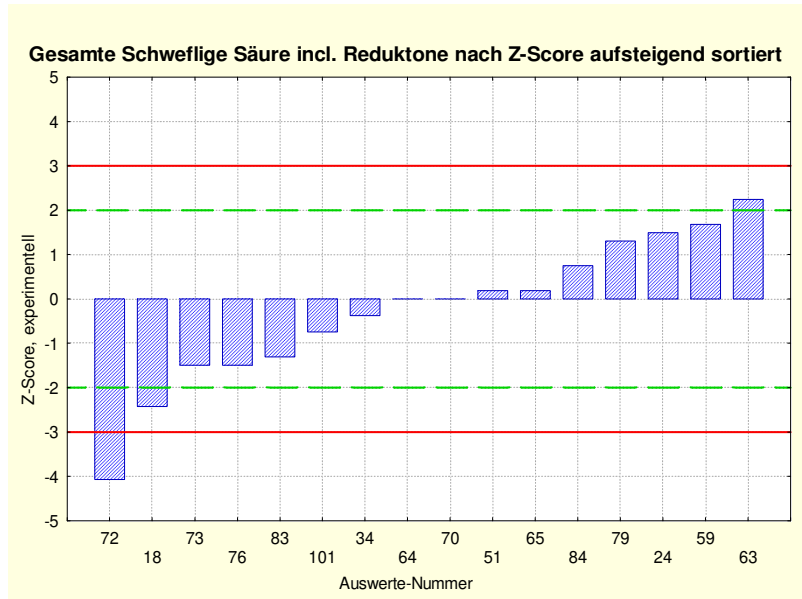
4.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		jodometrisch, Reduktone	
	alle Daten	ber. Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	34	33	16	10
Minimalwert	66,0	80,0	85,2	95,0
Mittelwert	99,24	100,25	105,64	102,93
Median	100,00	100,00	107,00	102,90
Maximalwert	114,0	114,0	119,0	112,0
Standardabweichung (s_L)	9,499	7,581	8,822	5,931
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,629	1,320	2,206	1,876
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	8,000	8,000	8,473	8,197
Zielstandardabweichung experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	5,357	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,19	0,95	1,04	0,72
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,77	1,42	1,65	1,11
Quotient (u_M/s_H)	0,20	0,16	0,26	0,23
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,30	0,25	0,41	0,35

4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	13	101,44	8,50
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	96,83	7,27
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	101,23	7,10
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	90,00	
	Destillationsverfahren	34	100,15	7,90
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	10	105,06	10,30
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	112,00	6,42
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	106,67	8,51
Redox incl.	Elektrometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und Redoxelektrode incl. Reduktone	1	100,00	
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	16	106,12	8,83
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	8	104,37	6,36
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	100,00	
Redox excl.	Elektrometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und Redoxelektrode excl. Reduktone	1	95,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	11	102,93	6,76
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	3	91,67	2,85
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	91,01	3,99
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	31	93,73	10,60





5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P05

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	1,02603	0,000130	0,98	
02	LwK 8.1	1,02590	0,000000	0,00	
03	LwK 8.4	1,02588	-0,000020	-0,15	
04	LwK 8.4	1,02578	-0,000120	-0,91	
05	LwK 8.4	1,02594	0,000040	0,30	
06	LwK 8.4	1,02585	-0,000050	-0,38	
08	LwK 8.1	1,02581	-0,000090	-0,68	
09	LwK 8.4	1,02596	0,000060	0,45	
10	LwK 8.4	1,02591	0,000010	0,08	
11	LwK 8.4	1,02615	0,000250	1,89	
13	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
16	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
18	LwK 8.4	1,02570	-0,000200	-1,52	
19	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
20	LwK 8.4	1,02583	-0,000070	-0,53	
21	LwK 8.4	1,02589	-0,000010	-0,08	
22	LwK 8.4	1,02610	0,000200	1,52	
23	LwK 8.4	1,02608	0,000180	1,36	
24	LwK 8.4	1,02571	-0,000190	-1,44	
25	LwK 8.4	1,02585	-0,000050	-0,38	
26	LwK 8.4	1,02594	0,000040	0,30	
27	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
28	LwK 8.4	1,02579	-0,000110	-0,83	
29	LwK 8.1	1,02600	0,000100	0,76	
30	LwK 8.4	1,02579	-0,000110	-0,83	
34	LwK 8.4	1,02585	-0,000050	-0,38	
36	LwK 8.4	1,02610	0,000200	1,52	
37	LwK 8.3	1,02601	0,000110	0,83	
38	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	1,02590	0,000000	0,00	
40	LwK 8.4	1,02578	-0,000120	-0,91	
41	LwK 8.4	1,02590	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	1,02587	-0,000030	-0,23	
44	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
45	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
46	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
49	LwK 8.4	1,02599	0,000090	0,68	
50	LwK 8.4	1,02610	0,000200	1,52	
51	LwK 8.4	1,02584	-0,000057	-0,43	
52	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
55	LwK 8.4	1,02576	-0,000140	-1,06	
59	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
60	LwK 8.4	1,02620	0,000300	2,27	
62	LwK 8.4	1,02570	-0,000200	-1,52	
63	LwK 8.4	1,02590	0,000000	0,00	
64	LwK 8.4	1,02590	0,000000	0,00	
66	LwK 8.4	1,02590	0,000000	0,00	
68	LwK 8.4	1,02557	-0,000330	-2,50	
72	LwK 8.4	0,98670	-0,039197	-296,95	(**)
73	LwK 8.4	1,02610	0,000200	1,52	
74	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
78	LwK 8.4	1,02603	0,000130	0,98	
79	LwK 8.2	1,02620	0,000300	2,27	
80	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	
81	LwK 8.4	1,02586	-0,000040	-0,30	
82	LwK 8.4	1,02579	-0,000110	-0,83	
86	LwK 8.4	1,02580	-0,000100	-0,76	
91	LwK 8.4	1,02586	-0,000040	-0,30	
110	LwK 8.4	1,02600	0,000100	0,76	

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

5.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,02640	0,000500	2,63	
202	FTIR	1,02573	-0,000170	-0,89	
203	FTIR	1,02595	0,000050	0,26	
205	FTIR	1,02450	-0,001400	-7,37	(***)
206	FTIR	1,02602	0,000120	0,63	
207	FTIR	1,02570	-0,000200	-1,05	
208	FTIR	1,02674	0,000840	4,42	
210	FTIR	1,02514	-0,000760	-4,00	
211	FTIR	1,02588	-0,000020	-0,11	
212	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
213	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
215	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
216	FTIR	1,02610	0,000200	1,05	
217	FTIR	1,02570	-0,000200	-1,05	
218	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
219	FTIR	1,02549	-0,000410	-2,16	
220	FTIR	1,02560	-0,000300	-1,58	
221	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
222	FTIR	1,02591	0,000010	0,05	
223	FTIR	1,02457	-0,001330	-7,00	(***)
224	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
225	FTIR	1,02510	-0,000800	-4,21	
226	FTIR	1,02614	0,000240	1,26	
227	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
228	FTIR	1,02614	0,000240	1,26	
229	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
230	FTIR	1,02593	0,000030	0,16	
232	FTIR	1,02630	0,000400	2,11	
234	FTIR	1,02611	0,000210	1,11	
235	FTIR	1,02560	-0,000300	-1,58	
236	FTIR	1,02648	0,000580	3,05	
237	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
240	FTIR	1,02589	-0,000010	-0,05	
241	FTIR	1,02582	-0,000080	-0,42	
242	FTIR	1,02559	-0,000310	-1,63	
243	FTIR	1,02610	0,000200	1,05	
244	FTIR	1,02640	0,000500	2,63	
245	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
246	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
247	FTIR	1,00230	-0,023600	-124,21	(***)
248	FTIR	1,02570	-0,000200	-1,05	
249	FTIR	1,02640	0,000500	2,63	
250	FTIR	1,02650	0,000600	3,16	
251	FTIR	1,02703	0,001130	5,95	(***)
253	FTIR	1,02650	0,000600	3,16	
255	FTIR	1,02565	-0,000250	-1,32	
256	FTIR	1,02600	0,000100	0,53	
257	FTIR	1,02720	0,001300	6,84	(***)
258	FTIR	1,02489	-0,001010	-5,32	(***)
259	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
260	FTIR	1,02620	0,000300	1,58	
261	FTIR	1,02570	-0,000200	-1,05	
262	FTIR	1,02565	-0,000250	-1,32	
263	FTIR	1,02540	-0,000500	-2,63	
264	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
265	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
266	FTIR	1,02558	-0,000320	-1,68	
267	FTIR	1,02510	-0,000800	-4,21	
268	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
269	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
270	FTIR	1,02694	0,001040	5,47	(***)
271	FTIR	1,02644	0,000540	2,84	
273	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
274	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
275	FTIR	1,02510	-0,000800	-4,21	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	1,02580	-0,000100	-0,53	
277	FTIR	1,02350	-0,002400	-12,63	(***)
278	FTIR	1,02600	0,000100	0,53	
279	FTIR	1,02670	0,000800	4,21	
280	FTIR	1,02573	-0,000170	-0,89	
281	FTIR	1,02540	-0,000500	-2,63	
282	FTIR	1,02610	0,000200	1,05	
283	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
284	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
285	FTIR	1,02560	-0,000300	-1,58	
286	FTIR	1,02650	0,000600	3,16	
287	FTIR	1,02550	-0,000400	-2,11	
321	FTIR	1,02560	-0,000300	-1,58	
328	FTIR	1,02541	-0,000490	-2,58	
330	FTIR	1,02590	0,000000	0,00	
337	FTIR	1,02547	-0,000430	-2,26	

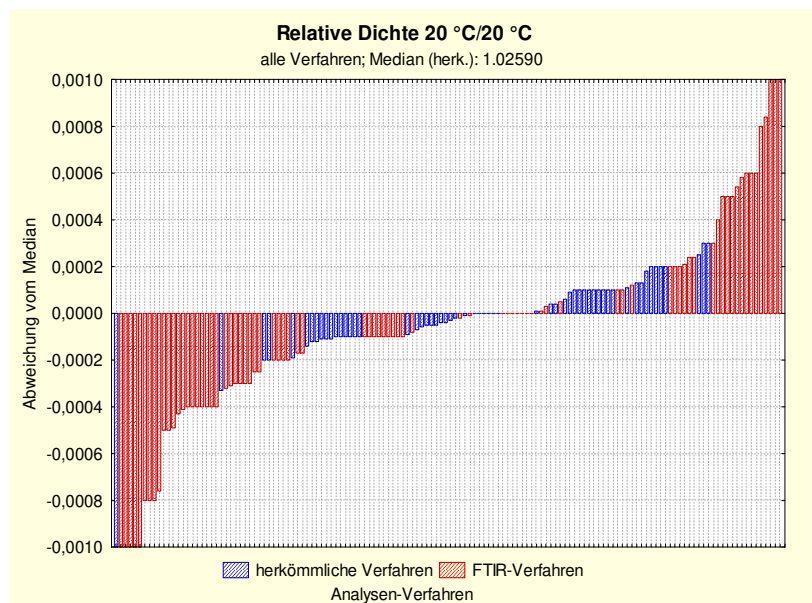
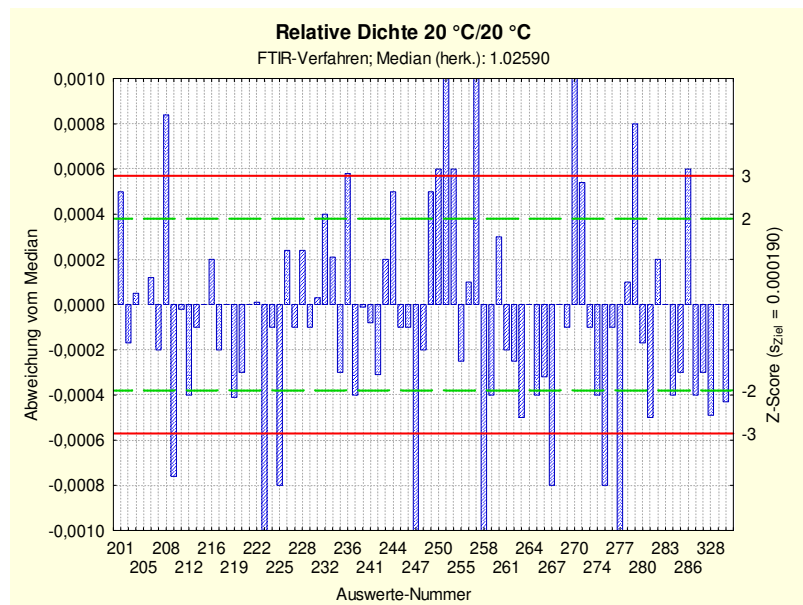
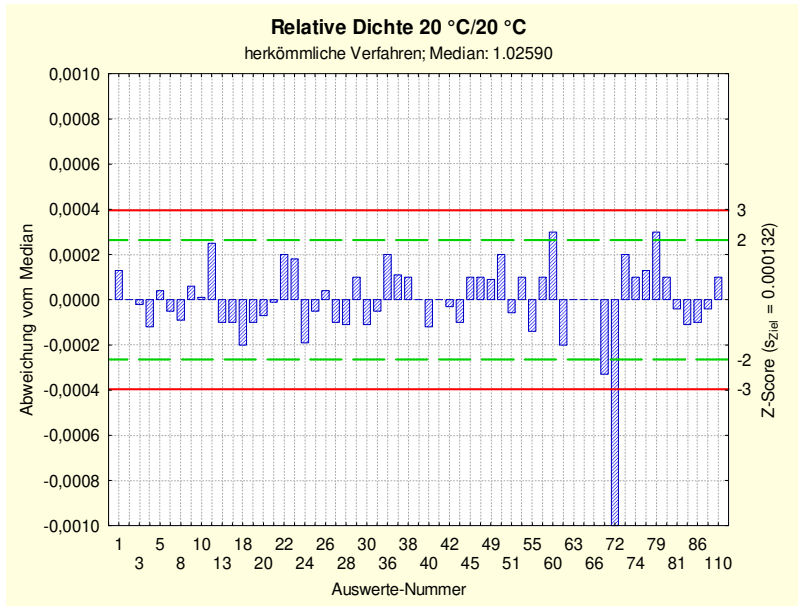
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	59	58
Minimalwert	0,98670	1,02557
Mittelwert	1,025246	1,025910
Median	1,025900	1,025900
Maximalwert	1,02620	1,02620
Standardabweichung (s_L)	0,005106	0,000131
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000665	0,000017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	38,68	0,99
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	26,87	0,69
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	5,04	0,13
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	3,50	0,09

5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	4	1,02594	0,000114
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,02620	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,02601	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	53	1,02590	0,000136
	herkömmliche Verfahren	59	1,02590	0,000137
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	1,02582	0,000448



5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.4	77,03	-0,700	-0,31	-1,31	
02	LwK 2.4	77,80	0,070	0,03	0,13	
03	LwK 2.9	79,30	1,570	0,69	2,93	
04	LwK 2.1	78,29	0,563	0,25	1,05	
05	LwK 2.4	77,96	0,230	0,10	0,43	
06	LwK 2.9	77,74	0,010	0,00	0,02	
08	LwK 2.4	77,73	0,000	0,00	0,00	
09	LwK 2.1	77,97	0,240	0,11	0,45	
10	LwK 2.1	78,30	0,570	0,25	1,07	
11	LwK 2.4	76,08	-1,650	-0,72	-3,08	
13	LwK 2.1	77,20	-0,530	-0,23	-0,99	
16	LwK 2.9	78,10	0,370	0,16	0,69	
18	LwK 2.9	78,90	1,170	0,51	2,19	
20	LwK 2.9	78,40	0,670	0,29	1,25	
21	LwK 2.9	78,10	0,370	0,16	0,69	
22	LwK 2.7	78,21	0,480	0,21	0,90	
23	LwK 2.9	78,00	0,270	0,12	0,50	
24	LwK 2.5	77,40	-0,330	-0,14	-0,62	
25	LwK 2.9	77,60	-0,130	-0,06	-0,24	
26	LwK 2.1	77,40	-0,330	-0,14	-0,62	
27	LwK 2.4	77,50	-0,230	-0,10	-0,43	
28	LwK 2.5	76,40	-1,330	-0,58	-2,49	
29	LwK 2.4	77,80	0,070	0,03	0,13	
30	LwK 2.1	77,98	0,250	0,11	0,47	
35	LwK 2.9	75,40	-2,330	-1,02	-4,36	
37	LwK 2.2	79,90	2,170	0,95	4,06	
38	LwK 2.9	77,70	-0,030	-0,01	-0,06	
39	LwK 2.4	78,10	0,370	0,16	0,69	
40	LwK 2.4	77,75	0,020	0,01	0,04	
41	LwK 2.9	77,76	0,030	0,01	0,06	
42	LwK 2.4	77,70	-0,030	-0,01	-0,06	
44	LwK 2.1	78,90	1,170	0,51	2,19	
45	LwK 2.9	79,70	1,970	0,86	3,68	
46	LwK 2.9	113,60	35,870	15,71	67,05	(***)
49	LwK 2.9	78,15	0,420	0,18	0,79	
50	LwK 2.9	76,50	-1,230	-0,54	-2,30	
51	LwK 2.9	77,95	0,220	0,10	0,41	
52	LwK 2.9	78,61	0,880	0,39	1,64	
54	LwK 2.1	77,30	-0,430	-0,19	-0,80	
55	LwK 2.9	77,30	-0,430	-0,19	-0,80	
59	LwK 2.1	77,20	-0,530	-0,23	-0,99	
60	LwK 2.9	78,30	0,570	0,25	1,07	
62	LwK 2.1	77,07	-0,660	-0,29	-1,23	
63	LwK 2.5	77,27	-0,460	-0,20	-0,86	
64	LwK 2.9	78,70	0,970	0,42	1,81	
66	LwK 2.1	77,80	0,070	0,03	0,13	
68	LwK 2.5	78,23	0,500	0,22	0,93	
70	LwK 2.3	79,00	1,270	0,56	2,37	
72	LwK 2.4	77,50	-0,227	-0,10	-0,42	
73	LwK 2.9	78,70	0,970	0,42	1,81	
74	LwK 2.5	77,51	-0,220	-0,10	-0,41	
78	LwK 2.1	75,90	-1,830	-0,80	-3,42	
79	LwK 2.2	79,30	1,570	0,69	2,93	
80	LwK 2.3	77,60	-0,130	-0,06	-0,24	
81	LwK 2.9	78,26	0,530	0,23	0,99	
82	LwK 2.9	78,14	0,415	0,18	0,78	
91	LwK 2.9	77,43	-0,300	-0,13	-0,56	
96	LwK 2.9	78,10	0,370	0,16	0,69	
99	LwK 2.9	77,55	-0,180	-0,08	-0,34	
101	LwK 2.9	78,31	0,580	0,25	1,08	

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

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
103	LwK 2.9	78,20	0,470	0,21	0,88	
109	LwK 2.9	78,90	1,170	0,51	2,19	
110	LwK 2.9	77,90	0,170	0,07	0,32	
111	NMR	78,92	1,186	0,52	2,22	
112	NMR	75,44	-2,291	-1,00	-4,28	
113	NMR	78,41	0,680	0,30	1,27	
114	NMR	77,88	0,149	0,07	0,28	
116	NMR	79,36	1,628	0,71	3,04	
117	NMR	81,80	4,070	1,78	7,61	(***)

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

5.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	76,58	-1,150	-0,50	-1,30	
202	LwK 2.8	79,45	1,725	0,76	1,95	
203	LwK 2.8	78,09	0,360	0,16	0,41	
205	LwK 2.8	77,73	0,000	0,00	0,00	
206	LwK 2.8	77,23	-0,500	-0,22	-0,56	
207	LwK 2.8	77,90	0,170	0,07	0,19	
208	LwK 2.8	77,73	0,000	0,00	0,00	
210	LwK 2.8	77,64	-0,090	-0,04	-0,10	
211	LwK 2.8	76,08	-1,650	-0,72	-1,86	
212	LwK 2.8	77,90	0,170	0,07	0,19	
213	LwK 2.8	79,45	1,720	0,75	1,94	
215	LwK 2.8	79,00	1,270	0,56	1,43	
216	LwK 2.8	76,90	-0,830	-0,36	-0,94	
217	LwK 2.8	78,70	0,970	0,42	1,09	
218	LwK 2.8	79,30	1,570	0,69	1,77	
219	LwK 2.8	79,10	1,370	0,60	1,55	
220	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
221	LwK 2.8	1,03	-76,704	-33,59	-86,57	(*)
222	LwK 2.8	76,75	-0,980	-0,43	-1,11	
224	LwK 2.8	77,80	0,070	0,03	0,08	
225	LwK 2.8	78,22	0,490	0,21	0,55	
226	LwK 2.8	78,71	0,980	0,43	1,11	
227	LwK 2.8	79,10	1,370	0,60	1,55	
228	LwK 2.8	78,24	0,510	0,22	0,58	
229	LwK 2.8	77,80	0,070	0,03	0,08	
230	LwK 2.8	76,71	-1,020	-0,45	-1,15	
232	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
234	LwK 2.8	79,35	1,620	0,71	1,83	
235	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
236	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
237	LwK 2.8	74,99	-2,740	-1,20	-3,09	
240	LwK 2.8	78,40	0,670	0,29	0,76	
241	LwK 2.8	77,53	-0,200	-0,09	-0,23	
242	LwK 2.8	77,44	-0,290	-0,13	-0,33	
243	LwK 2.8	77,60	-0,130	-0,06	-0,15	
244	LwK 2.8	78,67	0,940	0,41	1,06	
245	LwK 2.8	76,70	-1,030	-0,45	-1,16	
246	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
247	LwK 2.8	83,58	5,850	2,56	6,60	(***)
248	LwK 2.8	74,70	-3,030	-1,33	-3,42	
249	LwK 2.8	78,20	0,470	0,21	0,53	
250	LwK 2.8	77,80	0,070	0,03	0,08	
251	LwK 2.8	79,65	1,920	0,84	2,17	
253	LwK 2.8	79,30	1,570	0,69	1,77	
254	LwK 2.8	77,50	-0,230	-0,10	-0,26	
255	LwK 2.8	78,10	0,370	0,16	0,42	
256	LwK 2.8	79,40	1,670	0,73	1,88	
257	LwK 2.8	79,50	1,770	0,78	2,00	

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
258	LwK 2.8	82,34	4,610	2,02	5,20	(***)
259	LwK 2.8	76,40	-1,330	-0,58	-1,50	
260	LwK 2.8	78,90	1,170	0,51	1,32	
261	LwK 2.8	78,00	0,270	0,12	0,30	
262	LwK 2.8	77,25	-0,480	-0,21	-0,54	
263	LwK 2.8	78,70	0,970	0,42	1,09	
264	LwK 2.8	80,18	2,450	1,07	2,77	
265	LwK 2.8	77,40	-0,330	-0,14	-0,37	
266	LwK 2.8	76,88	-0,850	-0,37	-0,96	
267	LwK 2.8	78,69	0,960	0,42	1,08	
268	LwK 2.8	73,26	-4,470	-1,96	-5,05	(***)
269	LwK 2.8	84,83	7,100	3,11	8,01	(***)
270	LwK 2.8	78,30	0,570	0,25	0,64	
271	LwK 2.8	77,52	-0,210	-0,09	-0,24	
273	LwK 2.8	78,20	0,470	0,21	0,53	
274	LwK 2.8	77,73	0,000	0,00	0,00	
275	LwK 2.8	79,42	1,694	0,74	1,91	
276	LwK 2.8	76,90	-0,830	-0,36	-0,94	
277	LwK 2.8	78,53	0,800	0,35	0,90	
278	LwK 2.8	77,70	-0,030	-0,01	-0,03	
279	LwK 2.8	78,90	1,170	0,51	1,32	
280	LwK 2.8	82,10	4,370	1,91	4,93	
281	LwK 2.8	78,41	0,680	0,30	0,77	
282	LwK 2.8	78,38	0,651	0,29	0,73	
283	LwK 2.8	77,15	-0,580	-0,25	-0,65	
284	LwK 2.8	77,72	-0,010	-0,00	-0,01	
285	LwK 2.8	79,50	1,770	0,78	2,00	
286	LwK 2.8	79,47	1,740	0,76	1,96	
287	LwK 2.8	79,00	1,270	0,56	1,43	
312	LwK 2.8	78,00	0,270	0,12	0,30	
321	LwK 2.8	77,30	-0,430	-0,19	-0,49	
328	LwK 2.8	78,74	1,010	0,44	1,14	
330	LwK 2.8	77,00	-0,730	-0,32	-0,82	
337	LwK 2.8	74,77	-2,960	-1,30	-3,34	

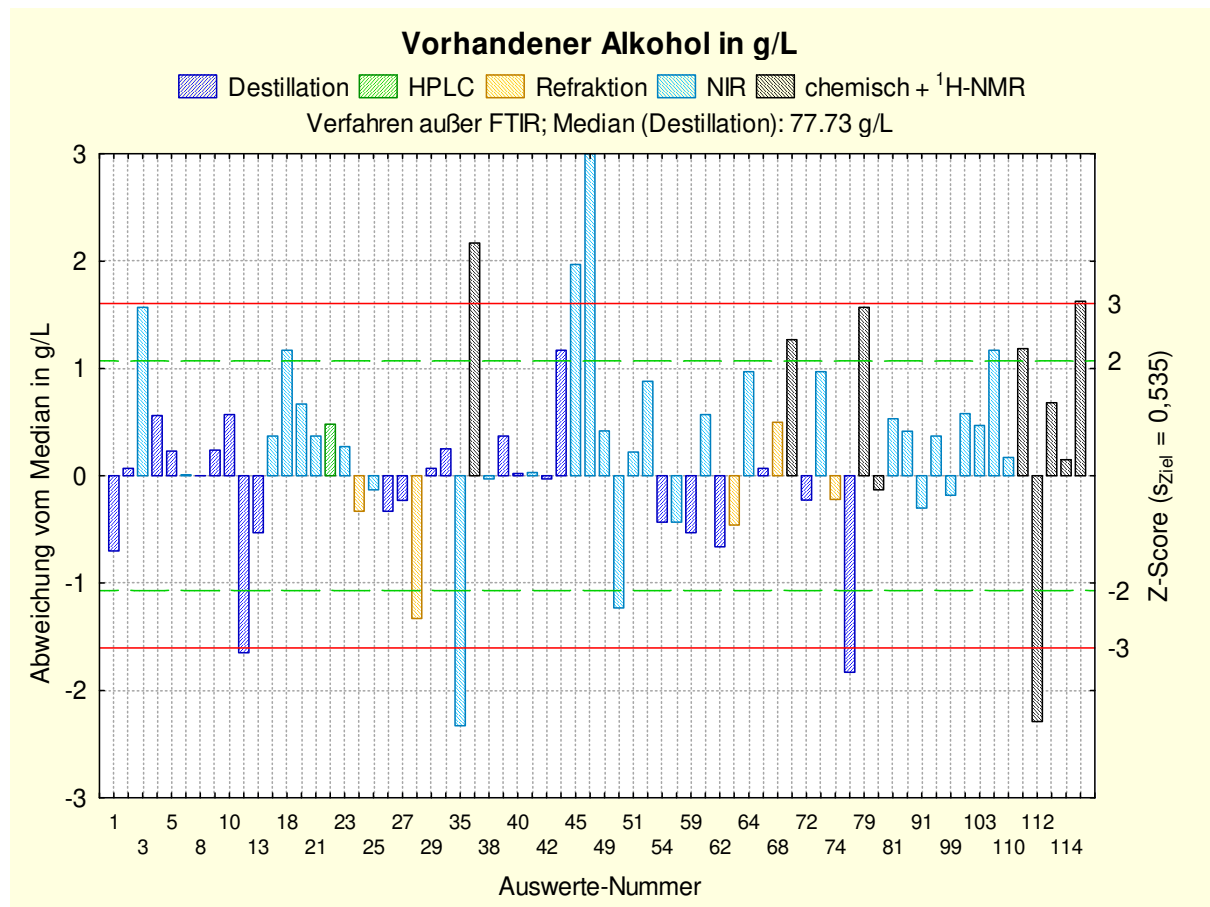
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

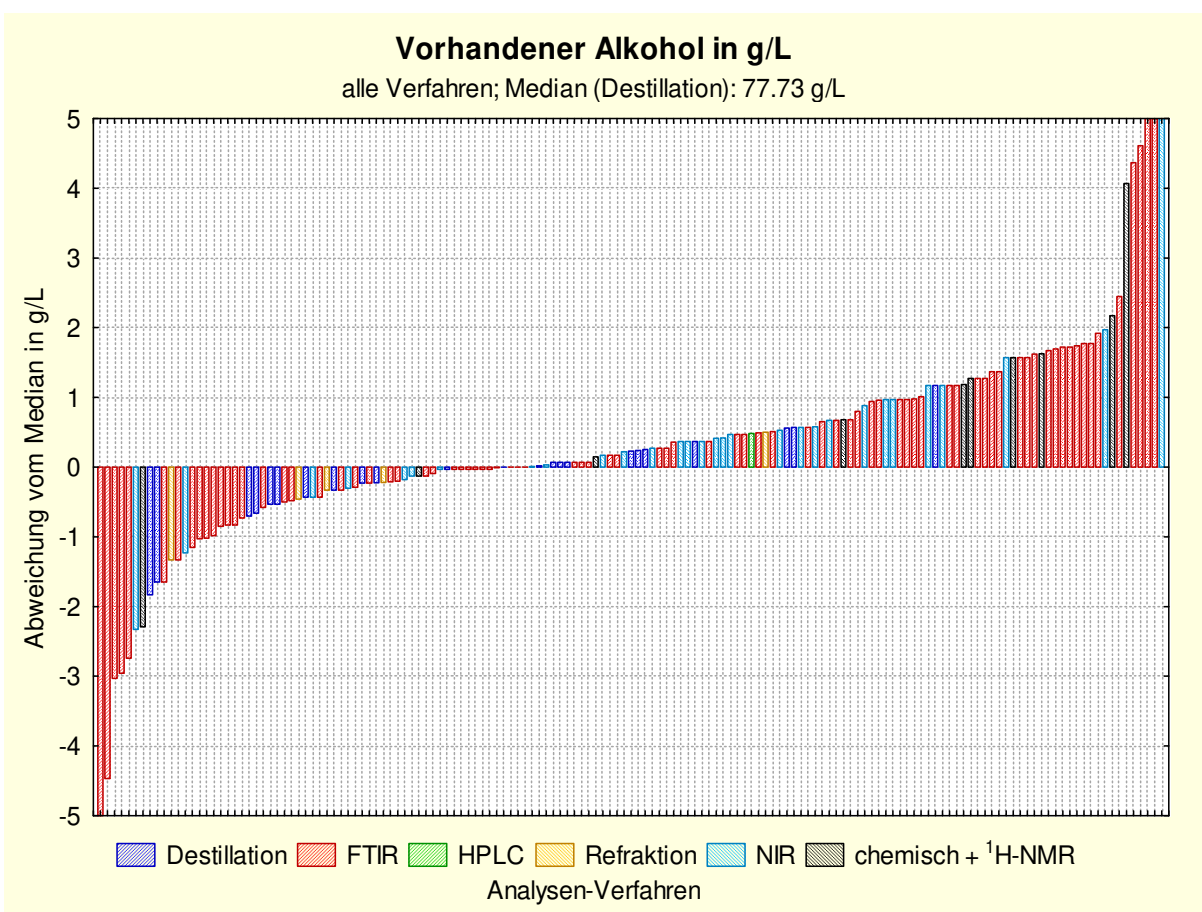
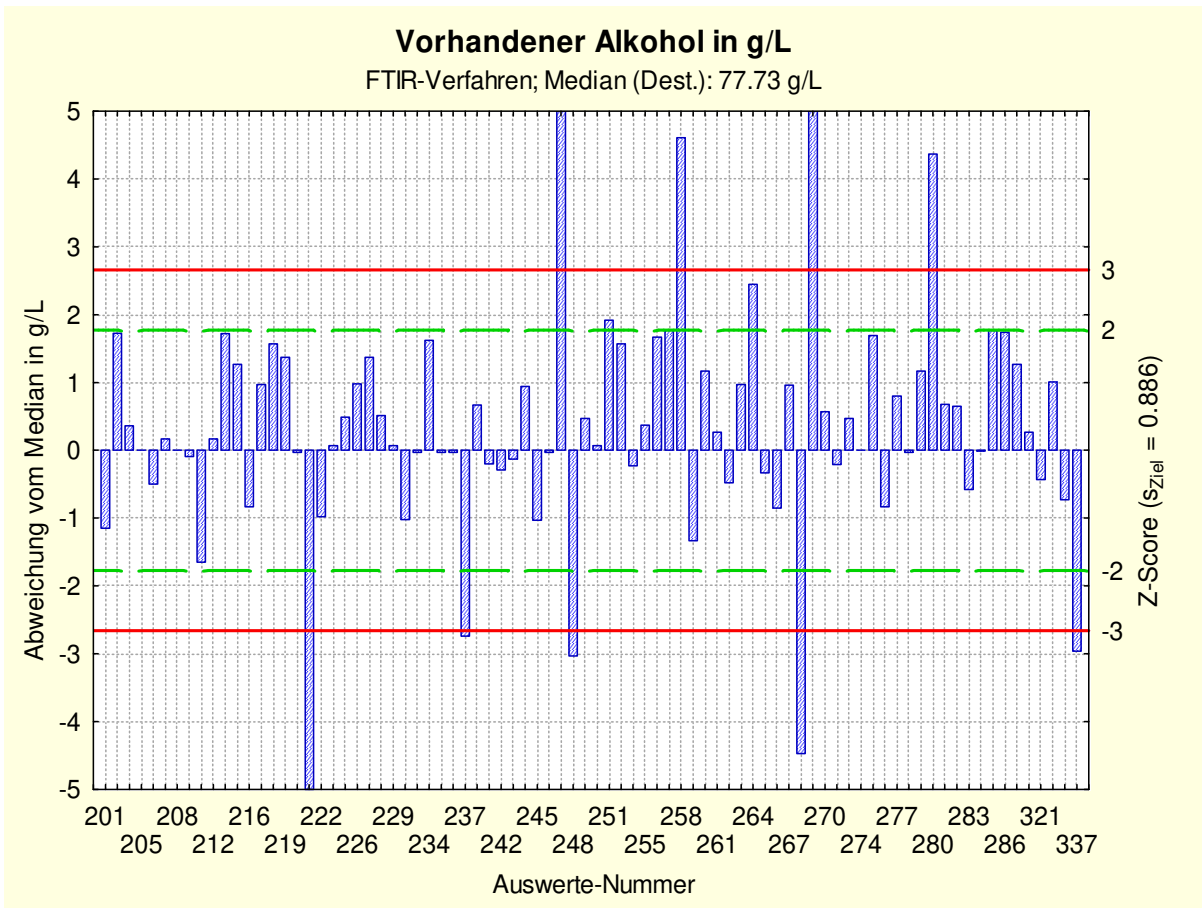
5.2.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	75,90
Mittelwert	77,577
Median	77,730
Maximalwert	78,90
Standardabweichung (s_L)	0,666
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,139
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,284
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,886
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,29
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,24
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,75
Quotient (u_M/s_H)	0,06
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,26
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,16

5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	12	77,651	0,701
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	11	77,640	0,360
	Destillationsverfahren	23	77,630	0,521
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	79,600	0,481
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	2	78,300	1,123
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	5	77,362	0,653
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	1	78,210	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	78,085	1,155
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	30	78,151	0,639
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	78,641	2,156





5.3 Gesamtextrakt [g/L]

5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.3	100,1	-1,60	-0,56	-2,69	
02	LwK 3.3	101,5	-0,20	-0,07	-0,34	
03	LwK 3.3	102,3	0,60	0,21	1,01	
04	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
05	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
06	LwK 3.3	101,5	-0,21	-0,07	-0,35	
08	LwK 3.1	101,3	-0,40	-0,14	-0,67	
09	LwK 3.3	102,0	0,30	0,10	0,51	
10	LwK 3.3	101,9	0,20	0,07	0,34	
11	LwK 3.1	101,8	0,10	0,03	0,17	
13	LwK 3.3	101,1	-0,60	-0,21	-1,01	
16	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
18	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
20	LwK 3.3	101,7	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
22	LwK 3.3	102,2	0,50	0,17	0,84	
23	LwK 3.3	102,1	0,40	0,14	0,67	
24	LwK 3.3	101,0	-0,70	-0,24	-1,18	
25	LwK 3.3	101,4	-0,30	-0,10	-0,51	
26	LwK 3.3	101,5	-0,20	-0,07	-0,34	
27	LwK 3.3	101,2	-0,50	-0,17	-0,84	
28	LwK 3.3	101,0	-0,70	-0,24	-1,18	
29	LwK 3.1	101,9	0,20	0,07	0,34	
30	LwK 3.2	101,4	-0,30	-0,10	-0,51	
37	LwK 3.3	102,7	1,00	0,35	1,68	
38	LwK 3.3	102,0	0,30	0,10	0,51	
39	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
40	LwK 3.3	101,3	-0,40	-0,14	-0,67	
41	LwK 3.3	101,7	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	101,5	-0,20	-0,07	-0,34	
44	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
45	LwK 3.3	102,6	0,90	0,31	1,52	
46	LwK 3.3	24,8	-76,90	-26,80	-129,46	(*)
49	LwK 3.3	102,0	0,30	0,10	0,51	
51	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
52	LwK 3.3	102,3	0,60	0,21	1,01	
54	LwK 3.2	101,3	-0,40	-0,14	-0,67	
55	LwK 3.3	101,1	-0,60	-0,21	-1,01	
59	LwK 3.2	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
60	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
62	LwK 3.2	101,1	-0,60	-0,21	-1,01	
63	FTIR (ge-	101,5	-0,20	-0,07	-0,34	
66	LwK 3.2	100,8	-0,90	-0,31	-1,52	
73	LwK 3.3	102,2	0,50	0,17	0,84	
74	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
78	LwK 3.2	101,4	-0,30	-0,10	-0,51	
79	LwK 3.3	102,9	1,20	0,42	2,02	
80	LwK 3.3	101,9	0,20	0,07	0,34	
81	LwK 3.3	102,0	0,30	0,10	0,51	
82	LwK 3.3	101,8	0,10	0,03	0,17	
91	LwK 3.3	101,6	-0,10	-0,03	-0,17	
109	LwK 3.3	102,8	1,10	0,38	1,85	
110	LwK 3.3	102,0	0,30	0,10	0,51	

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

5.3.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	100,6	-1,11	-0,39	-1,87	
202	FTIR (gemessen)	103,2	1,52	0,53	2,56	
203	FTIR (gemessen)	101,6	-0,11	-0,04	-0,19	
205	FTIR (gemessen)	101,9	0,20	0,07	0,34	
208	FTIR (gemessen)	103,0	1,30	0,45	2,19	
210	k. A.	101,2	-0,47	-0,16	-0,79	
211	FTIR (gemessen)	100,8	-0,89	-0,31	-1,50	
217	FTIR (gemessen)	101,7	-0,02	-0,01	-0,03	
218	FTIR (gemessen)	100,1	-1,60	-0,56	-2,69	
219	FTIR (gemessen)	100,8	-0,90	-0,31	-1,52	
220	FTIR (gemessen)	101,7	0,00	0,00	0,00	
221	FTIR (gemessen)	99,7	-2,05	-0,71	-3,45	
222	FTIR (gemessen)	99,2	-2,50	-0,87	-4,21	
224	FTIR (gemessen)	98,8	-2,90	-1,01	-4,88	
227	FTIR (gemessen)	102,1	0,40	0,14	0,67	
228	FTIR (gemessen)	101,6	-0,09	-0,03	-0,15	
232	k. A.	99,8	-1,92	-0,67	-3,23	
236	LwK 3.3 (herk.)	102,2	0,50	0,17	0,84	
237	FTIR (gemessen)	97,8	-3,85	-1,34	-6,48	(***)
250	FTIR (gemessen)	103,0	1,30	0,45	2,19	
251	FTIR (gemessen)	103,8	2,13	0,74	3,59	
253	FTIR (gemessen)	102,5	0,80	0,28	1,35	
257	herk./FTIR	102,3	0,60	0,21	1,01	
258	FTIR-Basis	101,0	-0,70	-0,24	-1,18	
259	FTIR-Basis	100,1	-1,60	-0,56	-2,69	
261	FTIR (gemessen)	101,2	-0,50	-0,17	-0,84	
262	k. A.	100,6	-1,15	-0,40	-1,94	
263	FTIR (gemessen)	101,5	-0,20	-0,07	-0,34	
266	FTIR (gemessen)	99,9	-1,78	-0,62	-3,00	
267	FTIR (gemessen)	100,6	-1,13	-0,39	-1,90	
269	k. A.	100,3	-1,38	-0,48	-2,32	
270	k. A.	104,4	2,70	0,94	4,55	
271	k. A.	100,5	-1,20	-0,42	-2,02	
273	FTIR (gemessen)	99,9	-1,80	-0,63	-3,03	
276	FTIR (gemessen)	100,1	-1,60	-0,56	-2,69	
277	FTIR (gemessen)	51,7	-50,00	-17,43	-84,18	(***)
278	FTIR (gemessen)	102,4	0,70	0,24	1,18	
279	FTIR (gemessen)	104,2	2,50	0,87	4,21	
280	FTIR (gemessen)	102,4	0,70	0,24	1,18	
281	FTIR (gemessen)	102,9	1,20	0,42	2,02	
282	FTIR-Basis	102,6	0,90	0,31	1,52	
283	FTIR (gemessen)	100,6	-1,10	-0,38	-1,85	
284	FTIR-Basis	101,0	-0,74	-0,26	-1,25	
285	k. A.	101,8	0,10	0,03	0,17	
286	FTIR (gemessen)	102,5	0,83	0,29	1,40	
321	FTIR (gemessen)	101,8	0,15	0,05	0,25	
328	FTIR (gemessen)	101,9	0,16	0,06	0,27	
337	FTIR (gemessen)	96,8	-4,85	-1,69	-8,16	(***)

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

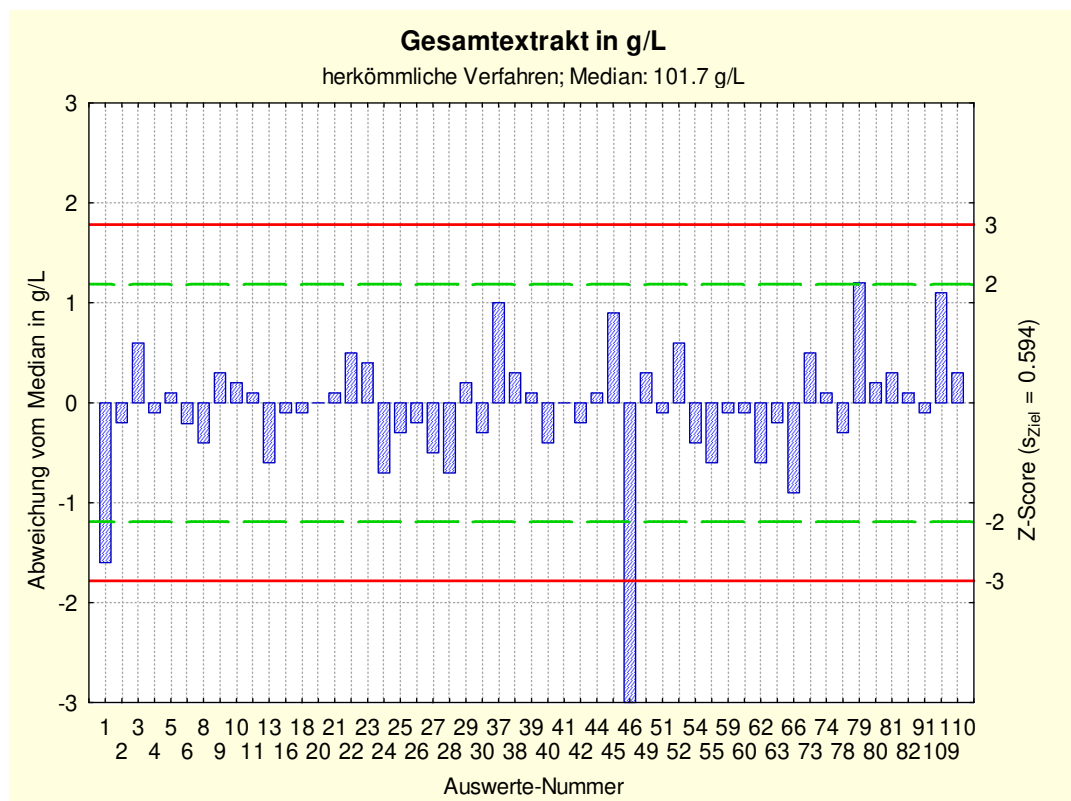
5.3.3 Deskriptive Ergebnisse

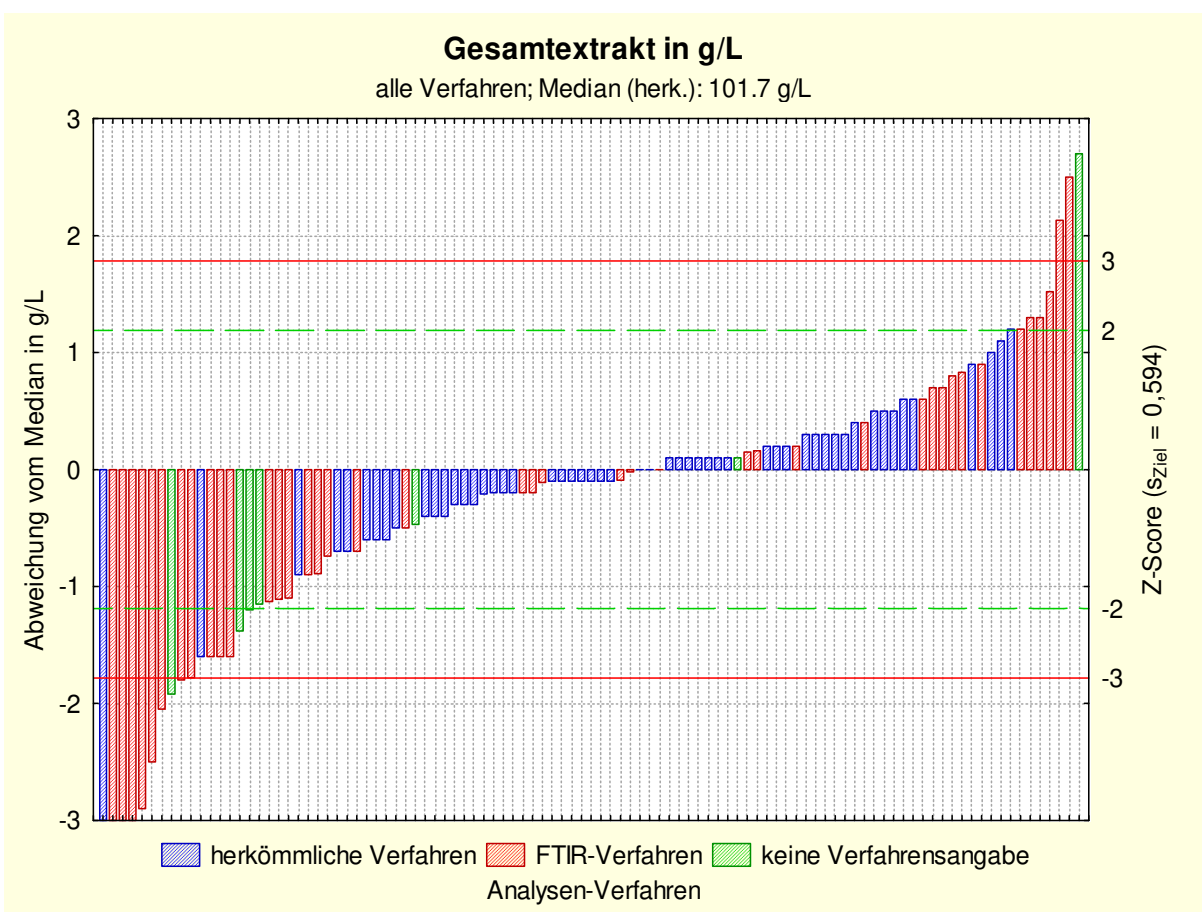
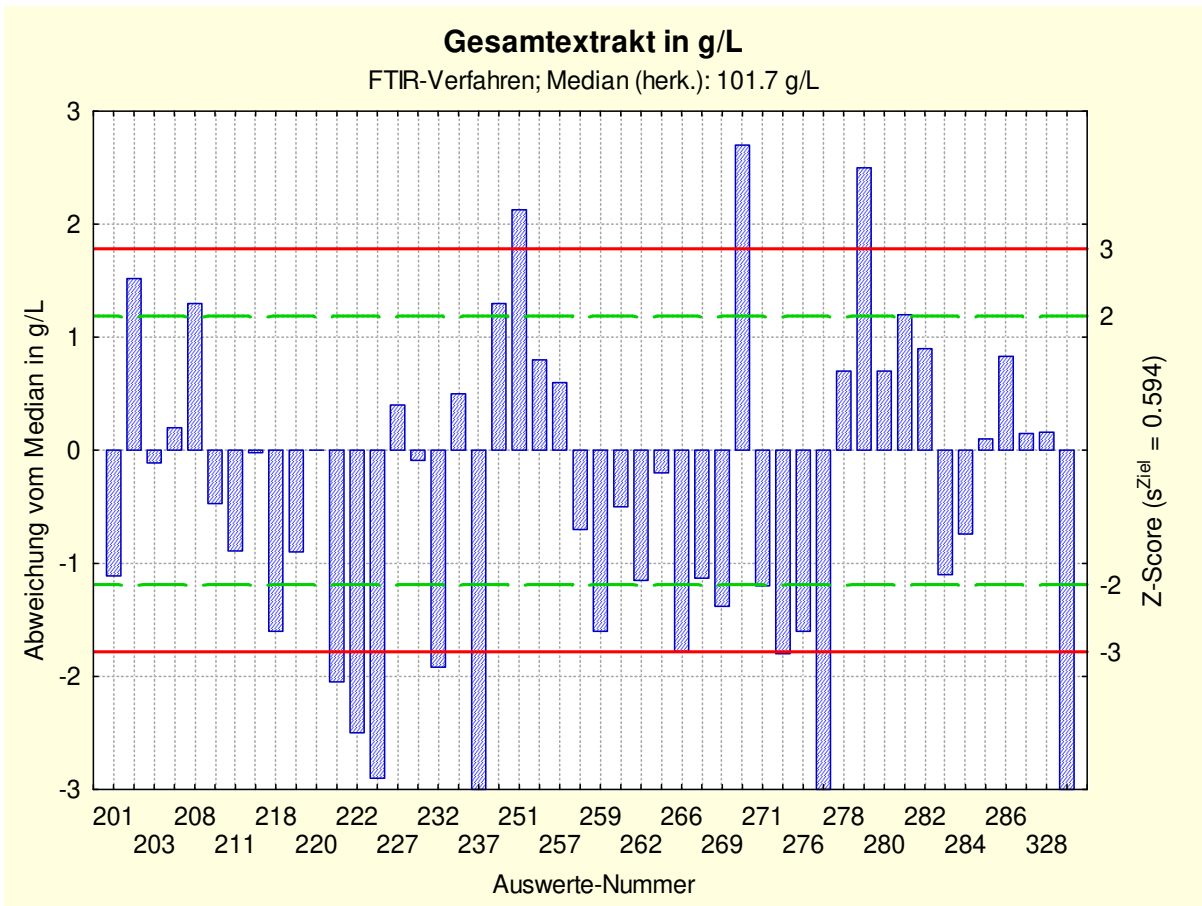
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	52
Minimalwert	100,1
Mittelwert	101,71
Median	101,70
Maximalwert	102,9
Standardabweichung (s_L)	0,512
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,071
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,869
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	(0,565)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,18
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,86
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	(0,91)
Quotient (u_M/s_H)	0,02
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,12
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	(0,13)

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

5.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	101,684	0,331
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	6	101,268	0,315
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest.	44	101,752	0,475
	herkömmliche Verfahren	53	101,686	0,469
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	36	101,270	1,595
herk./FTIR	Berechnung nach Tabarie (Basis: Dichte n. LwK 8.1 bis 8.4; FTIR-Alkohol)	1	102,300	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie (Basis: FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol)	4	101,095	1,038
k. A.	Keine Verfahrensangabe	7	100,975	1,115





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	79,65	3,450	1,54	1,64	
02	LwK 4.5	74,68	-1,520	-0,68	-0,72	
05	LwK 4.5	75,50	-0,700	-0,31	-0,33	
06	LwK 4.5	73,03	-3,170	-1,41	-1,51	
08	LwK 4.5	74,97	-1,230	-0,55	-0,59	
09	LwK 4.7	79,94	3,738	1,66	1,78	
10	LwK 4.1	74,40	-1,800	-0,80	-0,86	
11	LwK 4.7	75,81	-0,390	-0,17	-0,19	
13	LwK 4.5	75,90	-0,300	-0,13	-0,14	
16	LwK 4.5	76,80	0,600	0,27	0,29	
19	LwK 4.5	76,65	0,450	0,20	0,21	
20	LwK 4.4	78,40	2,200	0,98	1,05	
21	LwK 4.7	77,74	1,540	0,69	0,73	
22	LwK 4.7	75,56	-0,640	-0,29	-0,30	
23	LwK 4.7	73,00	-3,200	-1,43	-1,52	
24	LwK 4.4	76,00	-0,200	-0,09	-0,10	
25	LwK 4.4	76,50	0,300	0,13	0,14	
26	LwK 4.5	77,76	1,560	0,69	0,74	
27	LwK 4.5	82,40	6,200	2,76	2,95	
28	LwK 4.4	77,45	1,250	0,56	0,60	
29	LwK 4.4	71,00	-5,200	-2,32	-2,48	
30	LwK 4.5	75,15	-1,050	-0,47	-0,50	
35	LwK 4.5	77,20	1,000	0,45	0,48	
37	LwK 4.3	74,20	-2,000	-0,89	-0,95	
38	LwK 4.5	78,14	1,940	0,86	0,92	
39	LwK 4.7	76,20	0,000	0,00	0,00	
40	LwK 4.5	76,00	-0,200	-0,09	-0,10	
41	LwK 4.5	76,66	0,460	0,20	0,22	
42	LwK 4.5	76,99	0,788	0,35	0,38	
44	LwK 4.5	76,10	-0,100	-0,04	-0,05	
45	LwK 4.5	77,10	0,900	0,40	0,43	
46	LwK 4.5	77,00	0,800	0,36	0,38	
49	LwK 4.5	76,10	-0,100	-0,04	-0,05	
51	LwK 4.5	75,97	-0,230	-0,10	-0,11	
52	LwK 4.5	78,00	1,800	0,80	0,86	
54	LwK 4.5	78,40	2,200	0,98	1,05	
55	LwK 4.5	75,43	-0,770	-0,34	-0,37	
59	LwK 4.4	75,00	-1,200	-0,53	-0,57	
60	LwK 4.7	75,30	-0,900	-0,40	-0,43	
62	LwK 4.5	74,98	-1,220	-0,54	-0,58	
63	LwK 4.4	76,60	0,400	0,18	0,19	
66	LwK 4.4	74,60	-1,600	-0,71	-0,76	
68	LwK 4.5	75,69	-0,510	-0,23	-0,24	
72	LwK 4.4	79,40	3,200	1,43	1,52	
73	LwK 4.4	80,20	4,000	1,78	1,90	
74	LwK 4.5	79,38	3,180	1,42	1,51	
78	LwK 4.5	76,78	0,580	0,26	0,28	
79	LwK 4.3	81,50	5,300	2,36	2,52	
80	LwK 4.4	76,60	0,400	0,18	0,19	
99	LwK 4.7	74,56	-1,635	-0,73	-0,78	
109	LwK 4.4	79,20	3,000	1,34	1,43	
110	LwK 4.7	76,80	0,600	0,27	0,29	
111	NMR	72,79	-3,415	-1,52	-1,63	
112	NMR	76,61	0,413	0,18	0,20	
113	NMR	73,16	-3,040	-1,35	-1,45	
114	NMR	74,87	-1,330	-0,59	-0,63	
115	NMR	72,37	-3,830	-1,71	-1,82	
116	NMR	74,87	-1,327	-0,59	-0,63	

5.4.2 FTIR-Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	76,60	0,400	0,18	0,19	
202	LwK 4.8	74,83	-1,370	-0,61	-0,65	
203	LwK 4.8	75,30	-0,900	-0,40	-0,43	
205	LwK 4.8	77,29	1,090	0,49	0,52	
206	LwK 4.8	77,21	1,010	0,45	0,48	
207	LwK 4.8	75,50	-0,700	-0,31	-0,33	
208	LwK 4.8	75,78	-0,420	-0,19	-0,20	
210	LwK 4.8	75,68	-0,520	-0,23	-0,25	
211	LwK 4.8	75,12	-1,080	-0,48	-0,51	
212	LwK 4.8	75,25	-0,950	-0,42	-0,45	
213	LwK 4.8	77,36	1,160	0,52	0,55	
215	LwK 4.8	77,30	1,100	0,49	0,52	
216	LwK 4.8	74,41	-1,790	-0,80	-0,85	
217	LwK 4.8	71,15	-5,050	-2,25	-2,40	
218	LwK 4.8	74,94	-1,260	-0,56	-0,60	
219	LwK 4.8	75,23	-0,970	-0,43	-0,46	
220	LwK 4.8	73,20	-3,000	-1,34	-1,43	
221	LwK 4.8	74,59	-1,610	-0,72	-0,77	
223	LwK 4.8	72,90	-3,300	-1,47	-1,57	
224	LwK 4.8	77,00	0,800	0,36	0,38	
225	LwK 4.8	76,74	0,540	0,24	0,26	
226	LwK 4.8	75,79	-0,410	-0,18	-0,20	
227	LwK 4.8	80,30	4,100	1,83	1,95	
228	LwK 4.8	77,81	1,610	0,72	0,77	
229	LwK 4.8	76,00	-0,200	-0,09	-0,10	
230	LwK 4.8	73,94	-2,260	-1,01	-1,08	
232	LwK 4.8	73,24	-2,960	-1,32	-1,41	
234	LwK 4.8	80,15	3,950	1,76	1,88	
235	LwK 4.8	75,40	-0,800	-0,36	-0,38	
236	LwK 4.8	77,30	1,100	0,49	0,52	
237	LwK 4.8	74,11	-2,090	-0,93	-1,00	
240	LwK 4.8	74,21	-1,990	-0,89	-0,95	
241	LwK 4.8	75,95	-0,250	-0,11	-0,12	
242	LwK 4.8	75,52	-0,680	-0,30	-0,32	
243	LwK 4.8	74,90	-1,300	-0,58	-0,62	
244	LwK 4.8	75,15	-1,050	-0,47	-0,50	
245	LwK 4.8	74,09	-2,110	-0,94	-1,00	
246	LwK 4.8	72,70	-3,500	-1,56	-1,67	
247	LwK 4.8	23,66	-52,540	-23,40	-25,02	(***)
248	LwK 4.8	72,30	-3,900	-1,74	-1,86	
249	LwK 4.8	78,89	2,690	1,20	1,28	
250	LwK 4.8	74,10	-2,100	-0,94	-1,00	
251	LwK 4.8	78,00	1,800	0,80	0,86	
253	LwK 4.8	79,10	2,900	1,29	1,38	
254	LwK 4.8	77,10	0,900	0,40	0,43	
255	LwK 4.8	77,00	0,800	0,36	0,38	
256	LwK 4.8	78,79	2,590	1,15	1,23	
257	LwK 4.8	73,40	-2,800	-1,25	-1,33	
258	LwK 4.8	89,00	12,800	5,70	6,09	(***)
259	LwK 4.8	74,10	-2,100	-0,94	-1,00	
260	LwK 4.8	75,00	-1,200	-0,53	-0,57	
261	LwK 4.8	71,75	-4,450	-1,98	-2,12	
262	LwK 4.8	76,60	0,400	0,18	0,19	
263	LwK 4.8	75,70	-0,500	-0,22	-0,24	
264	LwK 4.8	78,15	1,950	0,87	0,93	
265	LwK 4.8	73,61	-2,590	-1,15	-1,23	
266	LwK 4.8	77,13	0,930	0,41	0,44	
267	LwK 4.8	76,03	-0,170	-0,08	-0,08	
268	LwK 4.8	72,88	-3,320	-1,48	-1,58	
269	LwK 4.8	72,96	-3,240	-1,44	-1,54	
270	LwK 4.8	77,70	1,500	0,67	0,71	
271	LwK 4.8	77,96	1,760	0,78	0,84	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 4.8	77,62	1,420	0,63	0,68	
274	LwK 4.8	79,44	3,240	1,44	1,54	
275	LwK 4.8	76,83	0,630	0,28	0,30	
276	LwK 4.8	75,30	-0,900	-0,40	-0,43	
277	LwK 4.8	68,33	-7,870	-3,51	-3,75	
278	LwK 4.8	76,30	0,100	0,04	0,05	
279	LwK 4.8	78,30	2,100	0,94	1,00	
280	LwK 4.8	74,75	-1,450	-0,65	-0,69	
281	LwK 4.8	81,72	5,520	2,46	2,63	
283	LwK 4.8	7,93	-68,270	-30,41	-32,50	(***)
284	LwK 4.8	74,55	-1,650	-0,73	-0,79	
285	LwK 4.8	72,30	-3,900	-1,74	-1,86	
286	LwK 4.8	77,51	1,310	0,58	0,62	
287	LwK 4.8	74,70	-1,500	-0,67	-0,71	
321	LwK 4.8	76,83	0,630	0,28	0,30	
328	LwK 4.8	76,03	-0,170	-0,08	-0,08	
330	LwK 4.8	76,90	0,700	0,31	0,33	
337	LwK 4.8	73,11	-3,090	-1,38	-1,47	

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

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

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	76,60	0,400	0,18	0,19	
202	LwK 4.8	74,83	-1,370	-0,61	-0,65	
203	LwK 4.8	75,30	-0,900	-0,40	-0,43	
205	LwK 4.8	77,29	1,090	0,49	0,52	
207	LwK 4.8	75,50	-0,700	-0,31	-0,33	
208	LwK 4.8	75,78	-0,420	-0,19	-0,20	
210	LwK 4.8	75,68	-0,520	-0,23	-0,25	
211	LwK 4.8	75,12	-1,080	-0,48	-0,51	
212	LwK 4.8	74,98	-1,220	-0,54	-0,58	
213	LwK 4.8	75,06	-1,140	-0,51	-0,54	
215	LwK 4.8	73,20	-3,000	-1,34	-1,43	
216	LwK 4.8	74,41	-1,790	-0,80	-0,85	
217	LwK 4.8	69,12	-7,080	-3,15	-3,37	
218	LwK 4.8	68,50	-7,700	-3,43	-3,67	
219	LwK 4.8	75,23	-0,970	-0,43	-0,46	
220	LwK 4.8	53,15	-23,050	-10,27	-10,97	(***)
221	LwK 4.8	74,59	-1,610	-0,72	-0,77	
222	LwK 4.8	77,13	0,930	0,41	0,44	
223	LwK 4.8	72,90	-3,300	-1,47	-1,57	
224	LwK 4.8	73,60	-2,600	-1,16	-1,24	
225	LwK 4.8	76,14	-0,060	-0,03	-0,03	
226	LwK 4.8	75,79	-0,410	-0,18	-0,20	
227	LwK 4.8	81,20	5,000	2,23	2,38	
228	LwK 4.8	74,84	-1,360	-0,61	-0,65	
229	LwK 4.8	73,36	-2,840	-1,26	-1,35	
230	LwK 4.8	73,27	-2,930	-1,30	-1,40	
232	LwK 4.8	73,24	-2,960	-1,32	-1,41	
234	LwK 4.8	73,00	-3,200	-1,43	-1,52	
235	LwK 4.8	60,20	-16,000	-7,13	-7,62	(***)
236	LwK 4.8	74,50	-1,700	-0,76	-0,81	
237	LwK 4.8	67,94	-8,260	-3,68	-3,93	
240	LwK 4.8	74,21	-1,990	-0,89	-0,95	
241	LwK 4.8	78,18	1,980	0,88	0,94	
242	LwK 4.8	75,52	-0,680	-0,30	-0,32	
243	LwK 4.8	75,40	-0,800	-0,36	-0,38	
244	LwK 4.8	74,68	-1,520	-0,68	-0,72	
245	LwK 4.8	69,87	-6,330	-2,82	-3,01	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse (nachberechnet)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
246	LwK 4.8	72,70	-3,500	-1,56	-1,67	
248	LwK 4.8	72,50	-3,700	-1,65	-1,76	
249	LwK 4.8	76,60	0,400	0,18	0,19	
250	LwK 4.8	74,20	-2,000	-0,89	-0,95	
251	LwK 4.8	78,05	1,850	0,82	0,88	
253	LwK 4.8	75,40	-0,800	-0,36	-0,38	
255	LwK 4.8	77,10	0,900	0,40	0,43	
256	LwK 4.8	78,50	2,300	1,02	1,10	
257	LwK 4.8	73,40	-2,800	-1,25	-1,33	
258	LwK 4.8	95,10	18,900	8,42	9,00	(***)
259	LwK 4.8	72,70	-3,500	-1,56	-1,67	
260	LwK 4.8	77,00	0,800	0,36	0,38	
261	LwK 4.8	72,89	-3,310	-1,47	-1,58	
262	LwK 4.8	76,60	0,400	0,18	0,19	
263	LwK 4.8	74,00	-2,200	-0,98	-1,05	
264	LwK 4.8	78,15	1,950	0,87	0,93	
265	LwK 4.8	76,84	0,640	0,29	0,30	
266	LwK 4.8	77,13	0,930	0,41	0,44	
267	LwK 4.8	73,95	-2,250	-1,00	-1,07	
269	LwK 4.8	74,57	-1,630	-0,73	-0,78	
270	LwK 4.8	75,87	-0,330	-0,15	-0,16	
271	LwK 4.8	78,00	1,800	0,80	0,86	
273	LwK 4.8	72,87	-3,330	-1,48	-1,59	
274	LwK 4.8	76,52	0,320	0,14	0,15	
275	LwK 4.8	76,84	0,640	0,29	0,30	
276	LwK 4.8	72,50	-3,700	-1,65	-1,76	
277	LwK 4.8	68,33	-7,870	-3,51	-3,75	
278	LwK 4.8	76,30	0,100	0,04	0,05	
280	LwK 4.8	76,17	-0,030	-0,01	-0,01	
281	LwK 4.8	81,70	5,500	2,45	2,62	
282	LwK 4.8	80,90	4,700	2,09	2,24	
283	LwK 4.8	77,48	1,280	0,57	0,61	
284	LwK 4.8	81,41	5,210	2,32	2,48	
285	LwK 4.8	76,00	-0,200	-0,09	-0,10	
286	LwK 4.8	75,84	-0,360	-0,16	-0,17	
287	LwK 4.8	74,50	-1,700	-0,76	-0,81	
312	LwK 4.8	74,25	-1,950	-0,87	-0,93	
321	LwK 4.8	76,11	-0,090	-0,04	-0,04	
328	LwK 4.8	76,03	-0,170	-0,08	-0,08	
330	LwK 4.8	74,20	-2,000	-0,89	-0,95	
337	LwK 4.8	78,63	2,430	1,08	1,16	

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

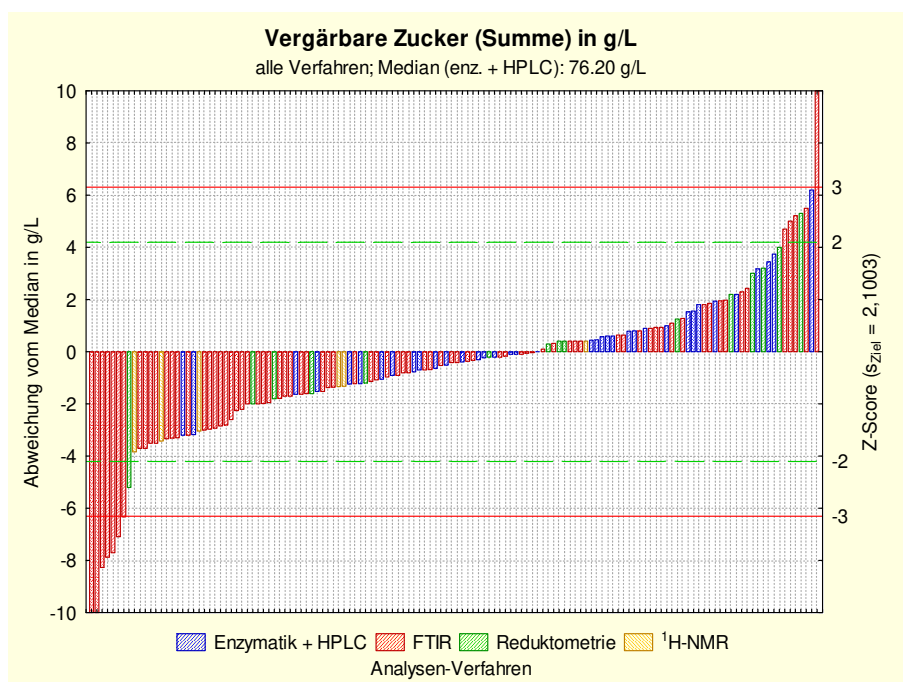
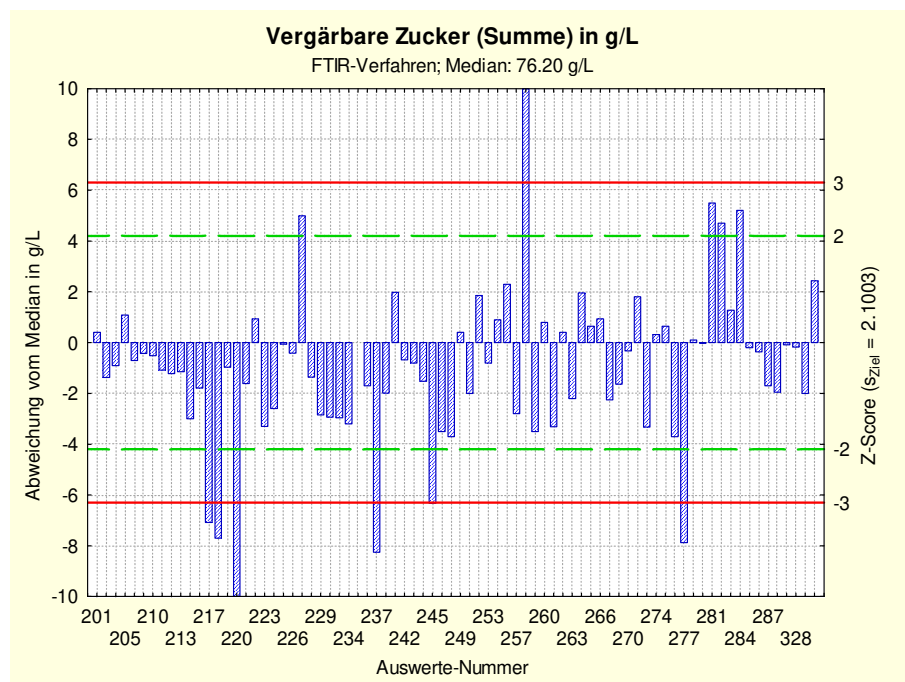
5.4.4 Deskriptive Ergebnisse

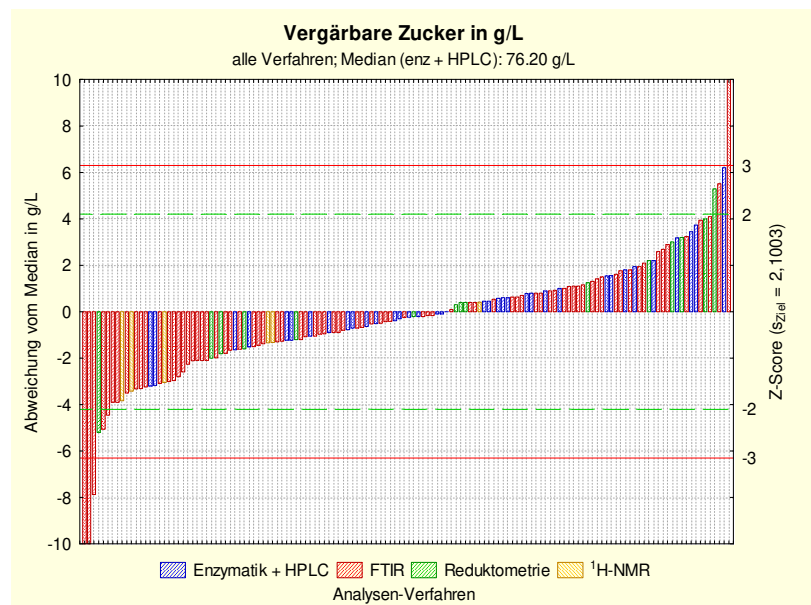
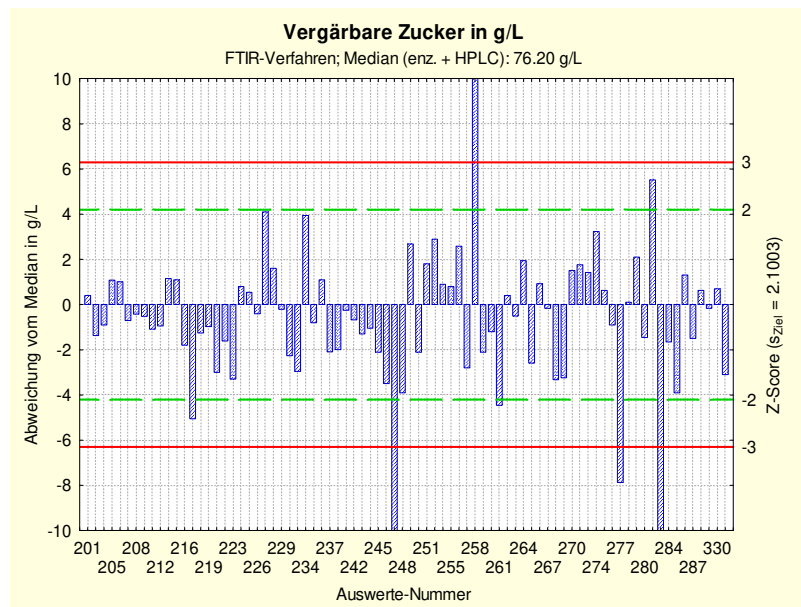
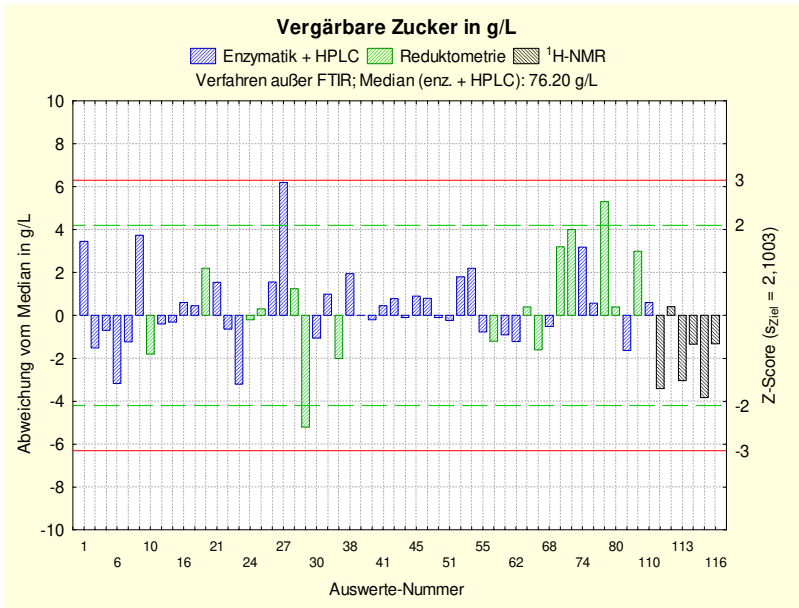
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L] HPLC + enzymatisch	alle Daten
Gültige Werte	37
Minimalwert	73,00
Mittelwert	76,576
Median	76,200
Maximalwert	82,40
Standardabweichung (s _L)	1,846
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,303
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,245
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	2,100
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR}) ^{*)}	(0,584)
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,82
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,88
Quotient (s _L /s _{FTIR}) ^{*)}	(3,16)
Quotient (u _M /s _H)	0,14
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,14
Quotient (u _M /s _{FTIR}) ^{*)}	(0,52)

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

5.4.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	74,400	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	77,850	5,854
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	12	76,948	2,346
	reduktometrische Verfahren	15	76,812	2,756
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	28	76,599	1,477
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	75,996	1,937
	enzymatische und HPLC-Verfahren	37	76,459	1,499
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt)	80	75,655	2,305
	Basis: Vergärbare Zucker (FTIR Summe)	78	75,195	2,332
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	74,066	1,742





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	24,40	0,956	1,16	1,41	
02	enzymat., autom.	23,62	0,176	0,21	0,26	
03	enzymat., autom.	23,76	0,316	0,38	0,47	
04	enzymat., autom. 2	24,37	0,926	1,12	1,37	
05	enzymat., autom.	23,30	-0,144	-0,17	-0,21	
08	enzymat. Hand	23,21	-0,234	-0,28	-0,35	
09	HPLC	27,00	3,556	4,31	5,26	(**)
10	enzymat., autom.	23,43	-0,014	-0,02	-0,02	
11	HPLC	22,90	-0,544	-0,66	-0,80	
13	enzymat., autom.	23,29	-0,154	-0,19	-0,23	
16	enzymat., autom.	23,10	-0,344	-0,42	-0,51	
19	enzymat., autom.	23,36	-0,084	-0,10	-0,12	
21	HPLC	24,10	0,656	0,80	0,97	
22	HPLC	23,78	0,336	0,41	0,50	
23	HPLC	22,10	-1,344	-1,63	-1,99	
26	enzymat., autom.	23,34	-0,104	-0,13	-0,15	
27	enzymat., autom.	24,90	1,456	1,77	2,15	
30	enzymat., autom.	23,37	-0,073	-0,09	-0,11	
35	enzymat., autom.	23,40	-0,044	-0,05	-0,07	
38	enzymat., autom.	24,06	0,616	0,75	0,91	
39	HPLC	23,50	0,056	0,07	0,08	
40	enzymat., autom.	23,56	0,113	0,14	0,17	
41	enzymat., autom.	22,86	-0,584	-0,71	-0,86	
42	enzymat., autom.	23,44	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	23,80	0,356	0,43	0,53	
45	enzymat., autom.	24,90	1,456	1,77	2,15	
46	enzymat., autom.	23,50	0,056	0,07	0,08	
49	enzymat., autom.	23,90	0,456	0,55	0,67	
51	enzymat., autom.	23,54	0,096	0,12	0,14	
52	enzymat., autom.	23,37	-0,074	-0,09	-0,11	
55	enzymat., autom.	23,28	-0,164	-0,20	-0,24	
60	HPLC	23,70	0,256	0,31	0,38	
62	enzymat., autom.	23,18	-0,267	-0,32	-0,40	
68	enzymat., autom.	23,02	-0,424	-0,51	-0,63	
78	enzymat. Hand	23,54	0,096	0,12	0,14	
91	HPLC	22,89	-0,554	-0,67	-0,82	
99	HPLC	23,16	-0,279	-0,34	-0,41	
110	HPLC	23,70	0,256	0,31	0,38	
111	NMR	22,68	-0,762	-0,92	-1,13	
112	NMR	23,66	0,213	0,26	0,32	
113	NMR	22,49	-0,954	-1,16	-1,41	
114	NMR	23,40	-0,047	-0,06	-0,07	
115	NMR	22,75	-0,694	-0,84	-1,03	
116	NMR	22,93	-0,511	-0,62	-0,76	
117	NMR	24,33	0,883	1,07	1,31	

(**) 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	22,36	-1,084	-1,31	-1,60	
202	FTIR	23,12	-0,324	-0,39	-0,48	
203	FTIR	22,87	-0,574	-0,70	-0,85	
205	FTIR	25,37	1,926	2,33	2,85	
207	FTIR	21,90	-1,544	-1,87	-2,28	
208	FTIR	23,66	0,216	0,26	0,32	
210	FTIR	22,26	-1,184	-1,44	-1,75	
211	FTIR	24,65	1,206	1,46	1,78	
212	FTIR	22,32	-1,124	-1,36	-1,66	
213	FTIR	24,02	0,576	0,70	0,85	
215	FTIR	22,90	-0,544	-0,66	-0,80	
216	FTIR	22,00	-1,444	-1,75	-2,14	
217	FTIR	20,80	-2,644	-3,21	-3,91	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	20,59	-2,854	-3,46	-4,22	
219	FTIR	21,93	-1,514	-1,84	-2,24	
220	FTIR	3,55	-19,894	-24,12	-29,43	(*)
221	FTIR	22,04	-1,404	-1,70	-2,08	
222	FTIR	24,43	0,986	1,20	1,46	
223	FTIR	21,90	-1,544	-1,87	-2,28	
224	FTIR	22,40	-1,044	-1,27	-1,54	
225	FTIR	23,91	0,466	0,56	0,69	
226	FTIR	22,45	-0,994	-1,21	-1,47	
227	FTIR	24,90	1,456	1,77	2,15	
228	FTIR	22,82	-0,624	-0,76	-0,92	
229	FTIR	22,73	-0,714	-0,87	-1,06	
230	FTIR	22,10	-1,344	-1,63	-1,99	
232	FTIR	22,91	-0,534	-0,65	-0,79	
234	FTIR	21,68	-1,764	-2,14	-2,61	
235	FTIR	20,70	-2,744	-3,33	-4,06	
236	FTIR	22,60	-0,844	-1,02	-1,25	
237	FTIR	21,50	-1,944	-2,36	-2,88	
240	FTIR	22,27	-1,174	-1,42	-1,74	
241	FTIR	24,00	0,556	0,67	0,82	
242	FTIR	23,14	-0,304	-0,37	-0,45	
243	FTIR	23,70	0,256	0,31	0,38	
244	FTIR	23,19	-0,254	-0,31	-0,38	
245	FTIR	22,82	-0,624	-0,76	-0,92	
246	FTIR	22,70	-0,744	-0,90	-1,10	
248	FTIR	22,10	-1,344	-1,63	-1,99	
249	FTIR	23,37	-0,074	-0,09	-0,11	
250	FTIR	24,10	0,656	0,80	0,97	
251	FTIR	24,42	0,976	1,18	1,44	
253	FTIR	22,90	-0,544	-0,66	-0,80	
255	FTIR	22,90	-0,544	-0,66	-0,80	
256	FTIR	24,11	0,666	0,81	0,99	
257	FTIR	22,20	-1,244	-1,51	-1,84	
258	FTIR	36,50	13,056	15,83	19,32	(*)
259	FTIR	22,40	-1,044	-1,27	-1,54	
260	FTIR	24,60	1,156	1,40	1,71	
261	FTIR	22,96	-0,484	-0,59	-0,72	
262	FTIR	25,70	2,256	2,73	3,34	
263	FTIR	22,30	-1,144	-1,39	-1,69	
264	FTIR	25,34	1,896	2,30	2,81	
265	FTIR	22,15	-1,294	-1,57	-1,91	
266	FTIR	24,68	1,236	1,50	1,83	
267	FTIR	22,23	-1,214	-1,47	-1,80	
269	FTIR	22,42	-1,024	-1,24	-1,52	
270	FTIR	22,73	-0,714	-0,87	-1,06	
271	FTIR	22,79	-0,654	-0,79	-0,97	
273	FTIR	21,83	-1,614	-1,96	-2,39	
274	FTIR	22,48	-0,964	-1,17	-1,43	
275	FTIR	24,58	1,136	1,38	1,68	
276	FTIR	22,20	-1,244	-1,51	-1,84	
277	FTIR	22,73	-0,714	-0,87	-1,06	
278	FTIR	24,40	0,956	1,16	1,41	
280	FTIR	21,60	-1,844	-2,24	-2,73	
281	FTIR	24,60	1,156	1,40	1,71	
282	FTIR	24,60	1,156	1,40	1,71	
283	FTIR	23,72	0,276	0,33	0,41	
284	FTIR	23,83	0,386	0,47	0,57	
285	FTIR	22,60	-0,844	-1,02	-1,25	
286	FTIR	23,45	0,006	0,01	0,01	
287	FTIR	23,60	0,156	0,19	0,23	
312	FTIR	21,98	-1,464	-1,77	-2,17	
321	FTIR	22,98	-0,464	-0,56	-0,69	
328	FTIR	23,99	0,546	0,66	0,81	
330	FTIR	22,90	-0,544	-0,66	-0,80	
337	FTIR	25,61	2,166	2,63	3,20	/

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

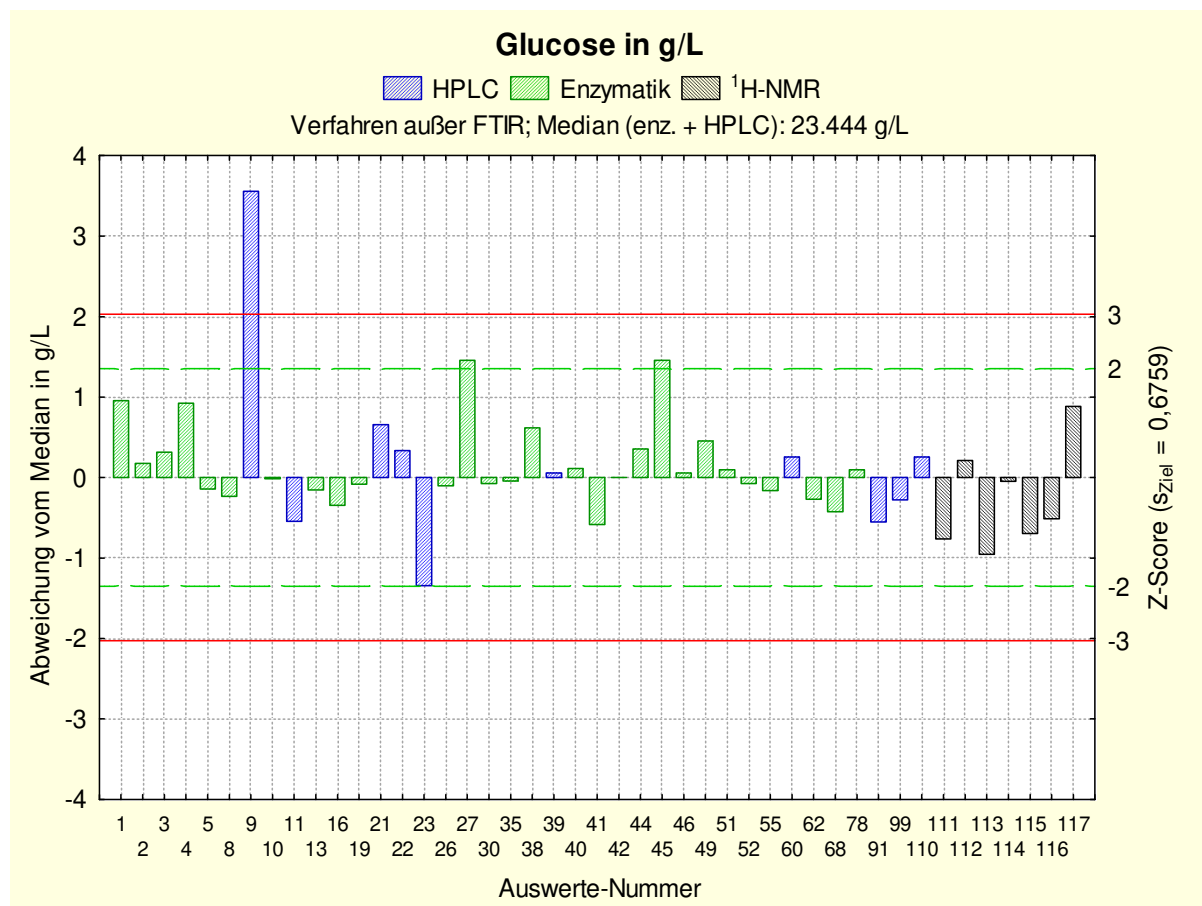
5.5.3 Deskriptive Ergebnisse

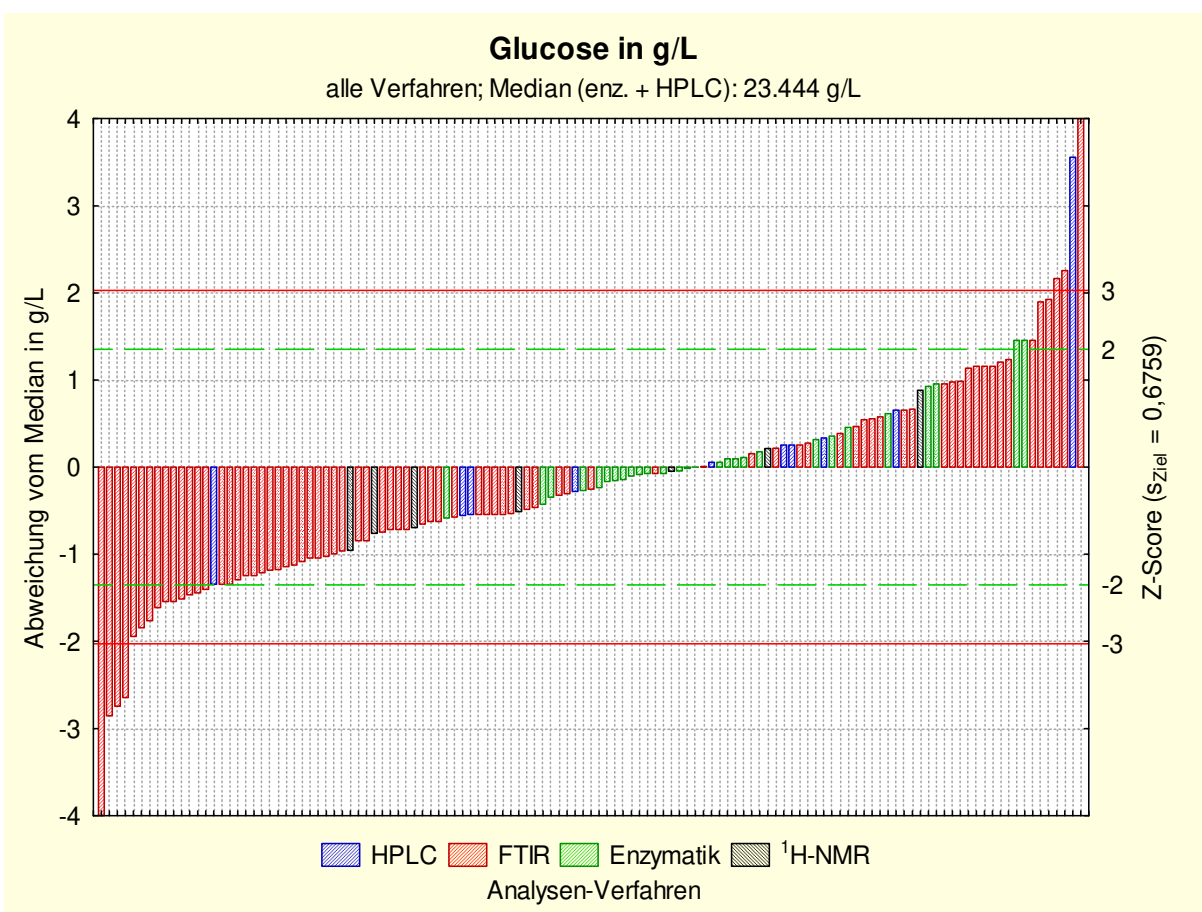
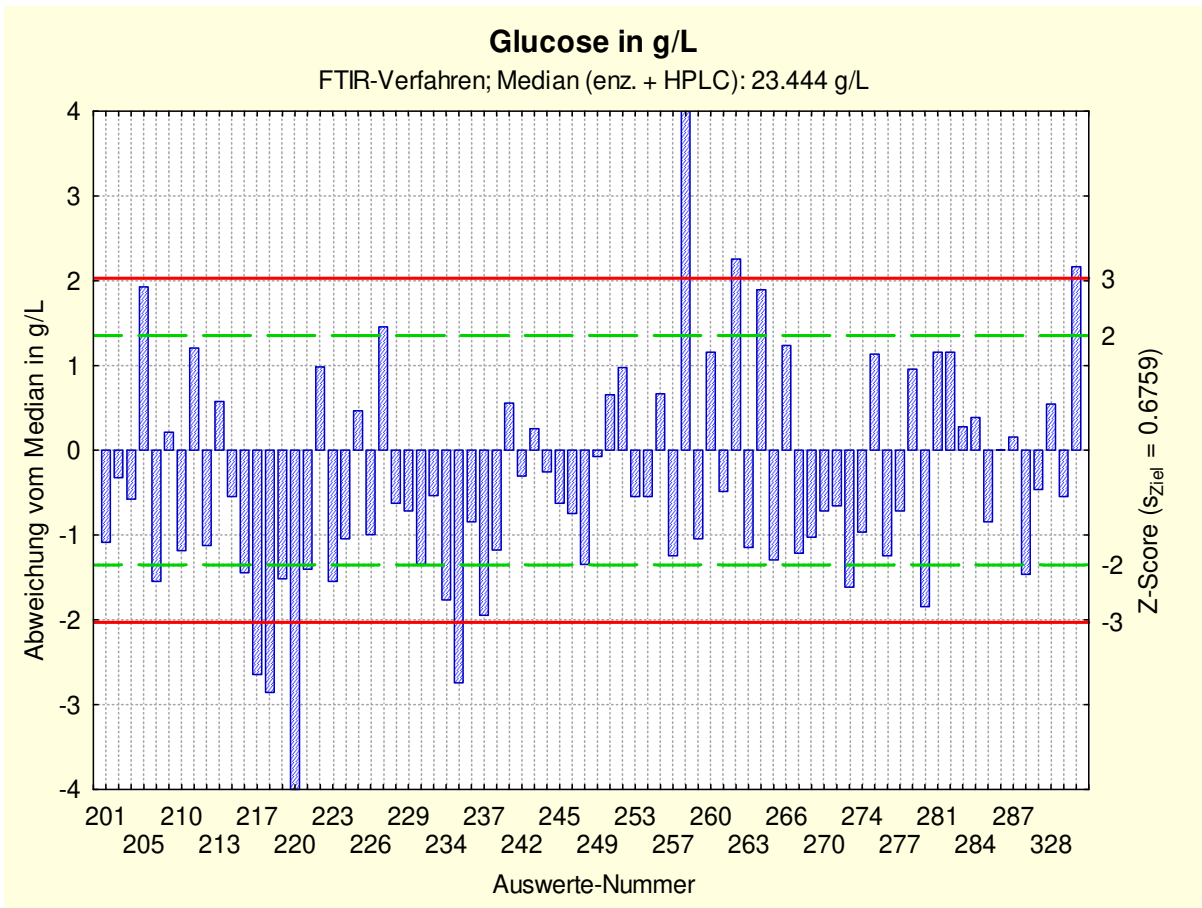
Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	38	37
Minimalwert	22,10	22,10
Mittelwert	23,622	23,531
Median	23,472	23,444
Maximalwert	27,00	24,90
Standardabweichung (s_L)	0,777	0,544
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,126	0,089
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,826	0,825
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,677	0,676
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,408)	(0,408)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,94	0,66
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,15	0,80
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,90	1,33
Quotient (u_M/s_H)	0,15	0,11
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,19	0,13
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,31	0,22

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

5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	23,467	0,735
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiert	24	23,470	0,319
enzymat., autom. 2	enzymatisch; OIV-MA-AS313-29, automatisiert	1	24,370	
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, manuell	3	23,675	0,618
	herkömmliche Verfahren	38	23,523	0,466
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	23,030	1,193
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	23,161	0,705





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	55,25	2,820	1,73	1,93	
02	enzymat., autom.	51,06	-1,370	-0,84	-0,94	
03	HPLC	52,40	-0,030	-0,02	-0,02	
04	enzymat., autom. 2	57,49	5,060	3,10	3,47	
05	enzymat., autom.	52,20	-0,230	-0,14	-0,16	
08	enzymat. Hand	51,76	-0,670	-0,41	-0,46	
09	HPLC	52,90	0,470	0,29	0,32	
10	enzymat., autom.	51,68	-0,750	-0,46	-0,51	
11	HPLC	52,91	0,480	0,29	0,33	
13	enzymat., autom.	52,65	0,220	0,13	0,15	
16	enzymat., autom.	53,70	1,270	0,78	0,87	
19	enzymat., autom.	53,29	0,860	0,53	0,59	
21	HPLC	53,64	1,210	0,74	0,83	
22	HPLC	51,78	-0,650	-0,40	-0,45	
23	HPLC	50,90	-1,530	-0,94	-1,05	
26	enzymat., autom.	54,42	1,990	1,22	1,36	
27	enzymat., autom.	57,50	5,070	3,10	3,48	
30	enzymat., autom.	51,73	-0,705	-0,43	-0,48	
35	enzymat., autom.	52,00	-0,430	-0,26	-0,29	
38	enzymat., autom.	54,80	2,370	1,45	1,62	
39	HPLC	52,30	-0,130	-0,08	-0,09	
40	enzymat., autom.	52,38	-0,052	-0,03	-0,04	
41	enzymat., autom.	53,80	1,370	0,84	0,94	
42	enzymat., autom.	53,54	1,114	0,68	0,76	
44	enzymat., autom.	52,30	-0,130	-0,08	-0,09	
45	enzymat., autom.	52,20	-0,230	-0,14	-0,16	
46	enzymat., autom.	53,50	1,070	0,65	0,73	
49	enzymat., autom.	52,20	-0,230	-0,14	-0,16	
51	enzymat., autom.	52,43	0,000	0,00	0,00	
52	enzymat., autom.	54,31	1,880	1,15	1,29	
55	enzymat., autom.	52,15	-0,280	-0,17	-0,19	
60	HPLC	53,00	0,570	0,35	0,39	
62	enzymat., autom.	51,80	-0,634	-0,39	-0,43	
68	enzymat., autom.	52,05	-0,380	-0,23	-0,26	
78	enzymat. Hand	53,25	0,820	0,50	0,56	
91	HPLC	55,52	3,090	1,89	2,12	
99	HPLC	51,40	-1,030	-0,63	-0,71	
111	NMR	50,09	-2,344	-1,43	-1,61	
112	NMR	52,94	0,515	0,32	0,35	
113	NMR	50,67	-1,760	-1,08	-1,21	
114	NMR	51,47	-0,957	-0,59	-0,66	
115	NMR	49,62	-2,810	-1,72	-1,93	
116	NMR	51,94	-0,490	-0,30	-0,34	
117	NMR	49,45	-2,981	-1,82	-2,04	

5.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	54,24	1,810	1,11	1,24	
202	FTIR	51,71	-0,720	-0,44	-0,49	
203	FTIR	52,43	0,000	0,00	0,00	
205	FTIR	51,92	-0,510	-0,31	-0,35	
207	FTIR	53,60	1,170	0,72	0,80	
208	FTIR	52,12	-0,310	-0,19	-0,21	
210	FTIR	53,42	0,990	0,61	0,68	
211	FTIR	50,47	-1,960	-1,20	-1,34	
212	FTIR	52,66	0,230	0,14	0,16	
213	FTIR	51,04	-1,390	-0,85	-0,95	
215	FTIR	50,30	-2,130	-1,30	-1,46	
216	FTIR	52,41	-0,020	-0,01	-0,01	
217	FTIR	48,32	-4,110	-2,51	-2,82	
218	FTIR	47,91	-4,520	-2,77	-3,10	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	53,30	0,870	0,53	0,60	
220	FTIR	49,60	-2,830	-1,73	-1,94	
221	FTIR	52,55	0,120	0,07	0,08	
222	FTIR	52,70	0,270	0,17	0,19	
223	FTIR	51,00	-1,430	-0,87	-0,98	
224	FTIR	51,20	-1,230	-0,75	-0,84	
225	FTIR	52,23	-0,200	-0,12	-0,14	
226	FTIR	53,34	0,910	0,56	0,62	
227	FTIR	56,30	3,870	2,37	2,65	
228	FTIR	52,02	-0,410	-0,25	-0,28	
229	FTIR	50,63	-1,800	-1,10	-1,23	
230	FTIR	51,17	-1,260	-0,77	-0,86	
232	FTIR	50,33	-2,100	-1,28	-1,44	
234	FTIR	51,32	-1,110	-0,68	-0,76	
235	FTIR	39,50	-12,930	-7,91	-8,87	(***)
236	FTIR	51,90	-0,530	-0,32	-0,36	
237	FTIR	46,44	-5,990	-3,67	-4,11	
240	FTIR	51,94	-0,490	-0,30	-0,34	
241	FTIR	54,18	1,750	1,07	1,20	
242	FTIR	52,38	-0,050	-0,03	-0,03	
243	FTIR	51,70	-0,730	-0,45	-0,50	
244	FTIR	51,49	-0,940	-0,58	-0,64	
245	FTIR	47,05	-5,380	-3,29	-3,69	
246	FTIR	50,00	-2,430	-1,49	-1,67	
248	FTIR	50,40	-2,030	-1,24	-1,39	
249	FTIR	53,23	0,800	0,49	0,55	
250	FTIR	50,10	-2,330	-1,43	-1,60	
251	FTIR	53,63	1,200	0,73	0,82	
253	FTIR	52,50	0,070	0,04	0,05	
255	FTIR	54,20	1,770	1,08	1,21	
256	FTIR	54,39	1,960	1,20	1,34	
257	FTIR	51,20	-1,230	-0,75	-0,84	
258	FTIR	58,60	6,170	3,78	4,23	
259	FTIR	50,30	-2,130	-1,30	-1,46	
260	FTIR	52,40	-0,030	-0,02	-0,02	
261	FTIR	49,93	-2,500	-1,53	-1,71	
262	FTIR	50,90	-1,530	-0,94	-1,05	
263	FTIR	51,70	-0,730	-0,45	-0,50	
264	FTIR	52,81	0,380	0,23	0,26	
265	FTIR	54,69	2,260	1,38	1,55	
266	FTIR	52,45	0,020	0,01	0,01	
267	FTIR	51,72	-0,710	-0,43	-0,49	
269	FTIR	52,15	-0,280	-0,17	-0,19	
270	FTIR	53,14	0,710	0,43	0,49	
271	FTIR	55,21	2,780	1,70	1,91	
273	FTIR	51,04	-1,390	-0,85	-0,95	
274	FTIR	54,04	1,610	0,99	1,10	
275	FTIR	52,26	-0,170	-0,10	-0,12	
276	FTIR	50,30	-2,130	-1,30	-1,46	
277	FTIR	45,60	-6,830	-4,18	-4,68	
278	FTIR	51,90	-0,530	-0,32	-0,36	
280	FTIR	54,57	2,140	1,31	1,47	
281	FTIR	57,10	4,670	2,86	3,20	
282	FTIR	56,30	3,870	2,37	2,65	
283	FTIR	53,76	1,330	0,81	0,91	
284	FTIR	57,58	5,150	3,15	3,53	
285	FTIR	53,40	0,970	0,59	0,67	
286	FTIR	52,39	-0,040	-0,02	-0,03	
287	FTIR	50,90	-1,530	-0,94	-1,05	
312	FTIR	52,27	-0,160	-0,10	-0,11	
321	FTIR	53,13	0,700	0,43	0,48	
328	FTIR	52,04	-0,390	-0,24	-0,27	
330	FTIR	51,30	-1,130	-0,69	-0,77	
337	FTIR	53,02	0,590	0,36	0,40	

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

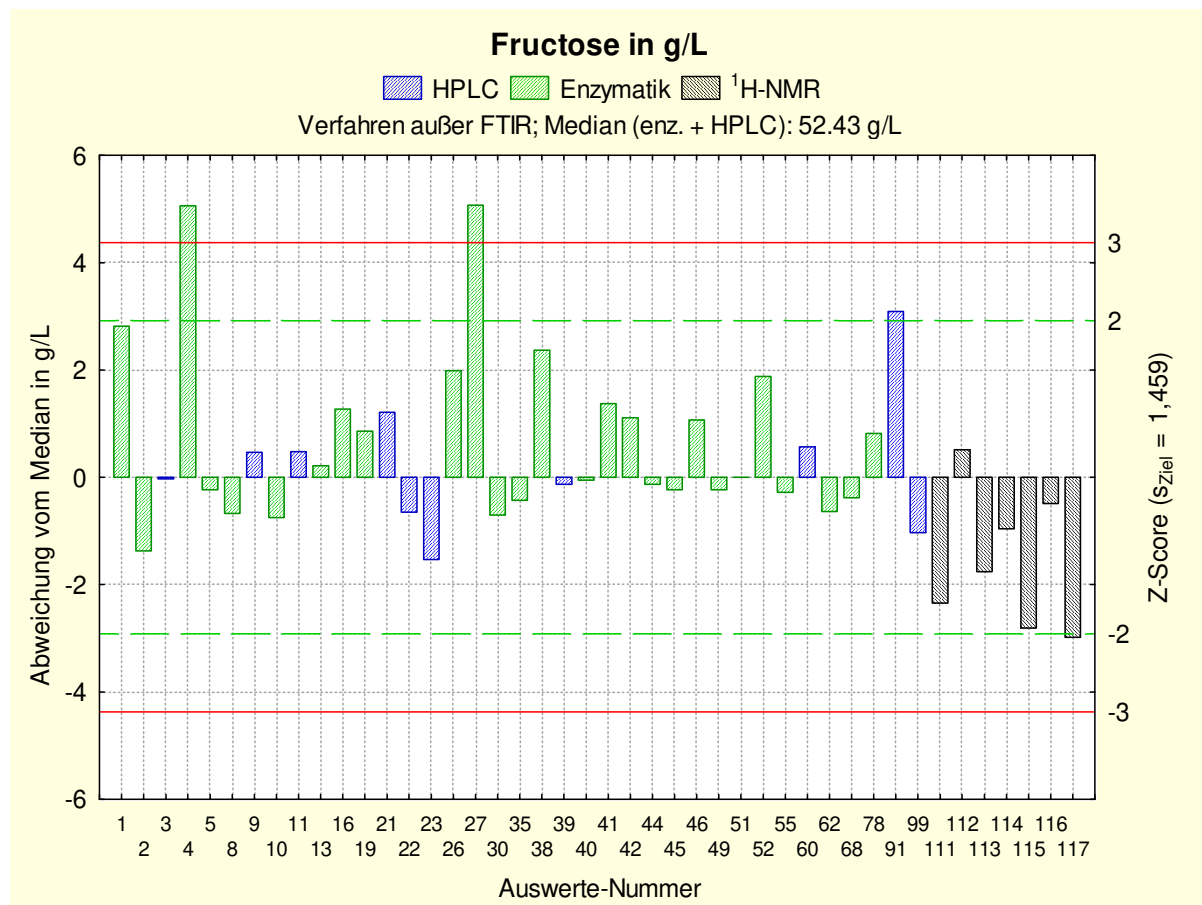
5.6.3 Deskriptive Ergebnisse

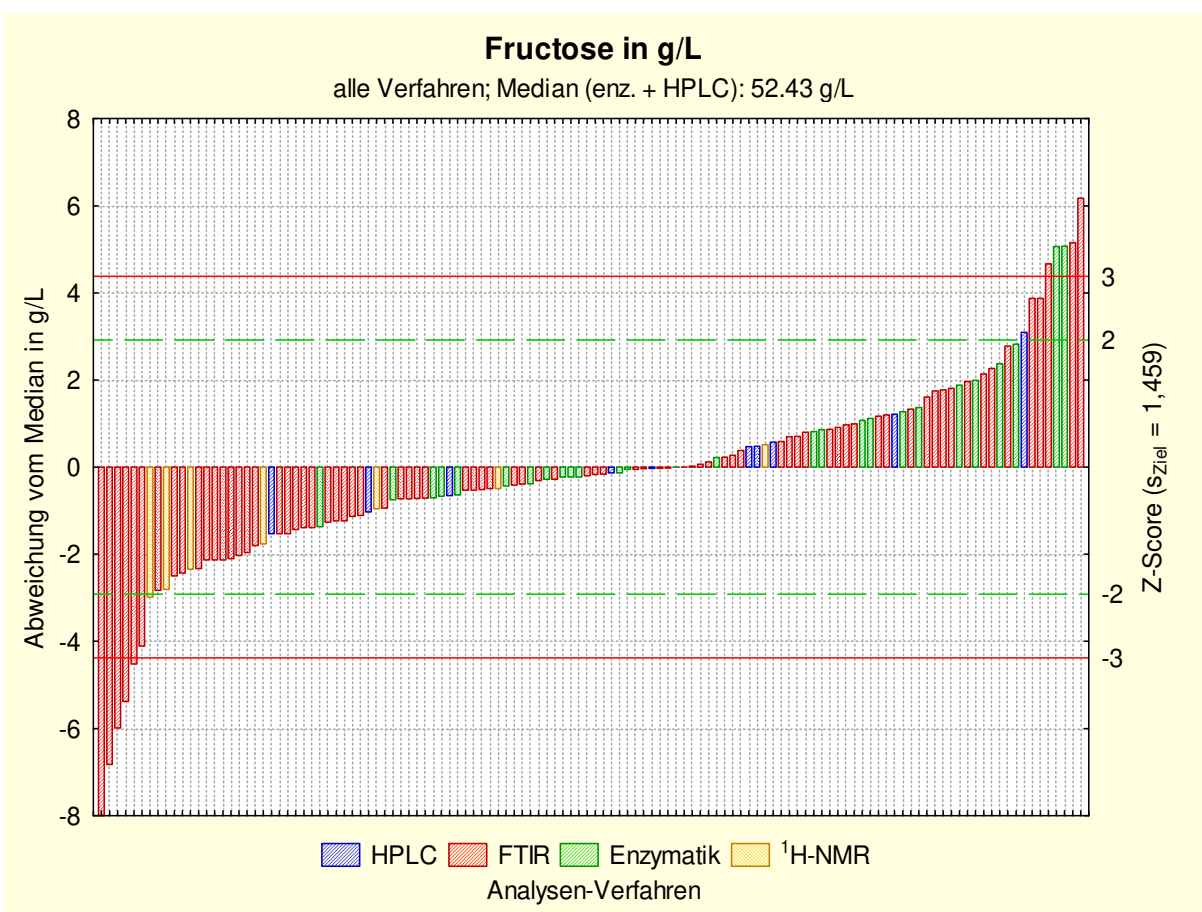
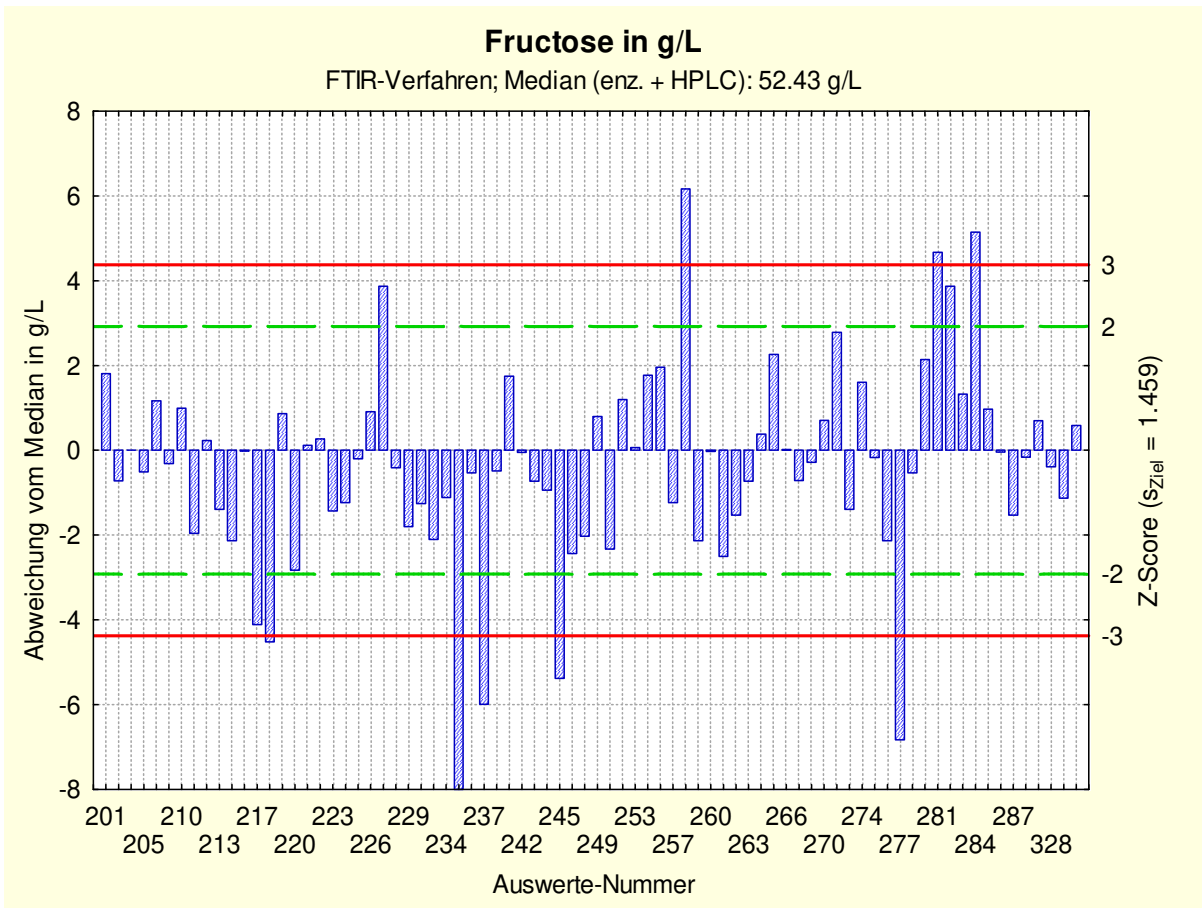
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	37
Minimalwert	50,90
Mittelwert	53,032
Median	52,430
Maximalwert	57,50
Standardabweichung (s _L)	1,548
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,255
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,634
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	1,459
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp FTIR}) ¹⁾	(0,330)
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,95
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,06
Quotient (s _L /s _{exp FTIR}) ¹⁾	(4,69)
Quotient (u _M /s _H)	0,16
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,17
Quotient (u _M /s _{FTIR}) ¹⁾	(0,77)

¹⁾ Die FTIR-Laboregebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp herk} bewertet.

5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	52,552	1,156
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, automatisiert	23	52,797	1,165
enzymat. autom. 2	enzymatisch; OIV-MA-AS313-29, automatisiert	1	57,490	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	3	53,420	1,986
	herkömmliche Verfahren	37	52,832	1,243
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	52,113	1,799
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	50,883	1,468





5.7 Glycerin [g/L]

5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,65	1,345	4,98	
02	enzymat. autom.	6,41	0,105	0,39	
03	enzymat. autom.	5,99	-0,315	-1,17	
04	enzymat. autom.	6,31	0,005	0,02	
05	enzymat. autom.	6,35	0,045	0,17	
06	enzymat. Hand	6,43	0,123	0,45	
08	HPLC	5,33	-0,975	-3,61	
09	enzymat. autom.	5,84	-0,465	-1,72	
10	enzymat. Hand	6,33	0,025	0,09	
11	HPLC	5,97	-0,335	-1,24	
21	HPLC	6,42	0,115	0,43	
22	HPLC	6,24	-0,065	-0,24	
23	HPLC	6,30	-0,005	-0,02	
27	HPLC	7,00	0,695	2,57	
39	HPLC	6,30	-0,005	-0,02	
42	HPLC	6,23	-0,078	-0,29	
60	HPLC	6,40	0,095	0,35	
78	enzymat. Hand	6,19	-0,115	-0,43	
91	HPLC	6,62	0,315	1,17	
99	HPLC	6,16	-0,142	-0,53	
111	NMR	8,11	1,807	6,68	(***)
112	NMR	7,39	1,083	4,00	
113	NMR	7,55	1,245	4,61	
114	NMR	7,19	0,886	3,28	
115	NMR	6,34	0,035	0,13	
116	NMR	7,37	1,066	3,94	

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

5.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,69	0,385	1,42	1,11	
202	FTIR	5,74	-0,565	-2,09	-1,62	
203	FTIR	6,15	-0,155	-0,57	-0,45	
205	FTIR	5,83	-0,475	-1,76	-1,36	
206	FTIR	6,30	-0,005	-0,02	-0,01	
207	FTIR	8,90	2,595	9,60	7,46	(**)
208	FTIR	6,40	0,095	0,35	0,27	
210	FTIR	8,54	2,235	8,27	6,42	(**)
211	FTIR	5,90	-0,405	-1,50	-1,16	
212	FTIR	6,88	0,575	2,13	1,65	
213	FTIR	5,79	-0,512	-1,89	-1,47	
215	FTIR	6,90	0,595	2,20	1,71	
216	FTIR	9,59	3,285	12,15	9,44	(*)
217	FTIR	9,74	3,435	12,71	9,87	(*)
218	FTIR	7,02	0,715	2,64	2,05	
219	FTIR	9,30	2,995	11,08	8,61	(**)
220	FTIR	10,30	3,995	14,78	11,48	(*)
221	FTIR	7,14	0,835	3,09	2,40	
222	FTIR	8,21	1,905	7,05	5,47	(**)
223	FTIR	6,15	-0,155	-0,57	-0,45	
224	FTIR	7,00	0,695	2,57	2,00	
225	FTIR	5,96	-0,345	-1,28	-0,99	
226	FTIR	7,16	0,855	3,16	2,46	
227	FTIR	6,40	0,095	0,35	0,27	
228	FTIR	7,61	1,305	4,83	3,75	
229	FTIR	7,27	0,965	3,57	2,77	
230	FTIR	8,38	2,075	7,68	5,96	(**)
232	FTIR	6,62	0,315	1,17	0,91	

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

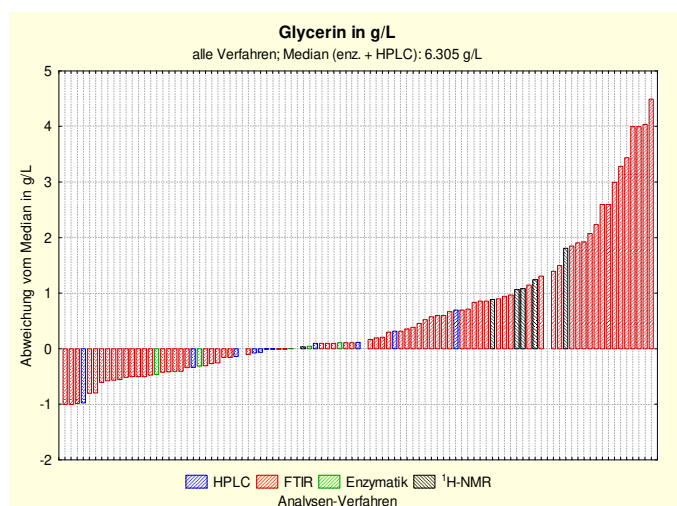
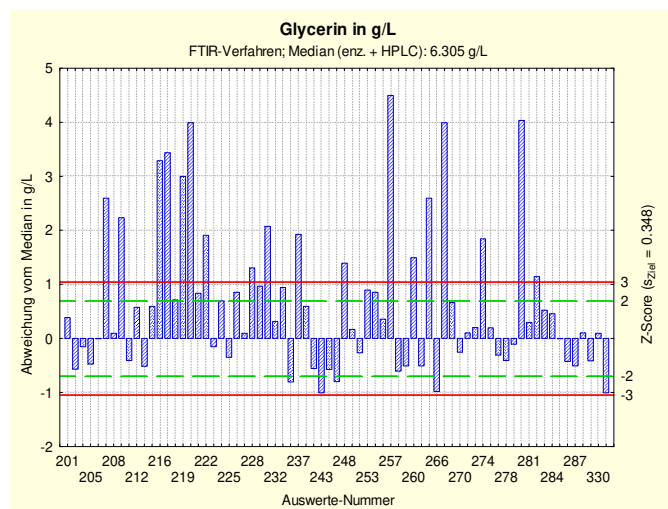
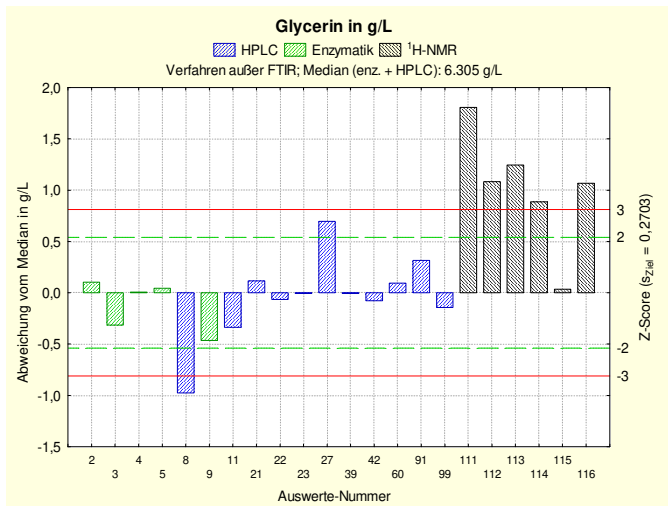
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
234	FTIR	7,25	0,945	3,50	2,72	
236	FTIR	5,50	-0,805	-2,98	-2,31	
237	FTIR	8,23	1,925	7,12	5,53	(**)
240	FTIR	6,90	0,595	2,20	1,71	
241	FTIR	5,75	-0,555	-2,05	-1,59	
243	FTIR	5,30	-1,005	-3,72	-2,89	
244	FTIR	5,73	-0,575	-2,13	-1,65	
245	FTIR	5,51	-0,795	-2,94	-2,28	
248	FTIR	7,70	1,395	5,16	4,01	
249	FTIR	6,47	0,165	0,61	0,47	
251	FTIR	6,04	-0,265	-0,98	-0,76	
253	FTIR	7,20	0,895	3,31	2,57	
255	FTIR	7,16	0,855	3,16	2,46	
256	FTIR	6,66	0,355	1,31	1,02	
257	FTIR	10,80	4,495	16,63	12,92	(*)
258	FTIR	5,70	-0,605	-2,24	-1,74	
259	FTIR	5,80	-0,505	-1,87	-1,45	
260	FTIR	7,80	1,495	5,53	4,30	
262	FTIR	5,80	-0,505	-1,87	-1,45	
265	FTIR	8,90	2,595	9,60	7,46	(**)
266	FTIR	5,32	-0,985	-3,64	-2,83	
267	FTIR	10,30	3,995	14,78	11,48	(*)
269	FTIR	6,97	0,665	2,46	1,91	
270	FTIR	6,05	-0,255	-0,94	-0,73	
271	FTIR	6,41	0,105	0,39	0,30	
273	FTIR	6,51	0,205	0,76	0,59	
274	FTIR	8,15	1,845	6,82	5,30	(**)
276	FTIR	6,50	0,195	0,72	0,56	
277	FTIR	6,00	-0,305	-1,13	-0,88	
278	FTIR	5,90	-0,405	-1,50	-1,16	
279	FTIR	6,20	-0,105	-0,39	-0,30	
280	FTIR	10,34	4,035	14,93	11,59	(*)
281	FTIR	6,60	0,295	1,09	0,85	
282	FTIR	7,45	1,145	4,24	3,29	
283	FTIR	6,83	0,525	1,94	1,51	
284	FTIR	6,76	0,455	1,68	1,31	
285	FTIR	6,30	-0,005	-0,02	-0,01	
286	FTIR	5,88	-0,425	-1,57	-1,22	
287	FTIR	5,80	-0,505	-1,87	-1,45	
321	FTIR	6,41	0,105	0,39	0,30	
328	FTIR	5,89	-0,415	-1,54	-1,19	
330	FTIR	6,40	0,095	0,35	0,27	
337	FTIR	5,30	-1,005	-3,72	-2,89	

5.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	20
Minimalwert	5,33
Mittelwert	6,323
Median	6,305
Maximalwert	7,65
Standardabweichung (s_L)	0,451
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,101
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,270
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,67
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,29
Quotient (u_M/s_H)	0,37
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,29

5.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	6,293	0,274
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	6,185	0,274
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	6,642	0,748
	herkömmliche Verfahren	20	6,291	0,259
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	6,791	1,117
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	7,330	0,610



5.8 pH-Wert

5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,44	0,060	1,26	
02	potentiometr.	3,41	0,030	0,63	
03	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
04	potentiometr.	3,42	0,040	0,84	
05	potentiometr.	3,35	-0,030	-0,63	
06	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
08	potentiometr.	3,38	0,000	0,00	
09	potentiometr.	3,43	0,050	1,05	
10	potentiometr.	3,41	0,030	0,63	
11	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
13	potentiometr.	3,31	-0,070	-1,47	
16	potentiometr.	3,42	0,040	0,84	
19	potentiometr.	3,42	0,040	0,84	
21	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
22	potentiometr.	3,39	0,010	0,21	
23	potentiometr.	3,38	0,000	0,00	
25	potentiometr.	3,41	0,026	0,55	
26	k. A.	3,37	-0,010	-0,21	
27	potentiometr.	3,45	0,070	1,47	
28	potentiometr.	3,38	0,000	0,00	
29	potentiometr.	3,43	0,050	1,05	
30	potentiometr.	3,31	-0,070	-1,47	
35	potentiometr.	3,26	-0,120	-2,52	
37	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
38	potentiometr.	3,33	-0,050	-1,05	
39	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
40	potentiometr.	3,38	0,005	0,11	
41	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
44	potentiometr.	3,34	-0,040	-0,84	
45	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
46	potentiometr.	3,15	-0,230	-4,83	
49	potentiometr.	3,36	-0,020	-0,42	
51	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
52	potentiometr.	3,26	-0,120	-2,52	
55	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
59	potentiometr.	3,44	0,060	1,26	
60	potentiometr.	3,20	-0,180	-3,78	
62	potentiometr.	3,36	-0,020	-0,42	
63	potentiometr.	3,45	0,070	1,47	
66	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	
68	potentiometr.	3,32	-0,060	-1,26	
73	potentiometr.	3,32	-0,060	-1,26	
74	potentiometr.	3,40	0,020	0,42	
78	potentiometr.	3,39	0,010	0,21	
79	potentiometr.	3,38	0,000	0,00	
80	potentiometr.	3,37	-0,010	-0,21	
94	potentiometr.	3,35	-0,030	-0,63	
110	potentiometr.	3,30	-0,080	-1,68	

5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	47	3,364	0,062
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	3,376	0,078
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	3,370	
	alle Verfahren	126	3,371	0,070

5.8.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,34	-0,040	-0,81	
202	FTIR	3,41	0,030	0,61	
203	FTIR	3,39	0,010	0,20	
205	FTIR	3,22	-0,160	-3,25	
206	FTIR	3,38	0,000	0,00	
207	FTIR	3,37	-0,010	-0,20	
208	FTIR	3,37	-0,010	-0,20	
210	FTIR	3,35	-0,030	-0,61	
211	FTIR	3,26	-0,120	-2,43	
212	FTIR	3,32	-0,060	-1,22	
213	FTIR	3,46	0,080	1,62	
215	FTIR	3,40	0,020	0,41	
216	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
217	FTIR	3,24	-0,140	-2,84	
218	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
219	FTIR	3,44	0,060	1,22	
220	FTIR	3,55	0,170	3,45	
221	FTIR	3,38	0,000	0,00	
222	FTIR	3,25	-0,130	-2,64	
223	FTIR	3,36	-0,020	-0,41	
224	FTIR	3,31	-0,070	-1,42	
225	FTIR	3,40	0,020	0,41	
226	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
227	FTIR	3,51	0,130	2,64	
228	FTIR	3,44	0,060	1,22	
229	FTIR	3,48	0,100	2,03	
230	FTIR	3,40	0,020	0,41	
232	FTIR	3,26	-0,120	-2,43	
234	FTIR	3,43	0,050	1,01	
235	FTIR	3,47	0,090	1,83	
236	FTIR	3,40	0,020	0,41	
237	FTIR	3,39	0,010	0,20	
240	FTIR	3,43	0,050	1,01	
241	FTIR	3,41	0,030	0,61	
242	FTIR	3,40	0,020	0,41	
243	FTIR	3,38	0,000	0,00	
244	FTIR	3,26	-0,120	-2,43	
245	FTIR	3,27	-0,110	-2,23	
246	FTIR	3,34	-0,040	-0,81	
248	FTIR	2,93	-0,450	-9,13	(***)
250	FTIR	3,35	-0,030	-0,61	
251	FTIR	3,41	0,030	0,61	
253	FTIR	3,42	0,040	0,81	
255	FTIR	3,32	-0,060	-1,22	
256	FTIR	3,23	-0,150	-3,04	
257	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
258	FTIR	3,38	0,000	0,00	
259	FTIR	3,42	0,040	0,81	
260	FTIR	3,19	-0,190	-3,85	
262	FTIR	3,29	-0,090	-1,83	
263	FTIR	3,29	-0,090	-1,83	
264	FTIR	3,45	0,070	1,42	
265	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
266	FTIR	3,46	0,080	1,62	
267	FTIR	3,42	0,040	0,81	
268	FTIR	3,53	0,150	3,04	
269	FTIR	3,56	0,180	3,65	
270	FTIR	3,39	0,010	0,20	
271	FTIR	3,34	-0,040	-0,81	
273	FTIR	3,35	-0,030	-0,61	
274	FTIR	3,40	0,020	0,41	
275	FTIR	3,46	0,080	1,62	
276	FTIR	3,67	0,290	5,88	(***)
277	FTIR	3,45	0,070	1,42	

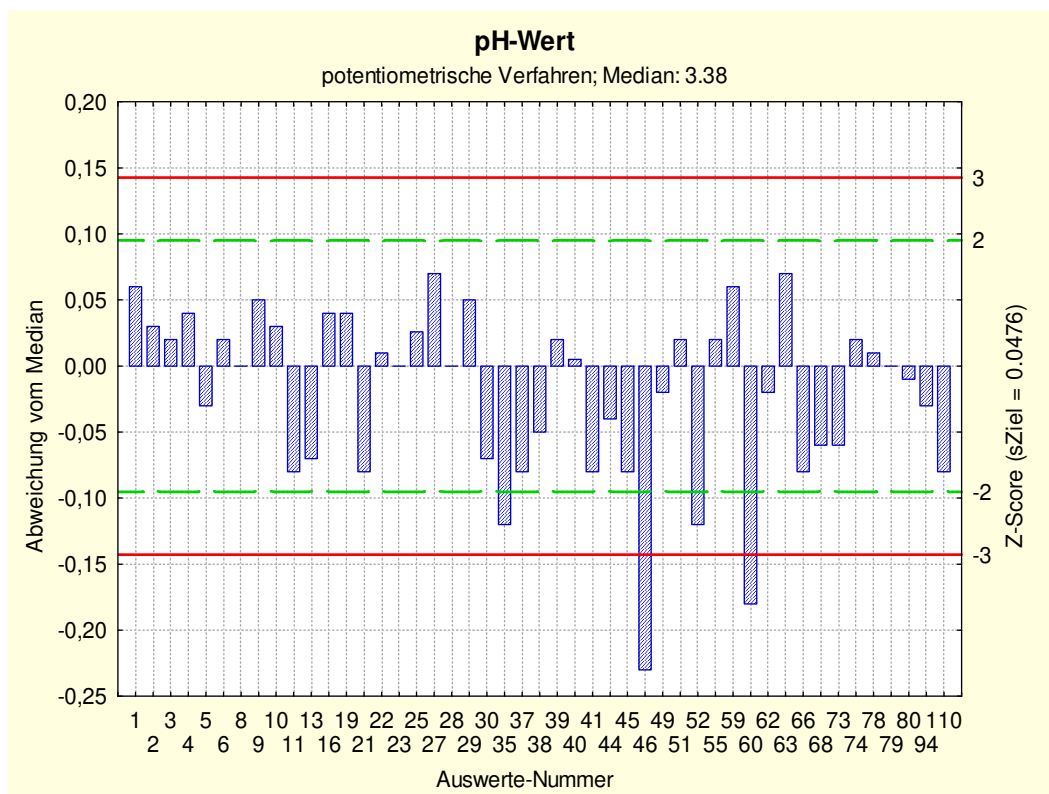
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

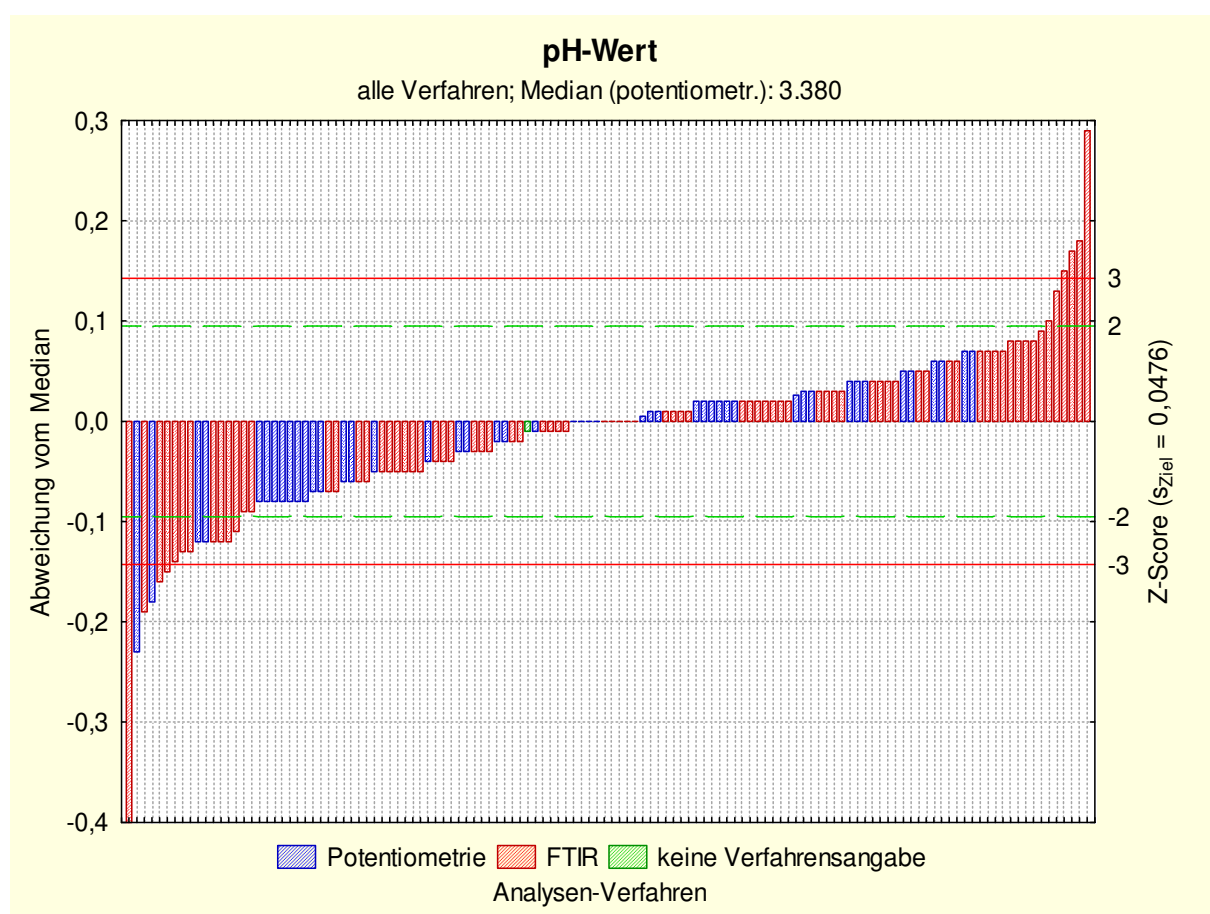
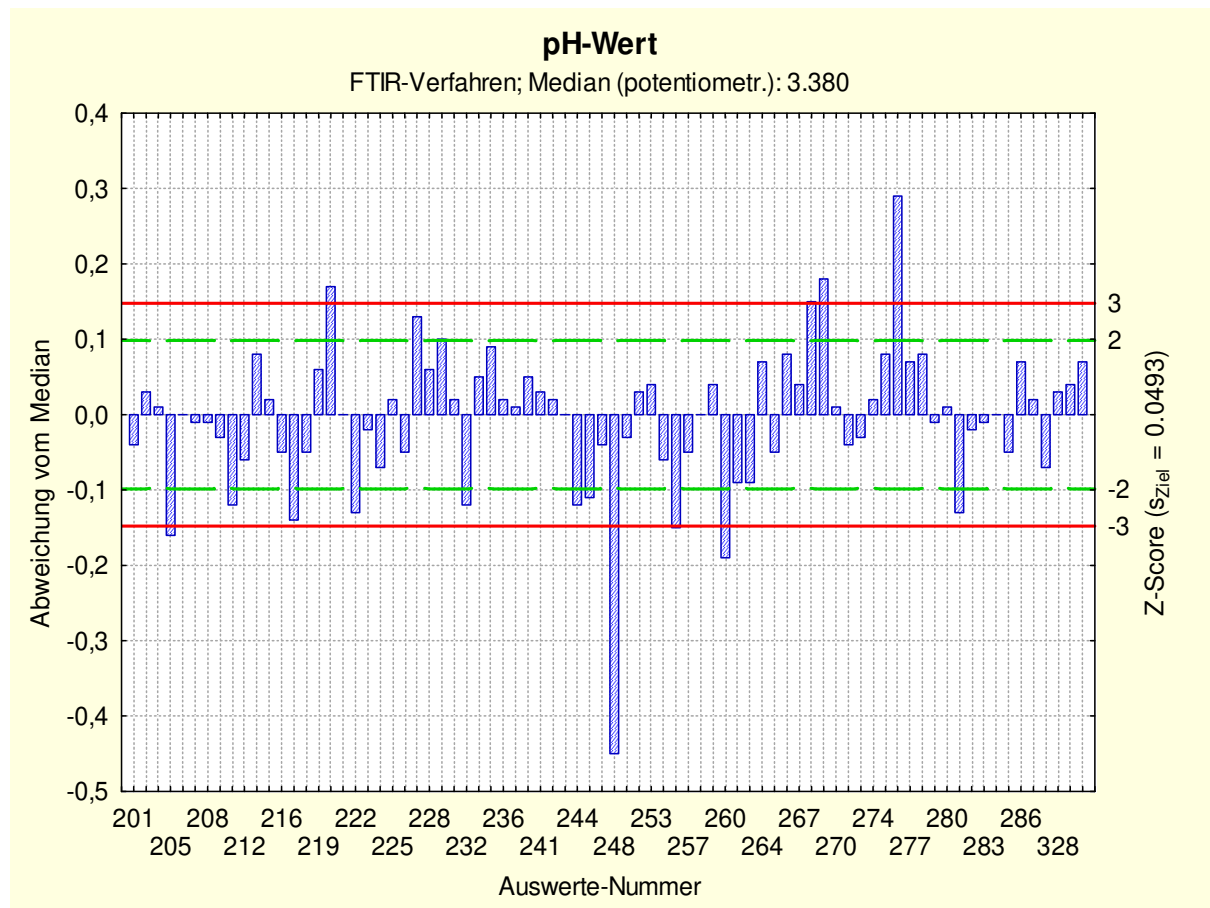
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	3,46	0,080	1,62	
279	FTIR	3,37	-0,010	-0,20	
280	FTIR	3,39	0,010	0,20	
281	FTIR	3,25	-0,130	-2,64	
282	FTIR	3,36	-0,020	-0,41	
283	FTIR	3,37	-0,010	-0,20	
284	FTIR	3,38	0,000	0,00	
285	FTIR	3,33	-0,050	-1,01	
286	FTIR	3,45	0,070	1,42	
287	FTIR	3,40	0,020	0,41	
321	FTIR	3,31	-0,070	-1,42	
328	FTIR	3,41	0,030	0,61	
330	FTIR	3,42	0,040	0,81	
337	FTIR	3,45	0,070	1,42	

5.8.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	47
Minimalwert	3,15
Mittelwert	3,360
Median	3,380
Maximalwert	3,45
Standardabweichung (s _L)	0,0651
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0095
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0493
Horrat-Wert (s _L /s _H)	
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,37
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,32
Quotient (u _M /s _H)	
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,20
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,19





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	5,96	-0,235	-0,88	-2,19	
02	LwK 5.2.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
03	phot.aut.	6,24	0,045	0,17	0,42	
04	LwK 5.2.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
05	LwK 5.1	6,05	-0,145	-0,54	-1,35	
06	LwK 5.2.1	6,14	-0,055	-0,21	-0,51	
07	LwK 5.2.1	0,63	-5,565	-20,90	-51,94	(*)
08	LwK 5.2.1	6,25	0,055	0,21	0,51	
09	LwK 5.2.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
10	LwK 5.1	5,95	-0,245	-0,92	-2,29	
11	LwK 5.2.1	6,17	-0,025	-0,09	-0,23	
13	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
16	LwK 5.2.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
19	LwK 5.2.1	6,28	0,085	0,32	0,79	
20	LwK 5.1	6,11	-0,085	-0,32	-0,79	
21	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
22	LwK 5.1	5,84	-0,355	-1,33	-3,31	
23	LwK 5.1	6,30	0,105	0,39	0,98	
24	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
25	LwK 5.1	6,13	-0,065	-0,24	-0,61	
26	LwK 5.1	6,18	-0,015	-0,06	-0,14	
27	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
28	LwK 5.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
29	LwK 5.1	6,00	-0,195	-0,73	-1,82	
30	LwK 5.2.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
34	LwK 5.2.1	6,15	-0,045	-0,17	-0,42	
37	LwK 5.1	6,40	0,205	0,77	1,91	
38	LwK 5.1	6,23	0,035	0,13	0,33	
39	LwK 5.2.1	6,14	-0,055	-0,21	-0,51	
40	LwK 5.1	6,38	0,186	0,70	1,74	
41	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
42	LwK 5.1	5,99	-0,205	-0,77	-1,91	
44	LwK 5.1	6,30	0,105	0,39	0,98	
45	LwK 5.2.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
46	LwK 5.2.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
49	LwK 5.1	6,02	-0,175	-0,66	-1,63	
51	LwK 5.2.1	6,50	0,305	1,15	2,85	
52	LwK 5.2.1	6,30	0,105	0,39	0,98	
54	LwK 5.2.1	6,30	0,105	0,39	0,98	
55	LwK 5.2.1	6,33	0,135	0,51	1,26	
59	LwK 5.2.1	6,34	0,145	0,54	1,35	
60	LwK 5.2.1	6,60	0,405	1,52	3,78	
62	LwK 5.2.1	6,98	0,785	2,95	7,33	(**)
63	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
66	LwK 5.1	6,10	-0,095	-0,36	-0,89	
68	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	
72	LwK 5.1	6,81	0,615	2,31	5,74	(**)
73	LwK 5.1	6,00	-0,195	-0,73	-1,82	
74	LwK 5.2.1	6,07	-0,125	-0,47	-1,17	
78	LwK 5.1	6,27	0,075	0,28	0,70	
79	LwK 5.2.2	6,20	0,005	0,02	0,05	
80	LwK 5.1	6,00	-0,195	-0,73	-1,82	
94	LwK 5.2.1	6,19	-0,005	-0,02	-0,05	
110	LwK 5.1	6,20	0,005	0,02	0,05	

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

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

5.9.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,34	0,140	0,53	0,97	
202	LwK 5.3	6,53	0,330	1,24	2,28	
203	LwK 5.3	6,21	0,010	0,04	0,07	
205	LwK 5.3	6,32	0,120	0,45	0,83	
206	LwK 5.3	6,36	0,160	0,60	1,10	
207	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
208	LwK 5.3	6,33	0,130	0,49	0,90	
210	LwK 5.3	6,03	-0,170	-0,64	-1,17	
211	LwK 5.3	6,33	0,130	0,49	0,90	
212	LwK 5.3	6,19	-0,010	-0,04	-0,07	
213	LwK 5.3	6,52	0,320	1,20	2,21	
215	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
216	LwK 5.3	6,32	0,120	0,45	0,83	
217	LwK 5.3	6,37	0,170	0,64	1,17	
218	LwK 5.3	6,28	0,080	0,30	0,55	
219	LwK 5.3	6,45	0,250	0,94	1,72	
220	LwK 5.3	6,60	0,400	1,50	2,76	
221	LwK 5.3	6,10	-0,100	-0,38	-0,69	
222	LwK 5.3	6,21	0,010	0,04	0,07	
223	LwK 5.3	5,50	-0,700	-2,63	-4,83	
224	LwK 5.3	6,30	0,100	0,38	0,69	
225	LwK 5.3	6,58	0,380	1,43	2,62	
226	LwK 5.3	6,24	0,040	0,15	0,28	
227	LwK 5.3	6,43	0,230	0,86	1,59	
228	LwK 5.3	6,33	0,130	0,49	0,90	
229	LwK 5.3	6,20	0,000	0,00	0,00	
230	LwK 5.3	6,19	-0,010	-0,04	-0,07	
232	LwK 5.3	6,31	0,110	0,41	0,76	
234	LwK 5.3	6,31	0,110	0,41	0,76	
235	LwK 5.3	5,90	-0,300	-1,13	-2,07	
236	LwK 5.3	6,70	0,500	1,88	3,45	
237	LwK 5.3	6,76	0,560	2,10	3,86	
240	LwK 5.3	6,42	0,220	0,83	1,52	
241	LwK 5.3	6,48	0,280	1,05	1,93	
242	LwK 5.3	5,98	-0,220	-0,83	-1,52	
243	LwK 5.3	6,20	0,000	0,00	0,00	
244	LwK 5.3	6,36	0,160	0,60	1,10	
245	LwK 5.3	6,48	0,280	1,05	1,93	
246	LwK 5.3	6,30	0,100	0,38	0,69	
247	LwK 5.3	5,57	-0,630	-2,36	-4,34	
248	LwK 5.3	5,70	-0,500	-1,88	-3,45	
249	LwK 5.3	6,32	0,120	0,45	0,83	
250	LwK 5.3	6,60	0,400	1,50	2,76	
251	LwK 5.3	6,55	0,350	1,31	2,41	
253	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
254	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
255	LwK 5.3	6,33	0,130	0,49	0,90	
256	LwK 5.3	6,54	0,340	1,28	2,34	
257	LwK 5.3	6,73	0,530	1,99	3,66	
258	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
259	LwK 5.3	5,70	-0,500	-1,88	-3,45	
260	LwK 5.3	6,60	0,400	1,50	2,76	
261	LwK 5.3	6,20	0,000	0,00	0,00	
262	LwK 5.3	6,40	0,200	0,75	1,38	
263	LwK 5.3	6,30	0,100	0,38	0,69	
264	LwK 5.3	6,33	0,130	0,49	0,90	
265	LwK 5.3	6,10	-0,100	-0,38	-0,69	
266	LwK 5.3	6,25	0,050	0,19	0,34	
267	LwK 5.3	6,51	0,310	1,16	2,14	
268	LwK 5.3	6,47	0,270	1,01	1,86	
269	LwK 5.3	6,25	0,050	0,19	0,34	
270	LwK 5.3	6,14	-0,060	-0,23	-0,41	
271	LwK 5.3	6,01	-0,190	-0,71	-1,31	
273	LwK 5.3	6,18	-0,020	-0,08	-0,14	
274	LwK 5.3	6,19	-0,010	-0,04	-0,07	
275	LwK 5.3	6,39	0,190	0,71	1,31	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

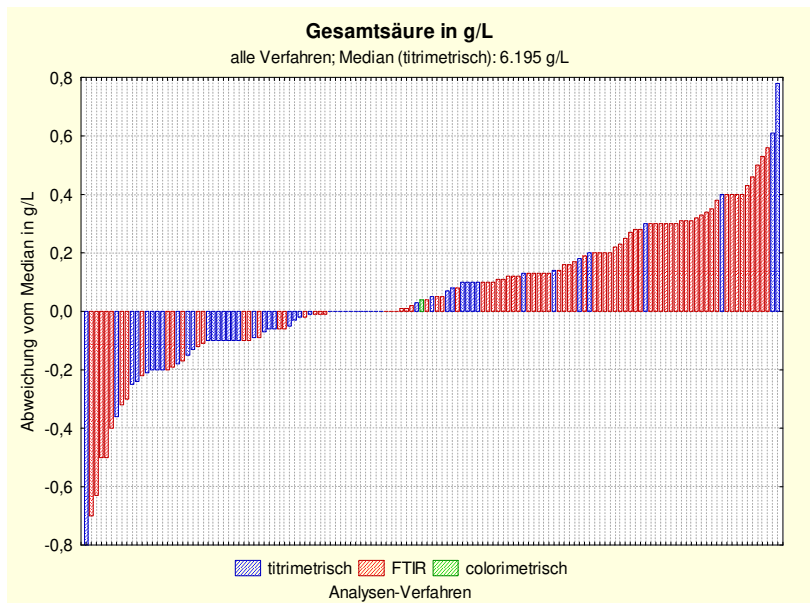
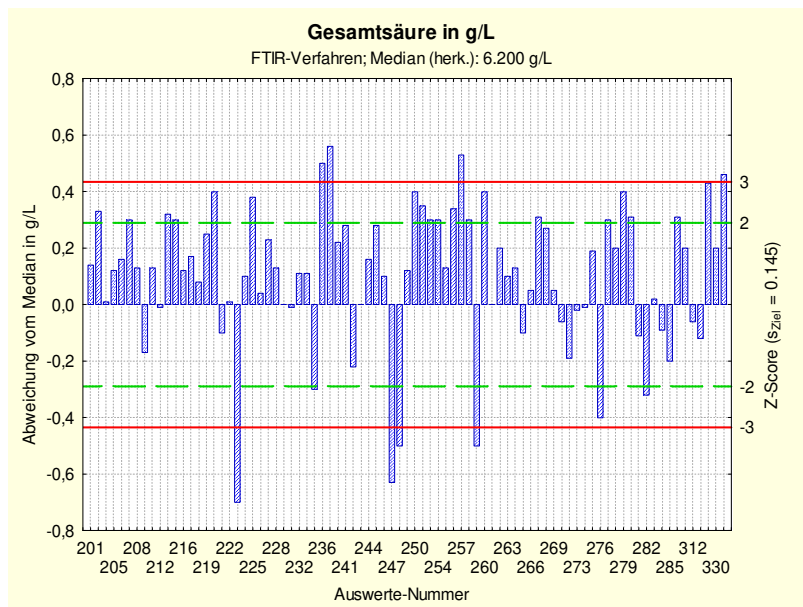
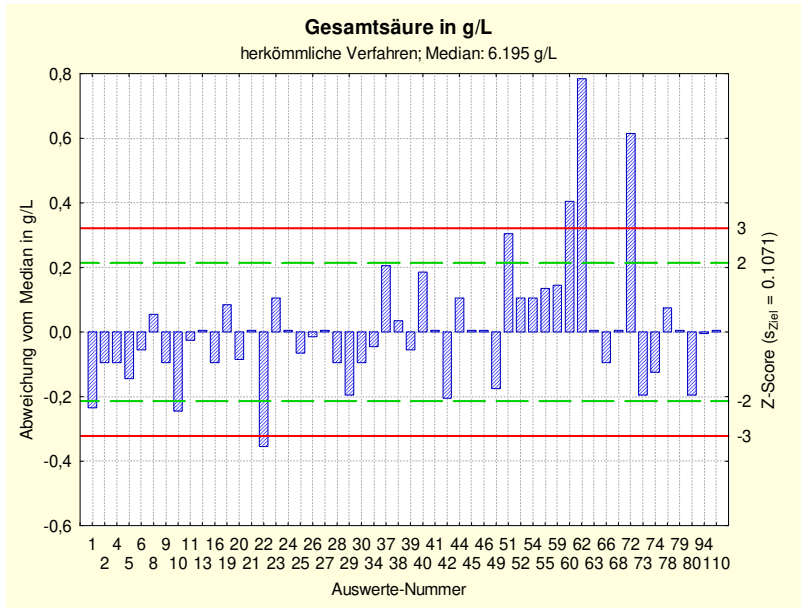
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 5.3	5,80	-0,400	-1,50	-2,76	
277	LwK 5.3	6,50	0,300	1,13	2,07	
278	LwK 5.3	6,40	0,200	0,75	1,38	
279	LwK 5.3	6,60	0,400	1,50	2,76	
280	LwK 5.3	6,51	0,310	1,16	2,14	
281	LwK 5.3	6,09	-0,110	-0,41	-0,76	
282	LwK 5.3	5,88	-0,320	-1,20	-2,21	
283	LwK 5.3	6,22	0,020	0,08	0,14	
284	LwK 5.3	6,11	-0,090	-0,34	-0,62	
285	LwK 5.3	6,00	-0,200	-0,75	-1,38	
286	LwK 5.3	6,51	0,310	1,16	2,14	
287	LwK 5.3	6,40	0,200	0,75	1,38	
312	LwK 5.3	6,14	-0,060	-0,23	-0,41	
321	LwK 5.3	6,08	-0,120	-0,45	-0,83	
328	LwK 5.3	6,63	0,430	1,61	2,97	
330	LwK 5.3	6,40	0,200	0,75	1,38	
337	LwK 5.3	6,66	0,460	1,73	3,17	

5.9.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	52	50
Minimalwert	5,84	5,84
Mittelwert	6,203	6,175
Median	6,200	6,195
Maximalwert	6,98	6,60
Standardabweichung (s_L)	0,197	0,140
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,027	0,020
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,267	0,266
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,74	0,53
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,84	1,31
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,36	0,97
Quotient (u_M/s_H)	0,10	0,07
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,25	0,19
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,19	0,14

5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	28	6,158	0,144
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01, - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	24	6,199	0,146
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator titrimetrische Verfahren	1 53	6,200 6,176	0,144
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	6,240	
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,324	0,225



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	4,04	1,280	9,55	(**)
02	HPLC	2,51	-0,250	-1,87	
03	HPLC	2,57	-0,190	-1,42	
04	photometr.	2,55	-0,210	-1,57	
05	photometr.	2,78	0,020	0,15	
06	HPLC	2,57	-0,191	-1,43	
07	HPLC	2,38	-0,380	-2,84	
09	photometr., autom.	2,55	-0,210	-1,57	
10	photometr.	2,84	0,080	0,60	
13	photometr., autom.	2,83	0,070	0,52	
16	photometr., autom.	3,10	0,340	2,54	
19	photometr., autom.	2,94	0,180	1,34	
22	HPLC	3,59	0,830	6,19	(**)
23	HPLC	2,78	0,020	0,15	
25	HPLC	2,84	0,084	0,63	
27	HPLC	3,00	0,240	1,79	
30	photometr., autom.	2,89	0,130	0,97	
38	photometr., autom.	2,77	0,010	0,07	
39	HPLC	2,66	-0,100	-0,75	
40	photometr., autom.	2,73	-0,030	-0,22	
41	photometr., autom.	2,60	-0,160	-1,19	
42	photometr., autom.	2,55	-0,210	-1,57	
44	photometr., autom.	2,59	-0,170	-1,27	
45	photometr., autom.	3,21	0,450	3,36	
49	photometr., autom.	2,88	0,120	0,90	
55	photometr., autom.	2,75	-0,010	-0,07	
60	photometr., autom.	2,46	-0,300	-2,24	
62	HPLC	3,10	0,340	2,54	
68	photometr., autom.	2,79	0,030	0,22	
78	photometr.	2,75	-0,010	-0,07	
97	HPLC	3,19	0,430	3,21	
102	photometr., autom.	2,51	-0,250	-1,87	
111	NMR	1,89	-0,875	-6,53	(***)
112	NMR	2,32	-0,437	-3,26	
113	NMR	2,35	-0,410	-3,06	
114	NMR	2,46	-0,296	-2,21	
115	NMR	2,52	-0,240	-1,79	
116	NMR	2,16	-0,602	-4,49	

(**) 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.

5.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,66	-0,110	-0,82	-0,48	
202	FTIR	2,40	-0,370	-2,75	-1,63	
203	FTIR	2,26	-0,510	-3,79	-2,25	
205	FTIR	3,18	0,410	3,05	1,81	
207	FTIR	2,30	-0,470	-3,50	-2,07	
208	FTIR	2,53	-0,240	-1,79	-1,06	
210	FTIR	2,80	0,030	0,22	0,13	
211	FTIR	2,87	0,100	0,74	0,44	
212	FTIR	2,29	-0,480	-3,57	-2,11	
213	FTIR	2,47	-0,300	-2,23	-1,32	
215	FTIR	2,70	-0,070	-0,52	-0,31	
216	FTIR	2,78	0,010	0,07	0,04	
217	FTIR	2,84	0,070	0,52	0,31	
218	FTIR	3,15	0,380	2,83	1,67	
219	FTIR	2,89	0,120	0,89	0,53	
220	FTIR	3,00	0,230	1,71	1,01	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	2,67	-0,100	-0,74	-0,44	
222	FTIR	3,08	0,310	2,31	1,37	
223	FTIR	2,58	-0,190	-1,41	-0,84	
224	FTIR	3,10	0,330	2,46	1,45	
225	FTIR	2,48	-0,290	-2,16	-1,28	
226	FTIR	2,51	-0,260	-1,93	-1,15	
227	FTIR	2,40	-0,370	-2,75	-1,63	
228	FTIR	3,34	0,570	4,24	2,51	
229	FTIR	2,55	-0,220	-1,64	-0,97	
230	FTIR	3,25	0,480	3,57	2,11	
232	FTIR	3,14	0,370	2,75	1,63	
234	FTIR	3,13	0,360	2,68	1,59	
235	FTIR	3,00	0,230	1,71	1,01	
236	FTIR	2,00	-0,770	-5,73	-3,39	
237	FTIR	3,90	1,130	8,41	4,98	
240	FTIR	3,24	0,470	3,50	2,07	
241	FTIR	2,40	-0,370	-2,75	-1,63	
242	FTIR	2,28	-0,490	-3,65	-2,16	
243	FTIR	2,60	-0,170	-1,26	-0,75	
244	FTIR	2,80	0,030	0,22	0,13	
245	FTIR	1,99	-0,780	-5,80	-3,44	
246	FTIR	2,60	-0,170	-1,26	-0,75	
248	FTIR	2,50	-0,270	-2,01	-1,19	
249	FTIR	4,87	2,100	15,62	9,25	(*)
250	FTIR	3,10	0,330	2,46	1,45	
251	FTIR	2,52	-0,250	-1,86	-1,10	
253	FTIR	3,20	0,430	3,20	1,89	
255	FTIR	2,28	-0,490	-3,65	-2,16	
256	FTIR	3,89	1,120	8,33	4,93	
257	FTIR	3,18	0,410	3,05	1,81	
258	FTIR	2,30	-0,470	-3,50	-2,07	
259	FTIR	2,80	0,030	0,22	0,13	
260	FTIR	3,20	0,430	3,20	1,89	
263	FTIR	2,60	-0,170	-1,26	-0,75	
264	FTIR	2,22	-0,550	-4,09	-2,42	
265	FTIR	2,76	-0,010	-0,07	-0,04	
266	FTIR	2,35	-0,420	-3,12	-1,85	
267	FTIR	3,23	0,460	3,42	2,03	
268	FTIR	4,43	1,660	12,35	7,31	(*)
269	FTIR	3,55	0,780	5,80	3,44	
270	FTIR	2,70	-0,070	-0,52	-0,31	
271	FTIR	3,24	0,470	3,50	2,07	
273	FTIR	3,03	0,260	1,93	1,15	
274	FTIR	2,53	-0,240	-1,79	-1,06	
275	FTIR	3,14	0,370	2,75	1,63	
276	FTIR	2,90	0,130	0,97	0,57	
277	FTIR	3,79	1,020	7,59	4,49	
278	FTIR	2,60	-0,170	-1,26	-0,75	
280	FTIR	3,11	0,340	2,53	1,50	
281	FTIR	2,64	-0,130	-0,97	-0,57	
282	FTIR	2,32	-0,450	-3,35	-1,98	
283	FTIR	2,77	0,000	0,00	0,00	
284	FTIR	2,49	-0,280	-2,08	-1,23	
285	FTIR	2,70	-0,070	-0,52	-0,31	
286	FTIR	2,59	-0,180	-1,34	-0,79	
287	FTIR	2,20	-0,570	-4,24	-2,51	
321	FTIR	3,14	0,370	2,75	1,63	
328	FTIR	2,40	-0,370	-2,75	-1,63	
330	FTIR	2,50	-0,270	-2,01	-1,19	
337	FTIR	2,22	-0,550	-4,09	-2,42	

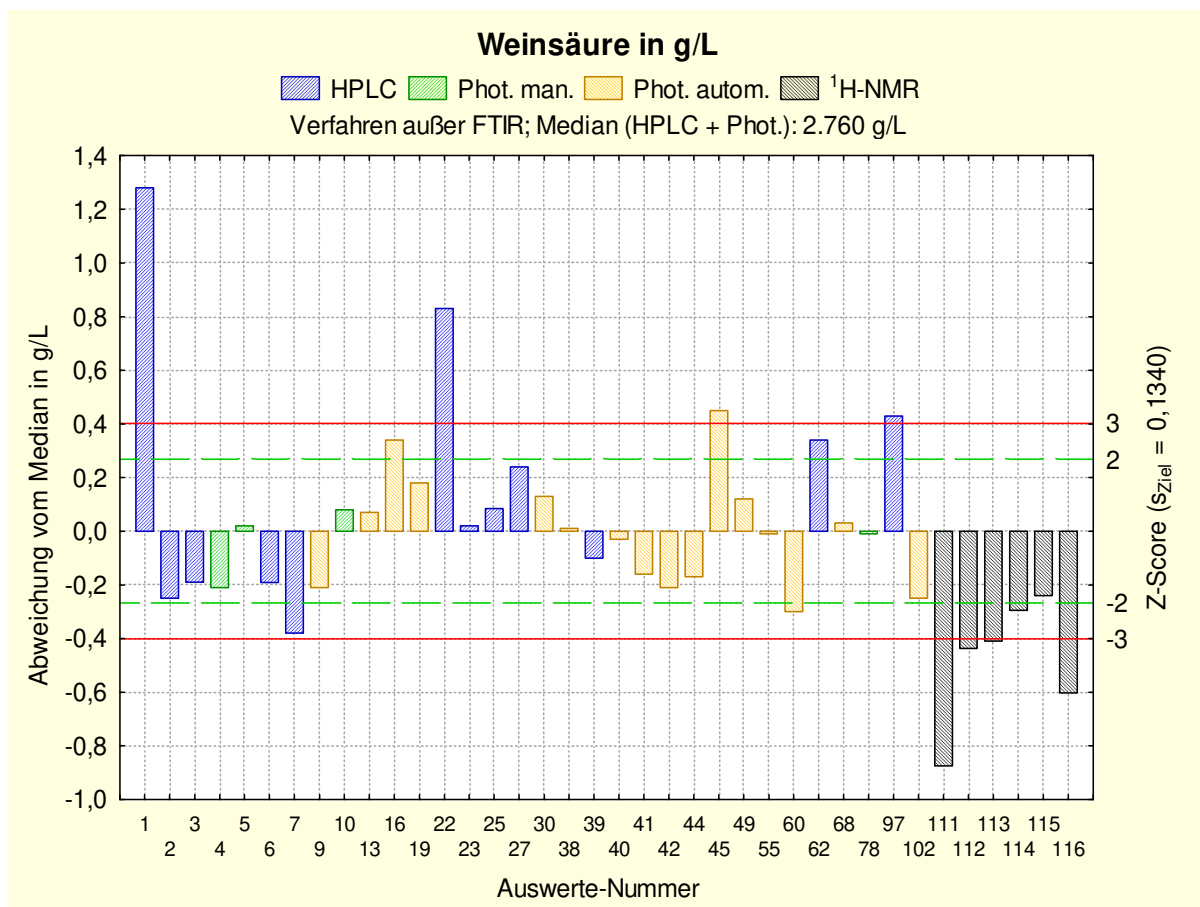
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

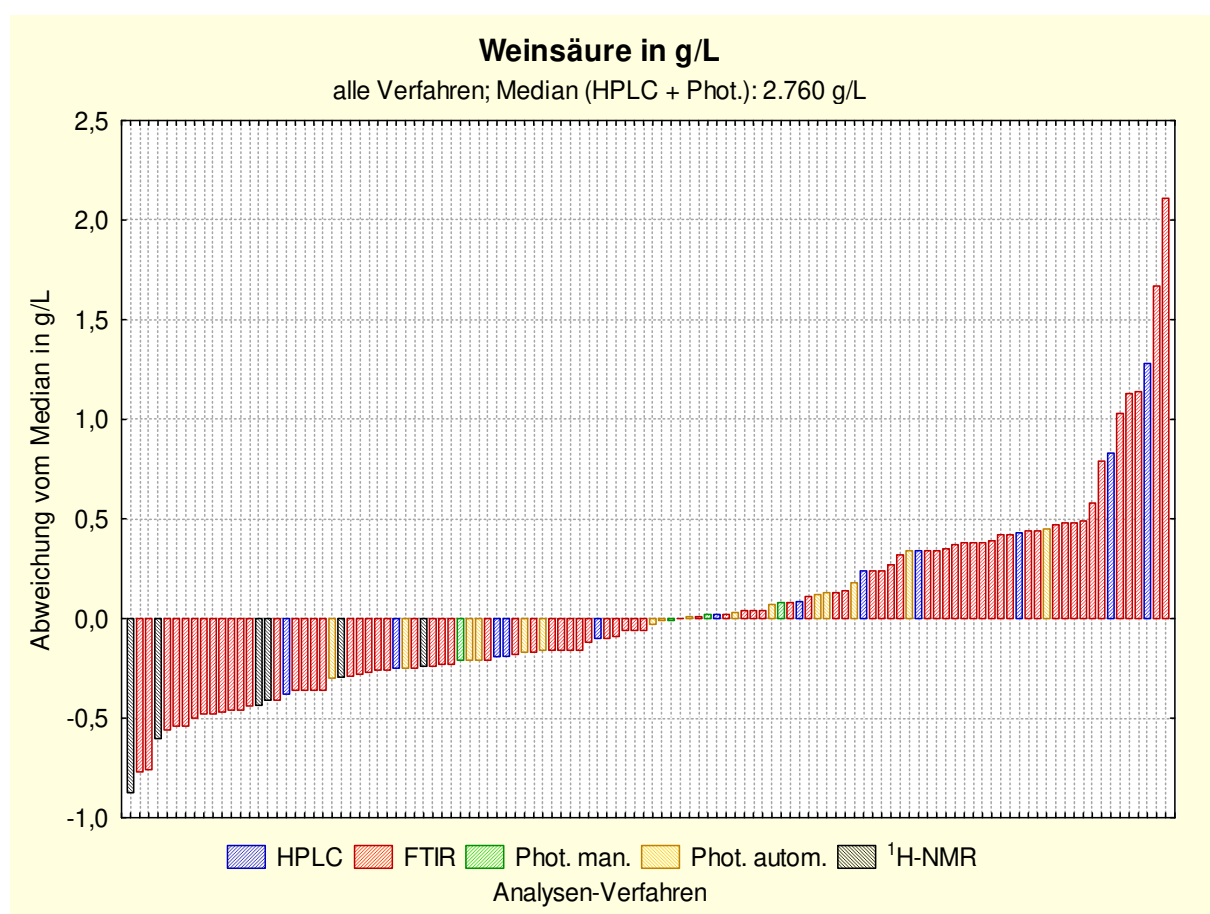
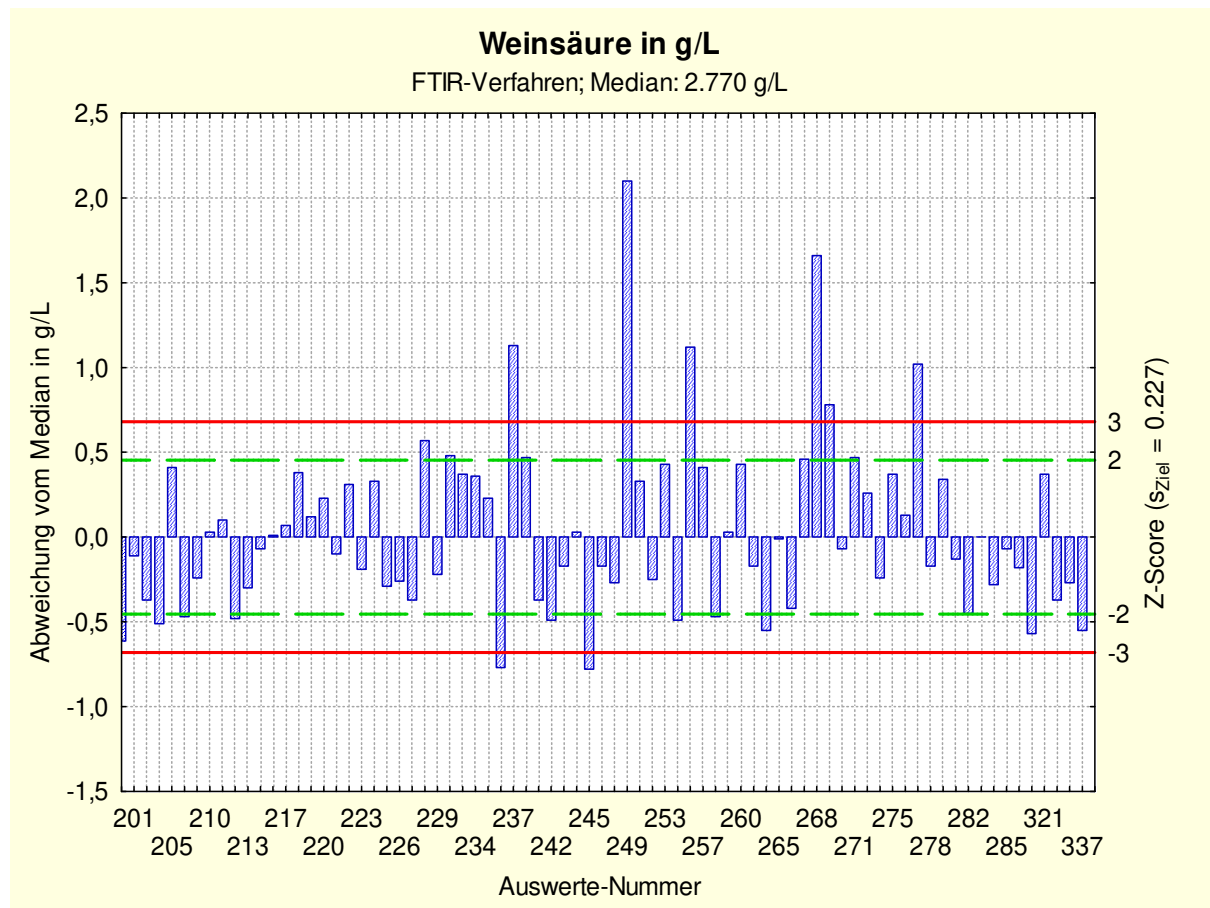
5.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC		herk. Verfahren	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	10	32	30
Minimalwert	2,38	2,38	2,38	2,38
Mittelwert	2,936	2,760	2,822	2,756
Median	2,812	2,720	2,775	2,760
Maximalwert	4,04	3,19	4,04	3,21
Standardabweichung (s_L)	0,487	0,270	0,341	0,219
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,141	0,085	0,060	0,040
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,136	0,132	0,135	0,134
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{exp\ herk.}$)				
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,227	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert (S_L/S_H)	3,58	2,04	2,53	1,63
Quotient ($s_L/S_{exp\ herk.}$)				
Quotient ($s_L/S_{\dot{U}\ FTIR}$)	2,15	1,19	1,50	0,96
Quotient (u_M/s_H)	1,03	0,64	0,45	
Quotient ($u_M/S_{exp\ herk.}$)				
Quotient ($u_M/S_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,62	0,37	0,27	0,18

5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	2,897	0,455
photometr.	photometrisch n. Rebelein	4	2,736	0,130
phot. autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	16	2,750	0,222
	alle herkömmlichen Verfahren	32	2,781	0,244
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,769	0,430
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,286	0,257





5.11 Flüchtige Säure [g/L]

5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,690	0,0940	2,58	
02	OIV o. SO2-korr.	0,716	0,1200	3,29	
03	Gerhardt SO2 korr.	0,644	0,0480	1,32	
04	OIV SO2-korr.	0,683	0,0870	2,39	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,628	0,0320	0,88	
07	OIV o. SO2-korr.	0,630	0,0340	0,93	
08	OIV SO2-korr.	0,596	0,0000	0,00	
09	OIV SO2-korr.	0,710	0,1140	3,13	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,750	0,1540	4,23	
11	OIV SO2-korr.	0,376	-0,2200	-6,04	(**)
22	Halbmikro SO2 unber.	0,620	0,0240	0,66	
26	Gerhardt SO2 korr.	0,642	0,0460	1,26	
28	Halbmikro SO2 ausg.	0,550	-0,0460	-1,26	
29	Wädenswil SO2 korr.	0,500	-0,0960	-2,63	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,580	-0,0160	-0,44	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,700	0,1040	2,85	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,628	0,0320	0,88	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,590	-0,0060	-0,16	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,596	-0,0005	-0,01	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,540	-0,0560	-1,54	
46	Halbmikro SO2 korr.	0,750	0,1540	4,23	
55	Rentschler mod. korr.	0,551	-0,0450	-1,23	
59	Wädenswil SO2 korr.	0,470	-0,1260	-3,46	
62	Gerhardt SO2 korr.	0,800	0,2040	5,60	(**)
63	Halbmikro SO2 unber.	0,850	0,2540	6,97	(***)
65	Wädenswil SO2 korr.	0,694	0,0980	2,69	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,800	0,2040	5,60	(***)
68	Gerhardt SO2 korr.	0,470	-0,1260	-3,46	
78	Halbmikro SO2 korr.	0,570	-0,0260	-0,71	
79	Halbmikro SO2 unber.	0,720	0,1240	3,40	
80	Wädenswil SO2 korr.	0,620	0,0240	0,66	
110	Gerhardt SO2 unber.	0,700	0,1040	2,85	

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

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

5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,640	0,0440	1,21	0,49	
202	FTIR	0,648	0,0520	1,43	0,58	
203	FTIR	0,672	0,0760	2,09	0,85	
205	FTIR	0,610	0,0140	0,38	0,16	
207	FTIR	0,150	-0,4460	-12,24	-5,01	(*)
208	FTIR	0,574	-0,0220	-0,60	-0,25	
210	FTIR	0,810	0,2140	5,87	2,40	
211	FTIR	0,502	-0,0940	-2,58	-1,05	
212	FTIR	0,440	-0,1560	-4,28	-1,75	
213	FTIR	0,560	-0,0360	-0,99	-0,40	
215	FTIR	0,690	0,0940	2,58	1,05	
216	FTIR	0,460	-0,1360	-3,73	-1,53	
217	FTIR	0,460	-0,1360	-3,73	-1,53	
218	FTIR	0,550	-0,0460	-1,26	-0,52	
219	FTIR	0,550	-0,0460	-1,26	-0,52	
220	FTIR	0,770	0,1740	4,77	1,95	
222	FTIR	0,560	-0,0360	-0,99	-0,40	
224	FTIR	0,640	0,0440	1,21	0,49	
225	FTIR	0,540	-0,0560	-1,54	-0,63	
226	FTIR	0,892	0,2960	8,12	3,32	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	0,630	0,0340	0,93	0,38	
228	FTIR	0,750	0,1540	4,23	1,73	
229	FTIR	0,380	-0,2160	-5,93	-2,42	
230	FTIR	0,701	0,1050	2,88	1,18	
232	FTIR	0,620	0,0240	0,66	0,27	
234	FTIR	0,520	-0,0760	-2,09	-0,85	
235	FTIR	0,710	0,1140	3,13	1,28	
236	FTIR	0,590	-0,0060	-0,16	-0,07	
237	FTIR	0,770	0,1740	4,77	1,95	
240	FTIR	0,730	0,1340	3,68	1,50	
241	FTIR	0,600	0,0040	0,11	0,04	
242	FTIR	0,680	0,0840	2,30	0,94	
243	FTIR	0,570	-0,0260	-0,71	-0,29	
244	FTIR	0,520	-0,0760	-2,09	-0,85	
245	FTIR	0,700	0,1040	2,85	1,17	
246	FTIR	0,860	0,2640	7,24	2,96	
248	FTIR	0,550	-0,0460	-1,26	-0,52	
249	FTIR	0,310	-0,2860	-7,85	-3,21	
250	FTIR	0,630	0,0340	0,93	0,38	
251	FTIR	0,650	0,0540	1,48	0,61	
253	FTIR	0,670	0,0740	2,03	0,83	
254	FTIR	0,650	0,0540	1,48	0,61	
255	FTIR	0,560	-0,0360	-0,99	-0,40	
256	FTIR	0,720	0,1240	3,40	1,39	
257	FTIR	0,390	-0,2060	-5,65	-2,31	
259	FTIR	0,430	-0,1660	-4,55	-1,86	
260	FTIR	0,480	-0,1160	-3,18	-1,30	
262	FTIR	0,660	0,0640	1,76	0,72	
263	FTIR	0,720	0,1240	3,40	1,39	
264	FTIR	0,710	0,1140	3,13	1,28	
265	FTIR	0,760	0,1640	4,50	1,84	
266	FTIR	0,730	0,1340	3,68	1,50	
267	FTIR	0,640	0,0440	1,21	0,49	
268	FTIR	0,930	0,3340	9,16	3,75	
269	FTIR	0,610	0,0140	0,38	0,16	
270	FTIR	0,540	-0,0560	-1,54	-0,63	
271	FTIR	0,570	-0,0260	-0,71	-0,29	
273	FTIR	0,880	0,2840	7,79	3,19	
274	FTIR	0,700	0,1040	2,85	1,17	
275	FTIR	0,560	-0,0360	-0,99	-0,40	
276	FTIR	0,500	-0,0960	-2,63	-1,08	
277	FTIR	0,480	-0,1160	-3,18	-1,30	
278	FTIR	0,650	0,0540	1,48	0,61	
279	FTIR	0,640	0,0440	1,21	0,49	
280	FTIR	0,530	-0,0660	-1,81	-0,74	
281	FTIR	0,660	0,0640	1,76	0,72	
282	FTIR	0,580	-0,0160	-0,44	-0,18	
283	FTIR	0,600	0,0040	0,11	0,04	
284	FTIR	0,700	0,1040	2,85	1,17	
285	FTIR	0,710	0,1140	3,13	1,28	
286	FTIR	0,550	-0,0460	-1,26	-0,52	
287	FTIR	0,610	0,0140	0,38	0,16	
328	FTIR	0,560	-0,0360	-0,99	-0,40	
330	FTIR	0,640	0,0440	1,21	0,49	
337	FTIR	0,650	0,0540	1,48	0,61	

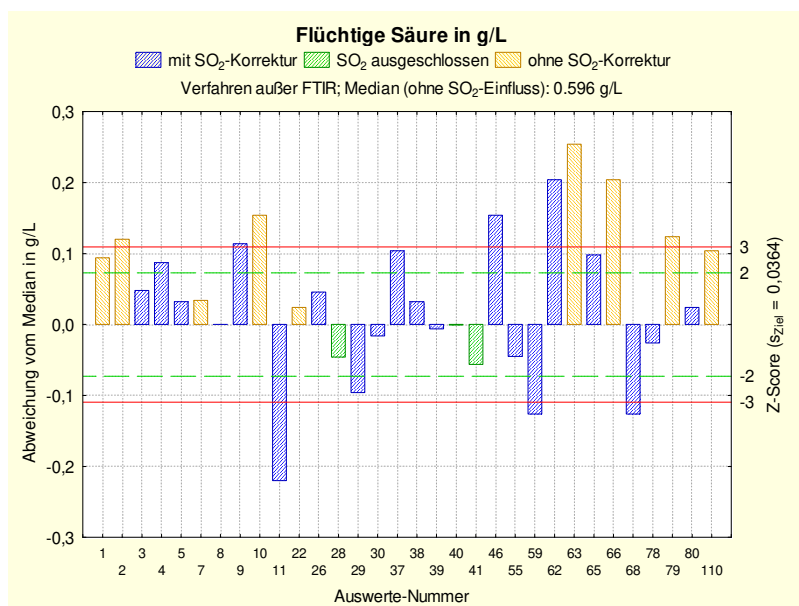
5.11.3 Deskriptive Ergebnisse

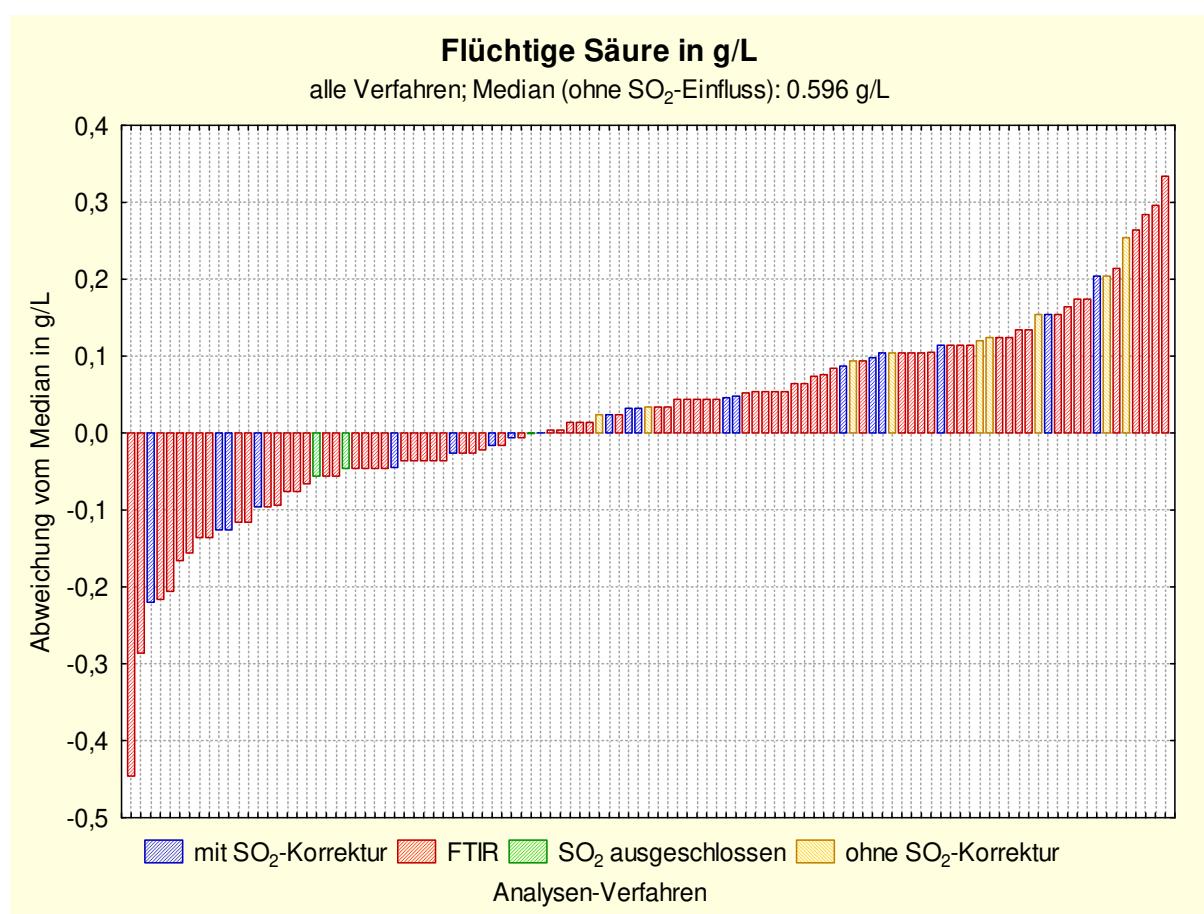
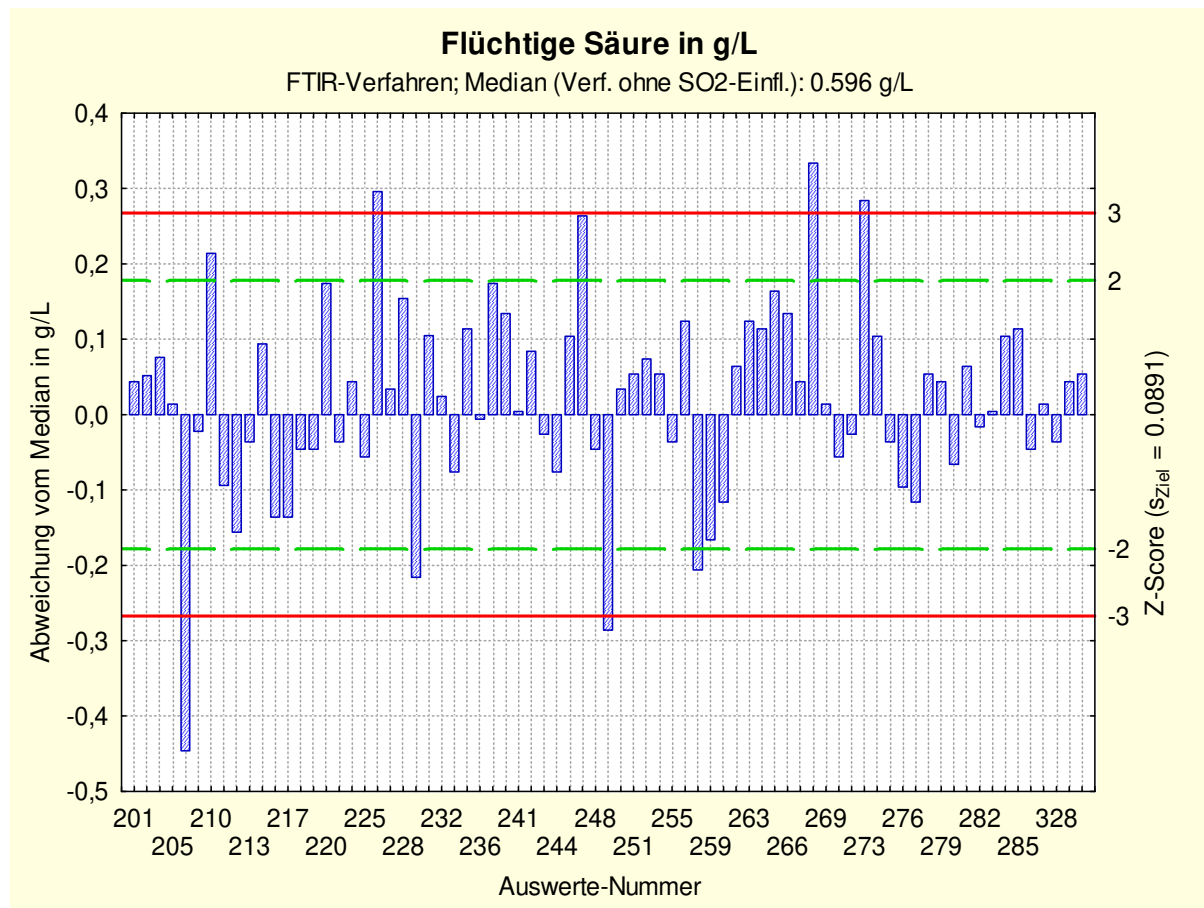
Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten	ber. Daten	ber. Daten
		S _{Horwitz}	S _{exp}
Gültige Werte	23	21	20
Minimalwert	0,376	0,470	0,470
Mittelwert	0,6038	0,6053	0,5981
Median	0,5960	0,5960	0,5958
Maximalwert	0,800	0,750	0,710
Standardabweichung (s _L)	0,098	0,077	0,072
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,020	0,017	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,036	0,036	0,036
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.}) ^{*)}	0,029	(0,029)	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089	0,089	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,68	2,12	1,96
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	3,42	(2,70)	2,50
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,10	0,86	0,81
Quotient (u _M /s _H)	0,56	0,46	0,44
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,71	(0,59)	0,56
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,23	0,19	0,18

^{*)} Die Bewertung der Laborergebnisse durch Z-Scores erfolgte mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz. Die berücksichtigten Daten auf der Basis der experimentellen Zielstandardabweichung dienen nur der Information.

5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	6	0,7383	0,0922
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,6796	0,0936
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	1	0,5500	
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	4	0,5710	0,1185
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,7000	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	8	0,6187	0,0622
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	2	0,5677	0,0445
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO2 korr.	einschl. SO ₂ -Korrektur	4	0,5958	0,1621
o. SO2 korr.	ohne SO ₂ -Korrektur	2	0,6730	0,0690
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO2-korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,5510	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	23	0,6056	0,0944
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,6179	0,1104





5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse, Teil 1

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,461	-0,069	-2,09	
10	enzymat. autom.	0,560	0,030	0,91	
13	enzymat. autom.	0,580	0,050	1,52	
16	enzymat. autom.	0,370	-0,160	-4,85	
19	enzymat. autom.	0,530	0,000	0,00	
26	enzymat. autom.	0,520	-0,010	-0,30	
27	enzymat. autom.	0,477	-0,053	-1,61	
30	enzymat. autom.	0,590	0,060	1,82	
38	enzymat. autom.	0,555	0,025	0,76	
41	enzymat. autom.	0,560	0,030	0,91	
44	enzymat. autom.	0,560	0,030	0,91	
45	enzymat. autom.	0,590	0,060	1,82	
46	enzymat. autom.	0,460	-0,070	-2,12	
49	enzymat. autom.	0,560	0,030	0,91	
52	enzymat. autom.	0,580	0,050	1,52	
54	enzymat. autom.	0,530	0,000	0,00	
55	enzymat. autom.	0,480	-0,050	-1,52	
60	enzymat. autom.	0,530	0,000	0,00	
62	enzymat. autom.	0,474	-0,056	-1,70	
68	enzymat. autom.	0,470	-0,060	-1,82	
78	enzymat. autom.	0,420	-0,110	-3,33	
102	enzymat. autom.	0,500	-0,030	-0,91	

5.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2

Bewertungsbasis: HPLC, enzymatisch, manuell, ¹H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,406	-0,070	-2,33	
02	HPLC	0,408	-0,068	-2,26	
03	HPLC	0,490	0,014	0,46	
06	HPLC	0,352	-0,124	-4,12	
23	HPLC	0,590	0,114	3,78	
25	HPLC	0,560	0,084	2,79	
61	enzymat. Hand	0,421	-0,055	-1,83	
111	NMR	0,476	0,000	0,00	
112	NMR	0,510	0,034	1,11	
113	NMR	0,486	0,010	0,33	
114	NMR	0,500	0,024	0,79	
115	NMR	0,416	-0,060	-1,99	
116	NMR	0,472	-0,004	-0,13	
117	NMR	0,477	0,001	0,03	
221	FTIR	0,585	0,109	3,62	
223	FTIR	0,438	-0,038	-1,26	
241	FTIR	0,570	0,094	3,12	
258	FTIR	0,720	0,244	8,10	(*)
259	FTIR	0,660	0,184	6,11	(***)
321	FTIR	0,360	-0,116	-3,85	

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

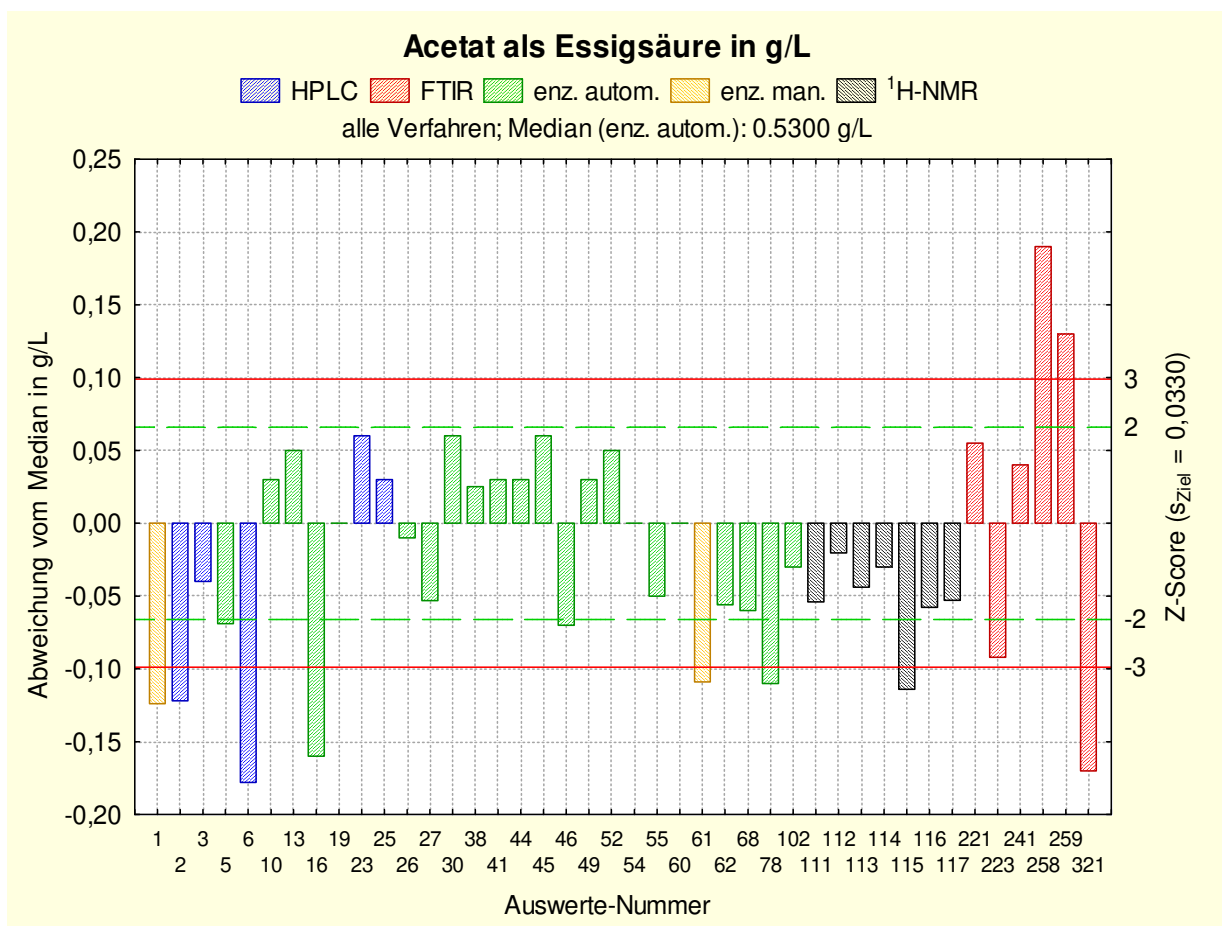
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

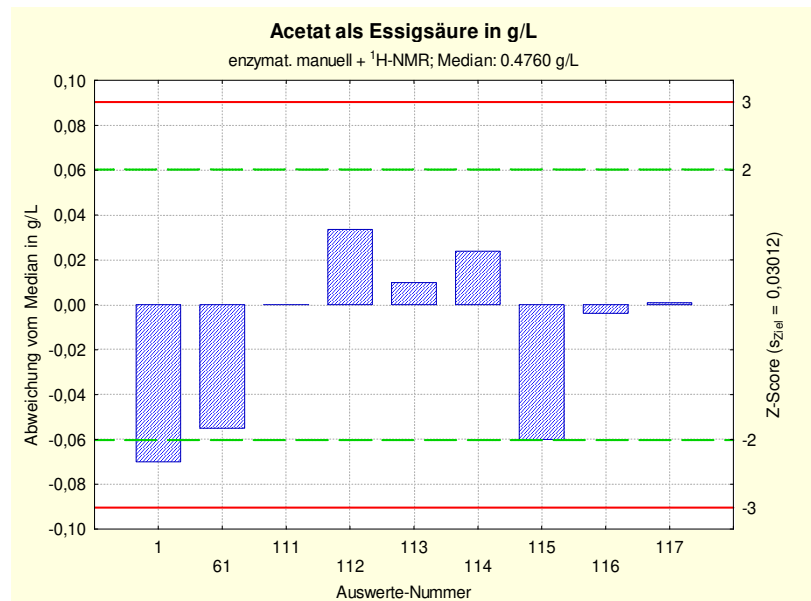
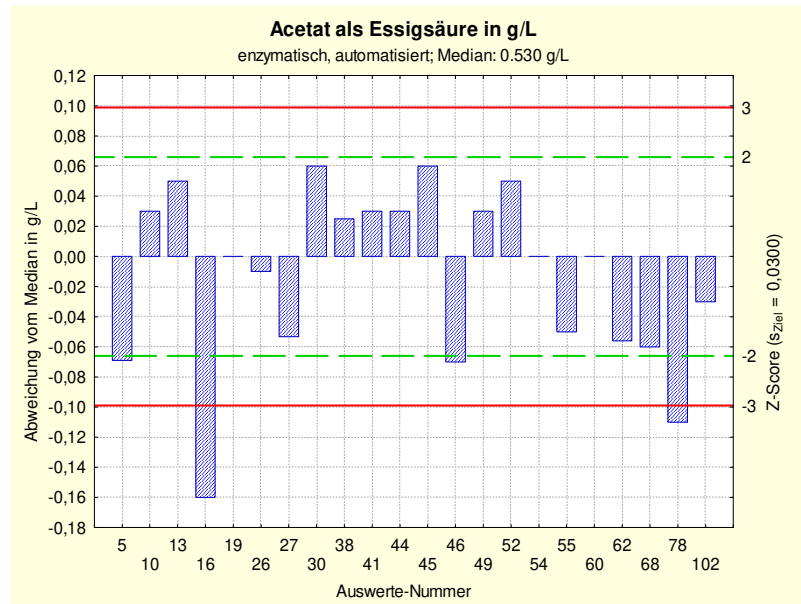
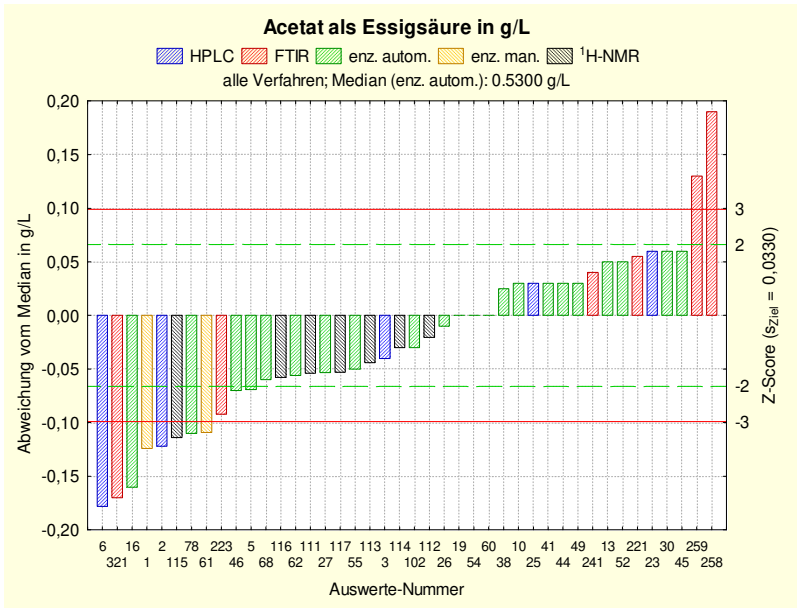
5.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	22	0,5195	0,0586
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	0,4800	0,1136
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,4135	0,0120
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	7	0,4806	0,0223
	HPLC, enzymatisch manuell + ¹ H-NMR	9	0,4638	0,0417
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,5555	0,1531

5.12.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	enz.man. + ¹ H-NMR alle Daten
Gültige Werte	22	9
Minimalwert	0,370	0,406
Mittelwert	0,516	0,463
Median	0,530	0,476
Maximalwert	0,590	0,510
Standardabweichung (s _L)	0,059	0,038
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,033	0,030
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,78	1,27
Quotient (s _L /s _{exp herk.})		
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})		
Quotient (u _M /s _H)	0,38	0,42
Quotient (u _M /s _{exp herk.})		
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})		





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	1,8210	-0,039	-0,41	-0,60	
02	HPLC	1,9400	0,080	0,83	1,23	
03	HPLC	1,6100	-0,250	-2,61	-3,84	
06	HPLC	1,2950	-0,565	-5,90	-8,67	(**)
07	enzymat. Hand	1,8600	0,000	0,00	0,00	
22	HPLC	1,6600	-0,200	-2,09	-3,07	
23	HPLC	1,6600	-0,200	-2,09	-3,07	
25	HPLC	1,8060	-0,054	-0,56	-0,83	
33	IC	1,9000	0,040	0,42	0,61	
39	IC	1,9000	0,040	0,42	0,61	
62	HPLC	2,0800	0,220	2,30	3,38	
97	HPLC	1,8700	0,010	0,10	0,15	
111	NMR	1,8845	0,025	0,26	0,38	
112	NMR	1,8504	-0,010	-0,10	-0,15	
113	NMR	1,7150	-0,145	-1,51	-2,23	
114	NMR	1,8049	-0,055	-0,57	-0,85	
115	NMR	1,6500	-0,210	-2,19	-3,22	
116	NMR	1,9005	0,040	0,42	0,62	
117	NMR	1,6750	-0,185	-1,93	-2,84	

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

5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,70	-0,109	-1,16	-1,71	
02	enz.(L-), autom.	1,80	-0,006	-0,06	-0,09	
03	enz.(L-), autom.	1,67	-0,137	-1,46	-2,14	
04	enz.(L-), autom.	1,87	0,060	0,64	0,94	
05	enz.(L-), autom.	1,79	-0,020	-0,21	-0,31	
07	enz.(L-) Hand	1,71	-0,100	-1,07	-1,57	
08	enz.(L-) Hand	1,64	-0,170	-1,82	-2,66	
09	enz.(L-), autom.	1,72	-0,090	-0,96	-1,41	
10	enz.(L-), autom.	1,74	-0,070	-0,75	-1,10	
11	enz.(L-), autom.	2,04	0,235	2,51	3,68	
13	enz.(L-), autom.	1,81	0,000	0,00	0,00	
16	enz.(L-), autom.	1,90	0,090	0,96	1,41	
19	enz.(L-), autom.	1,82	0,010	0,11	0,16	
27	enz.(L-), autom.	1,70	-0,110	-1,17	-1,72	
30	enz.(L-), autom.	1,92	0,113	1,21	1,77	
38	enz.(L-), autom.	1,87	0,060	0,64	0,94	
40	enz.(L-), autom.	1,73	-0,085	-0,91	-1,33	
41	enz.(L-), autom.	2,11	0,300	3,20	4,70	
42	enz.(L-), autom.	1,95	0,140	1,50	2,19	
44	enz.(L-), autom.	1,81	0,000	0,00	0,00	
45	enz.(L-), autom.	1,89	0,080	0,85	1,25	
46	enz.(L-), autom.	2,05	0,240	2,56	3,76	
49	enz.(L-), autom.	1,82	0,010	0,11	0,16	
52	enz.(L-), autom.	1,79	-0,020	-0,21	-0,31	
54	enz.(L-), autom.	1,70	-0,110	-1,17	-1,72	
55	enz.(L-), autom.	1,76	-0,049	-0,52	-0,77	
60	enz.(L-), autom.	1,95	0,140	1,50	2,19	
62	enz.(L-), autom.	1,67	-0,139	-1,48	-2,18	
63	enz.(L-) Hand	2,37	0,560	5,98	8,77	(**)
68	enz.(L-), autom.	1,82	0,010	0,11	0,16	
78	enz.(L-) Hand	1,69	-0,120	-1,28	-1,88	
102	enz.(L-), autom.	1,98	0,170	1,82	2,66	

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

5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,4400	0,599	6,31	2,75	
202	FTIR	1,2400	-0,601	-6,32	-2,75	
203	FTIR	1,6000	-0,240	-2,53	-1,10	
205	FTIR	1,5400	-0,300	-3,16	-1,38	
207	FTIR	1,7000	-0,141	-1,48	-0,64	
208	FTIR	1,5400	-0,300	-3,16	-1,38	
210	FTIR	1,2900	-0,550	-5,80	-2,53	
211	FTIR	1,6500	-0,191	-2,01	-0,87	
212	FTIR	2,3400	0,499	5,26	2,29	
213	FTIR	1,3300	-0,510	-5,37	-2,34	
215	FTIR	2,0000	0,159	1,68	0,73	
216	FTIR	2,7800	0,939	9,89	4,31	
217	FTIR	2,4100	0,570	6,00	2,61	
218	FTIR	2,1400	0,300	3,15	1,37	
219	FTIR	1,7900	-0,050	-0,53	-0,23	
220	FTIR	2,0000	0,159	1,68	0,73	
221	FTIR	2,1100	0,269	2,84	1,24	
222	FTIR	1,3300	-0,510	-5,37	-2,34	
223	FTIR	1,8120	-0,028	-0,30	-0,13	
224	FTIR	2,1000	0,260	2,73	1,19	
225	FTIR	1,2400	-0,601	-6,32	-2,75	
226	FTIR	1,4300	-0,411	-4,32	-1,88	
227	FTIR	1,5000	-0,341	-3,58	-1,56	
228	FTIR	1,8800	0,039	0,42	0,18	
229	FTIR	1,4300	-0,411	-4,32	-1,88	
230	FTIR	1,9300	0,089	0,94	0,41	
232	FTIR	2,2900	0,450	4,73	2,06	
234	FTIR	2,3500	0,510	5,36	2,34	
236	FTIR	1,5000	-0,341	-3,58	-1,56	
237	FTIR	1,1900	-0,651	-6,85	-2,98	
240	FTIR	2,2000	0,360	3,78	1,65	
241	FTIR	1,5600	-0,280	-2,95	-1,29	
242	FTIR	1,7600	-0,081	-0,85	-0,37	
243	FTIR	1,5000	-0,341	-3,58	-1,56	
244	FTIR	1,9000	0,059	0,63	0,27	
245	FTIR	1,9900	0,149	1,57	0,69	
246	FTIR	2,1000	0,260	2,73	1,19	
248	FTIR	2,1000	0,260	2,73	1,19	
249	FTIR	2,0000	0,159	1,68	0,73	
250	FTIR	1,3000	-0,540	-5,69	-2,48	
251	FTIR	1,1200	-0,720	-7,59	-3,31	
253	FTIR	2,2000	0,360	3,78	1,65	
254	FTIR	2,2000	0,360	3,78	1,65	
255	FTIR	2,0600	0,220	2,31	1,01	
256	FTIR	1,7400	-0,101	-1,06	-0,46	
257	FTIR	1,7500	-0,091	-0,95	-0,42	
258	FTIR	1,2000	-0,641	-6,74	-2,94	
259	FTIR	2,0000	0,159	1,68	0,73	
260	FTIR	1,8000	-0,040	-0,43	-0,19	
263	FTIR	1,3000	-0,540	-5,69	-2,48	
264	FTIR	2,3300	0,490	5,15	2,25	
265	FTIR	1,6100	-0,230	-2,43	-1,06	
266	FTIR	1,1700	-0,671	-7,06	-3,08	
267	FTIR	1,8100	-0,030	-0,32	-0,14	
268	FTIR	1,7900	-0,050	-0,53	-0,23	
269	FTIR	2,9000	1,059	11,15	4,86	
270	FTIR	2,2200	0,380	4,00	1,74	
271	FTIR	2,3600	0,519	5,47	2,38	
273	FTIR	2,3700	0,530	5,57	2,43	
274	FTIR	1,1000	-0,740	-7,80	-3,40	
275	FTIR	1,6000	-0,240	-2,53	-1,10	
276	FTIR	1,5000	-0,341	-3,58	-1,56	
277	FTIR	0,9600	-0,881	-9,27	-4,04	
278	FTIR	<NG	-0,841	-8,85	-3,86	
280	FTIR	1,5500	-0,290	-3,06	-1,33	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

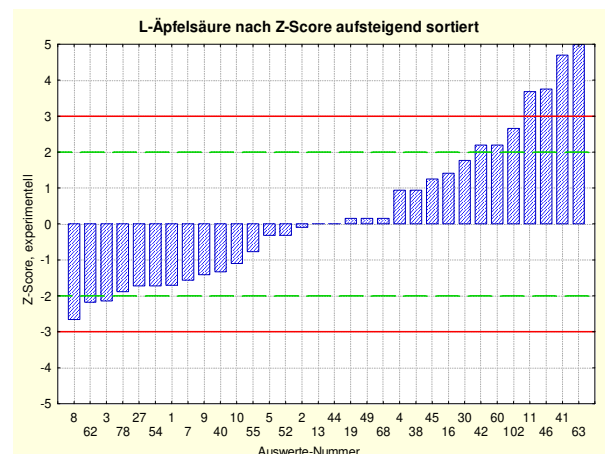
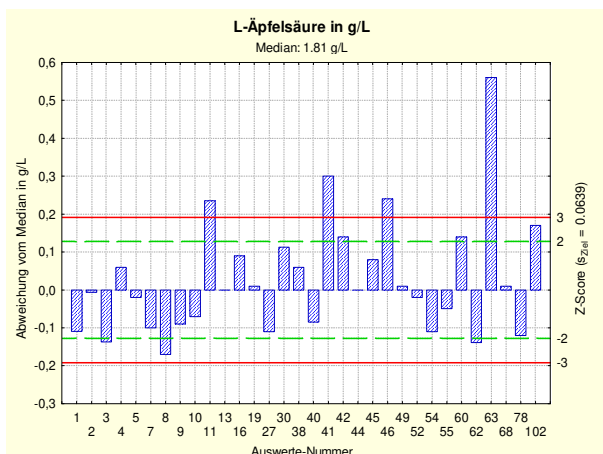
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	1,6400	-0,201	-2,11	-0,92	
282	FTIR	1,8600	0,020	0,21	0,09	
284	FTIR	1,5400	-0,300	-3,16	-1,38	
285	FTIR	2,0000	0,159	1,68	0,73	
286	FTIR	1,3800	-0,461	-4,85	-2,11	
287	FTIR	1,2000	-0,641	-6,74	-2,94	
321	FTIR	2,3300	0,490	5,15	2,25	
328	FTIR	1,2500	-0,591	-6,22	-2,71	
330	FTIR	1,2000	-0,641	-6,74	-2,94	
337	FTIR	1,1300	-0,711	-7,48	-3,26	

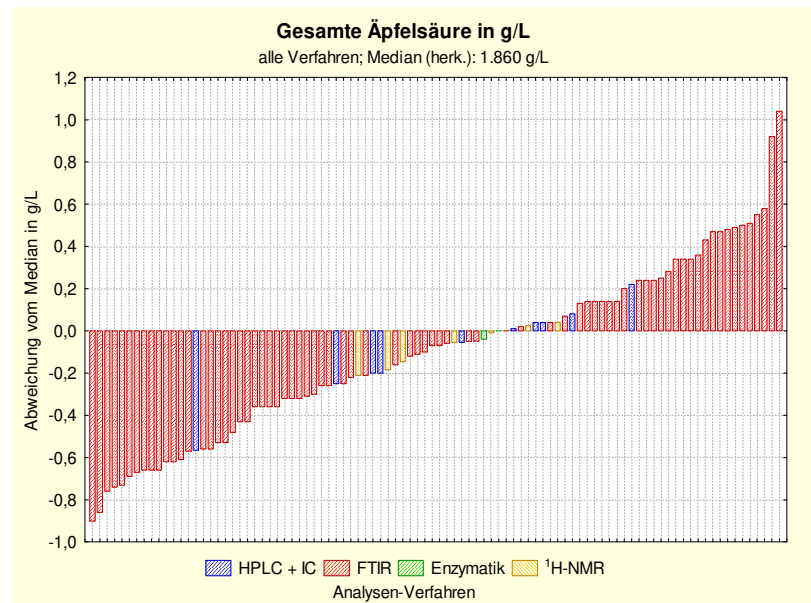
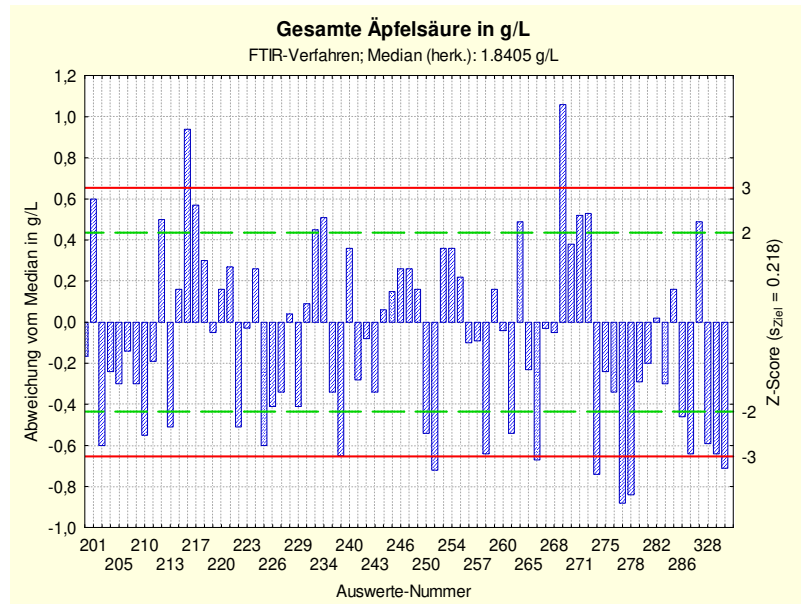
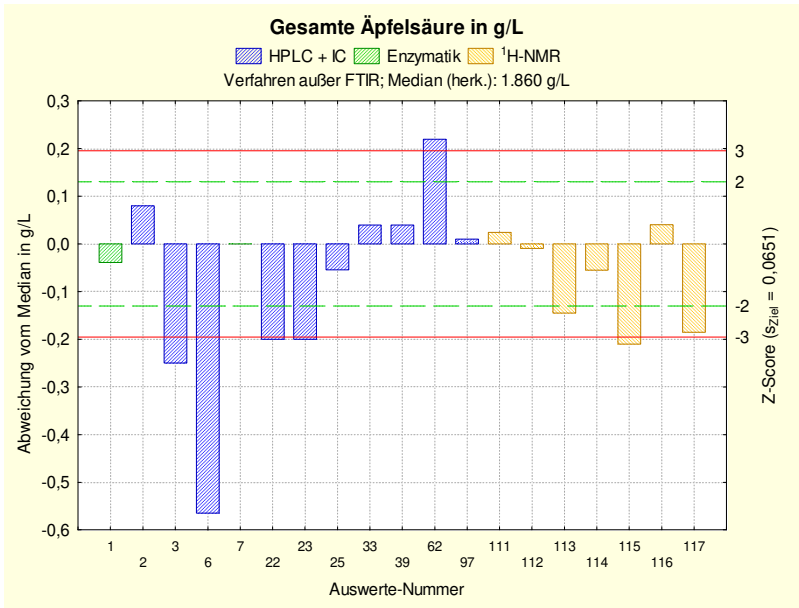
5.13.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12	11	32	31
Minimalwert	1,29	1,61	1,64	1,64
Mittelwert	1,784	1,828	1,838	1,820
Median	1,841	1,860	1,810	1,810
Maximalwert	2,08	2,08	2,37	2,11
Standardabweichung (s _L)	0,203	0,139	0,155	0,123
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,059	0,042	0,027	0,022
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,095	0,096	0,094	0,094
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,065	0,065	0,064	0,064
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218	0,218		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,14	1,45	1,66	1,31
Quotient (s _L /s _{exp})	3,14	2,14	2,43	1,92
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,93	0,64		
Quotient (u _M /s _H)	0,62	0,44	0,29	0,24
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,91	0,64	0,43	0,35
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,27	0,19		

5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	1,750	0,248
IC	Ionenchromatographie	2	1,900	0,000
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch manuell	2	1,841	0,031
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	12	1,809	0,160
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	1,744	0,471
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	1,783	0,116
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	27	1,835	0,122
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	1,719	0,082
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	32	1,822	0,133





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	0,730	0,120	3,23	
02	HPLC	0,684	0,074	1,99	
03	HPLC	0,600	-0,010	-0,27	
04	enzymat. autom.	0,650	0,040	1,08	
05	enzymat. autom.	0,648	0,038	1,02	
06	HPLC	0,664	0,054	1,45	
07	enzymat. Hand	0,683	0,073	1,96	
08	enzymat. Hand	0,668	0,058	1,56	
09	enzymat. autom.	0,566	-0,044	-1,18	
11	enzymat. autom.	0,610	0,000	0,00	
19	enzymat. autom.	0,610	0,000	0,00	
22	HPLC	0,380	-0,230	-6,19	(**)
23	HPLC	0,560	-0,050	-1,35	
25	HPLC	0,401	-0,209	-5,62	(**)
39	HPLC	0,600	-0,010	-0,27	
62	enzymat. autom.	0,549	-0,060	-1,63	
63	enzymat. Hand	3,080	2,470	66,45	(*)
68	enzymat. autom.	0,600	-0,010	-0,27	
97	HPLC	0,550	-0,060	-1,61	
111	NMR	0,547	-0,063	-1,69	
112	NMR	0,589	-0,021	-0,56	
113	NMR	0,564	-0,046	-1,24	
114	NMR	0,577	-0,033	-0,89	
115	NMR	0,605	-0,005	-0,13	
116	NMR	0,568	-0,042	-1,12	

5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,730	0,214	6,66	5,28	(**)
02	enz.(L-) autom.	0,488	-0,028	-0,85	-0,68	
03	enz.(L-) autom.	0,553	0,037	1,16	0,92	
04	enz.(L-) autom.	0,490	-0,026	-0,79	-0,63	
05	enz.(L-) autom.	0,500	-0,016	-0,48	-0,38	
07	enz.(L-) Hand	0,523	0,007	0,23	0,18	
08	enz.(L-) Hand	0,511	-0,005	-0,14	-0,11	
09	enz.(L-) autom.	0,501	-0,015	-0,45	-0,36	
10	enz.(L-) autom.	0,560	0,044	1,38	1,10	
11	enz.(L-) autom.	0,480	-0,036	-1,10	-0,87	
13	enz.(L-) autom.	0,610	0,094	2,93	2,33	
16	enz.(L-) autom.	0,300	-0,216	-6,69	-5,31	(**)
19	enz.(L-) autom.	0,480	-0,036	-1,10	-0,87	
27	enz.(L-) autom.	0,500	-0,016	-0,48	-0,38	
30	enz.(L-) autom.	0,452	-0,064	-1,97	-1,56	
38	enz.(L-) autom.	0,520	0,004	0,14	0,11	
40	enz.(L-) autom.	0,475	-0,041	-1,26	-1,00	
41	enz.(L-) autom.	0,500	-0,016	-0,48	-0,38	
42	enz.(L-) autom.	0,580	0,064	2,00	1,59	
44	enz.(L-) autom.	0,520	0,004	0,14	0,11	
45	enz.(L-) autom.	0,590	0,074	2,31	1,84	
46	enz.(L-) autom.	0,540	0,024	0,76	0,60	
49	enz.(L-) autom.	0,520	0,004	0,14	0,11	
54	enz.(L-) autom.	0,600	0,084	2,62	2,08	
55	enz.(L-) autom.	0,455	-0,061	-1,88	-1,49	
60	enz.(L-) autom.	0,600	0,084	2,62	2,08	
62	enz.(L-) autom.	0,686	0,170	5,29	4,20	
63	enz.(L-) Hand	2,460	1,944	60,35	47,90	(*)
68	enz.(L-) autom.	0,480	-0,036	-1,10	-0,87	
78	enz.(L-) Hand	0,500	-0,016	-0,48	-0,38	
102	enz.(L-) autom.	0,630	0,114	3,55	2,82	

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

(**) Diese Werte wurden bei denwiederholten Berechnungen nicht berücksichtigt.

5.14.3 FTIR-Laboregebnisse Gesamte Milchsäure

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,220	-0,390			
202	FTIR	0,943	0,333			
203	FTIR	0,660	0,050			
205	FTIR	1,610	1,000			
207	FTIR	1,100	0,490			
208	FTIR	0,650	0,040			
210	FTIR	0,190	-0,420			
211	FTIR	1,400	0,790			
212	FTIR	0,880	0,270			
213	FTIR	0,780	0,170			
215	FTIR	0,200	-0,410			
216	FTIR	0,070	-0,540			
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	<= 0				
219	FTIR	<= 0				
220	FTIR	<= 0				
221	FTIR	0,565	-0,045			
222	FTIR	0,340	-0,270			
223	FTIR	0,308	-0,302			
224	FTIR	0,100	-0,510			
225	FTIR	0,820	0,210			
226	FTIR	0,610	0,000			
227	FTIR	0,700	0,090			
228	FTIR	0,110	-0,500			
229	FTIR	0,260	-0,350			
230	FTIR	0,210	-0,400			
232	FTIR	0,190	-0,420			
234	FTIR	0,260	-0,350			
236	FTIR	0,500	-0,110			
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	0,120	-0,490			
241	FTIR	0,520	-0,090			
242	FTIR	0,670	0,060			
243	FTIR	0,900	0,290			
244	FTIR	0,370	-0,240			
245	FTIR	1,220	0,610			
246	FTIR	0,100	-0,510			
248	FTIR	0,600	-0,010			
249	FTIR	0,570	-0,040			
250	FTIR	1,300	0,690			
251	FTIR	0,830	0,220			
253	FTIR	0,100	-0,510			
254	FTIR	<= 0				
255	FTIR	0,810	0,200			
256	FTIR	-0,050	-0,660			
257	FTIR	<= 0				
258	FTIR	0,700	0,090			
259	FTIR	0,400	-0,210			
260	FTIR	<= 0				
263	FTIR	0,300	-0,310			
264	FTIR	1,260	0,650			
265	FTIR	0,010	-0,600			
266	FTIR	0,730	0,120			
267	FTIR	<= 0				
268	FTIR	0,290	-0,320			
269	FTIR	-0,530	-1,140			
270	FTIR	0,640	0,030			
271	FTIR	0,170	-0,440			
273	FTIR	0,340	-0,270			
274	FTIR	0,280	-0,330			
275	FTIR	<= 0				
276	FTIR	0,300	-0,310			
277	FTIR	0,600	-0,010			
278	FTIR	1,300	0,690			

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

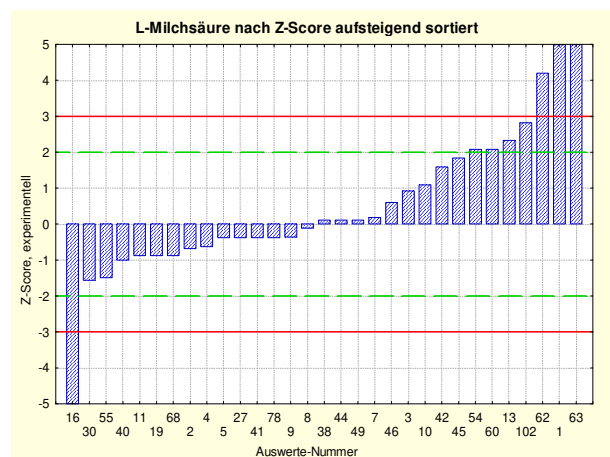
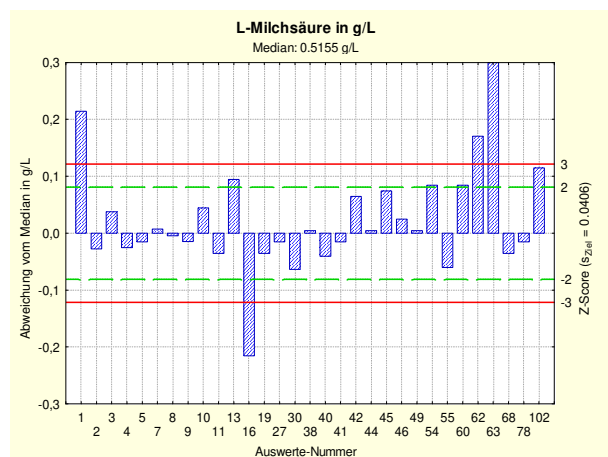
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	<= 0				
281	FTIR	0,580	-0,030			
282	FTIR	0,760	0,150			
284	FTIR	0,290	-0,320			
285	FTIR	0,500	-0,110			
286	FTIR	0,590	-0,020			
287	FTIR	0,900	0,290			
321	FTIR	0,440	-0,170			
328	FTIR	0,900	0,290			
330	FTIR	1,100	0,490			
337	FTIR	1,450	0,840			

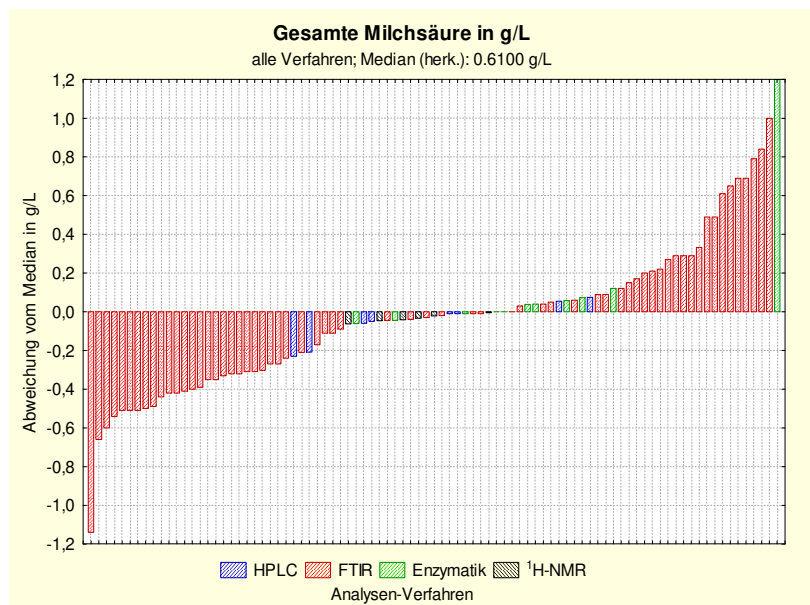
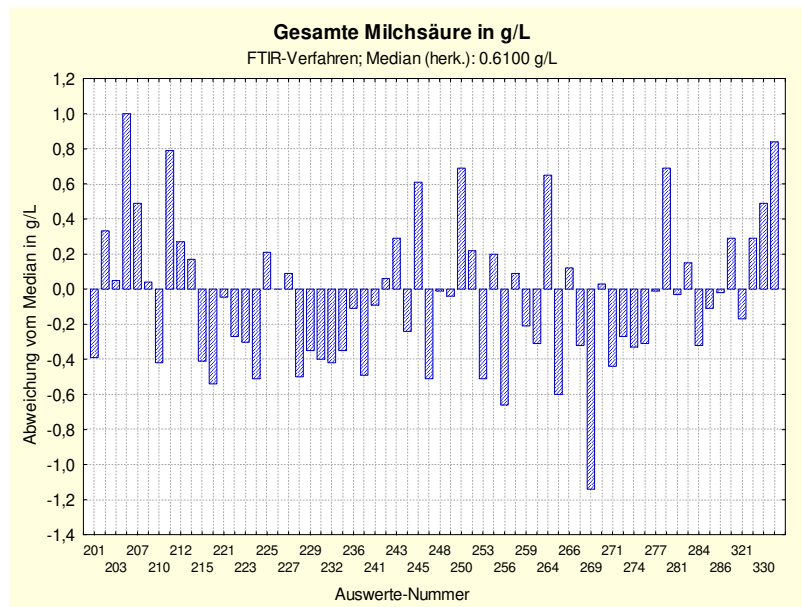
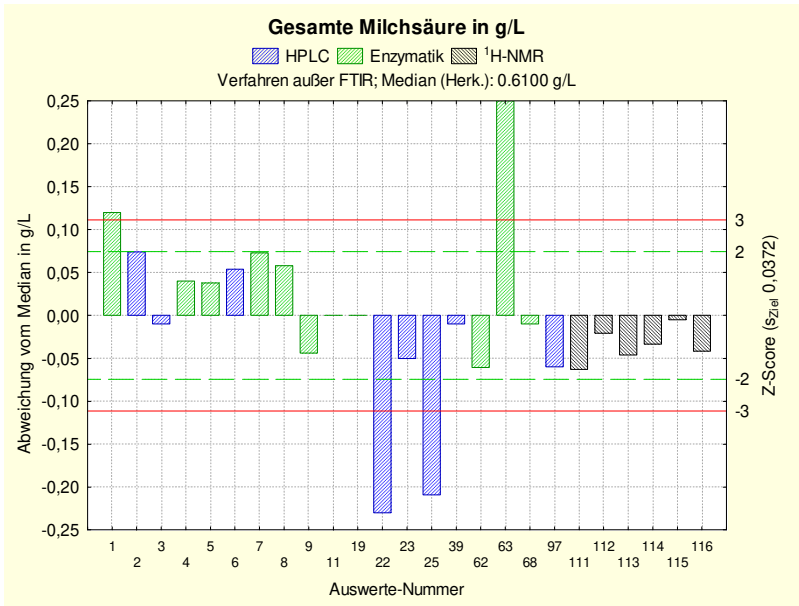
5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	16	30	28
Minimalwert	0,38	0,55	0,30	0,45
Mittelwert	0,597	0,623	0,529	0,530
Median	0,605	0,610	0,516	0,516
Maximalwert	0,73	0,73	0,73	0,69
Standardabweichung (s _L)	0,091	0,054	0,079	0,057
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,021	0,013	0,014	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,037	0,037	0,032	0,032
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,041	0,041
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,209)	(0,209)		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,46	1,45	2,46	1,78
Quotient (s _L /s _{exp})			1,95	1,41
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(0,44)	(0,26)		
Quotient (u _M /s _H)	0,58	0,36	0,45	0,34
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,36	0,27
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,10)	(0,06)		

5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	0,5585	0,1199
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	7	0,6048	0,0428
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	1,2462	1,2536
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	19	0,6159	0,0785
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,4601	0,4240
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	0,5744	0,0215
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	26	0,5237	0,0605
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	0,6839	0,3236
	alle Verfahren L-Milchsäure	31	0,5317	0,0670





5.15 Reduktone [mg/L]

5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	20,0	0,00	0,00	
10	Glyoxal/potentiometr.	17,0	-3,00	-1,47	
16	Glyoxal/Stärke	22,0	2,00	0,98	
18	Glyoxal/Stärke	18,0	-2,00	-0,98	
19	Glyoxal/potentiometr.	18,7	-1,30	-0,64	
21	Glyoxal/Stärke	20,0	0,00	0,00	
22	Glyoxal/potentiometr.	24,0	4,00	1,96	
23	Glyoxal/Stärke	24,0	4,00	1,96	
24	Glyoxal/Stärke	14,0	-6,00	-2,94	
25	Glyoxal/Stärke	20,0	0,00	0,00	
26	Glyoxal/potentiometr.	22,0	2,00	0,98	
27	Glyoxal/potentiometr.	21,0	1,00	0,49	
29	Glyoxal/Stärke	21,0	1,00	0,49	
30	Glyoxal/Stärke	18,0	-2,00	-0,98	
34	Glyoxal/Stärke	12,0	-8,00	-3,92	
35	Glyoxal/Stärke	11,0	-9,00	-4,41	
36	Glyoxal/Stärke	23,0	3,00	1,47	
38	Glyoxal/Stärke	23,0	3,00	1,47	
39	Glyoxal/potentiometr.	23,5	3,50	1,72	
40	Glyoxal/Stärke	19,0	-1,00	-0,49	
41	Glyoxal/Stärke	22,0	2,00	0,98	
42	Glyoxal/Stärke				
49	Glyoxal/Stärke	19,0	-1,00	-0,49	
51	Propionaldehyd/Stärke	25,0	5,00	2,45	
55	Glyoxal/MTT	19,7	-0,30	-0,15	
59	Glyoxal/potentiometr.	21,0	1,00	0,49	
60	Glyoxal/Stärke	20,0	0,00	0,00	
62	Acetaldehyd/Stärke	40,0	20,00	9,81	(*)
63	Glyoxal/Stärke	22,0	2,00	0,98	
64	Glyoxal/Stärke	20,0	0,00	0,00	
65	Glyoxal/potentiometr.	20,0	0,00	0,00	
66	Glyoxal/Stärke	11,0	-9,00	-4,41	
67	Glyoxal/potentiometr.	21,0	1,00	0,49	
68	Acetaldehyd/potent.	25,0	5,00	2,45	
70	Glyoxal/potentiometr.	25,0	5,00	2,45	
72	Glyoxal/Stärke	18,4	-1,60	-0,78	
73	Glyoxal/Stärke	3,0	-17,00	-8,34	(*)
76	Glyoxal/potentiometr.	18,0	-2,00	-0,98	
78	Acetaldehyd/Stärke	24,0	4,00	1,96	
80	Glyoxal/potentiometr.	19,0	-1,00	-0,49	
83	Glyoxal/potentiometr.	24,0	4,00	1,96	
84	Glyoxal/potentiometr.	20,0	0,00	0,00	
86	Glyoxal/potentiometr.	17,0	-3,00	-1,47	
96	Glyoxal/potentiometr.	22,9	2,90	1,42	
102	Glyoxal/Stärke	12,0	-8,00	-3,92	
110	Glyoxal/Stärke	16,0	-4,00	-1,96	

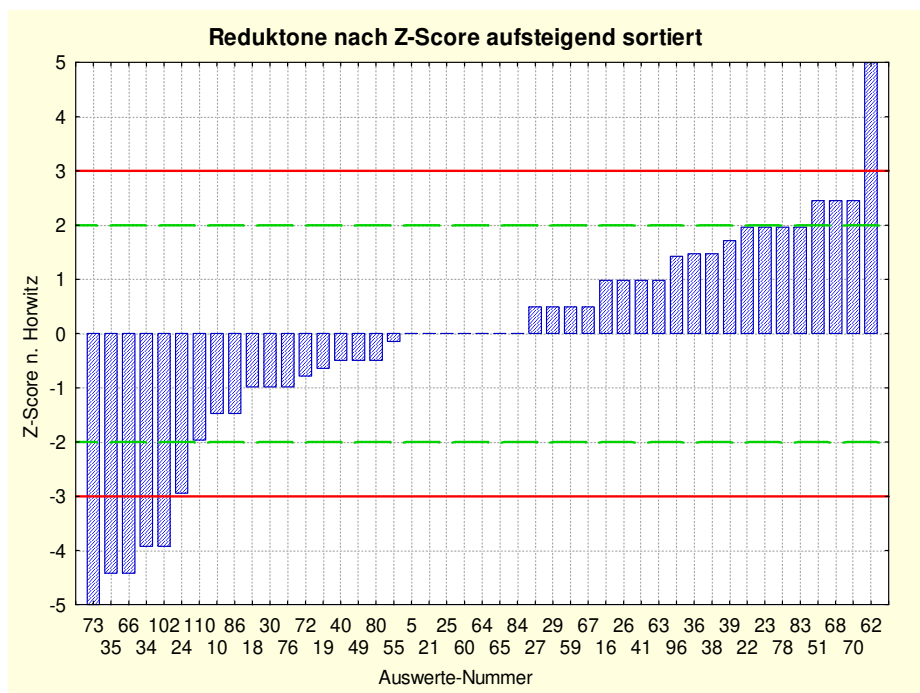
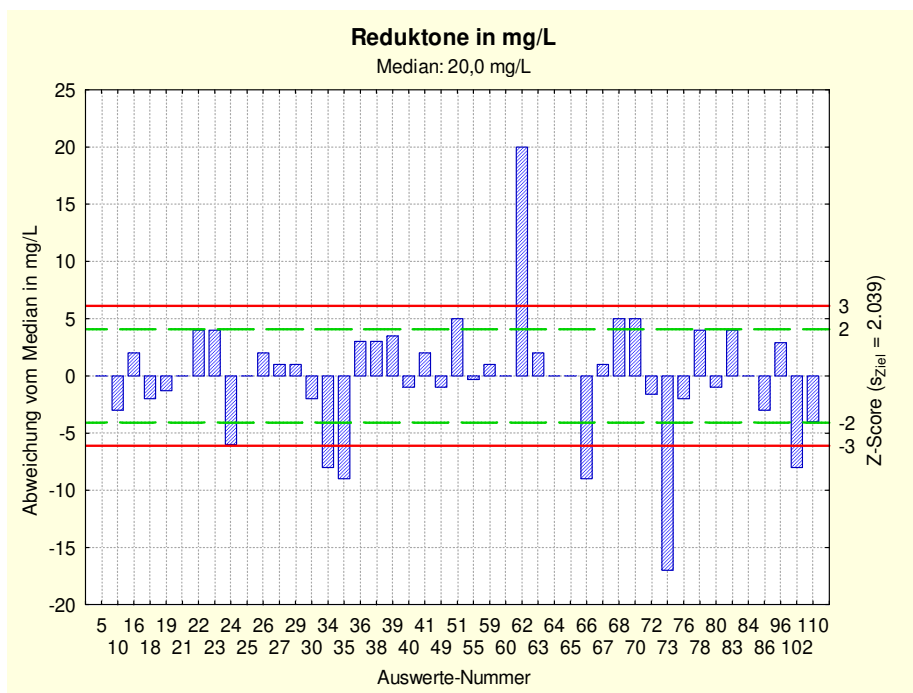
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

5.15.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	2	32,000	12,830
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	22,500	4,009
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	1	25,000	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	23	18,140	4,773
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	16	20,881	2,883
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	19,700	
	alle Verfahren	45	20,139	3,506

5.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	43
Minimalwert	11,0
Mittelwert	19,84
Median	20,00
Maximalwert	25,0
Standardabweichung (s _L)	3,703
Standardfehler des Mittelwertes	0,565
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,039
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,82
Quotient (s _L /s _{exp})	
Quotient (U _M /s _H)	0,28
Quotient (U _M / s _{exp} herk.)	



5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.2	58,0	7,42	1,66	
02	LwK 6.2	63,8	13,22	2,95	
04	LwK 6.3	52,0	1,42	0,32	
05	LwK 6.2	48,7	-1,88	-0,42	
06	LwK 6.2	55,0	4,46	1,00	
08	LwK 6.2	47,7	-2,88	-0,64	
09	LwK 6.2	52,8	2,22	0,50	
11	LwK 6.2	51,2	0,63	0,14	
13	LwK 6.3	55,0	4,42	0,99	
28	LwK 6.2	50,5	-0,03	-0,01	
41	LwK 6.3	51,0	0,42	0,09	
44	LwK 6.3	44,0	-6,58	-1,47	
45	LwK 6.3	54,0	3,42	0,76	
46	LwK 6.3	45,0	-5,58	-1,24	
52	LwK 6.3	49,0	-1,58	-0,35	
54	LwK 6.4	42,0	-8,58	-1,91	
55	LwK 6.4	47,7	-2,88	-0,64	
60	LwK 6.3	43,0	-7,58	-1,69	
74	LwK 6.4	45,5	-5,08	-1,13	
94	LwK 6.3	50,3	-0,28	-0,06	
105	LwK 6.2	50,6	0,02	0,01	
106	LwK 6.2	52,0	1,42	0,32	
202	LwK 6.5	63,5	12,97	2,89	
205	LwK 6.5	41,0	-9,58	-2,14	
206	LwK 6.5	64,0	13,42	2,99	
208	LwK 6.5	48,8	-1,78	-0,40	
210	LwK 6.5	44,0	-6,58	-1,47	
211	LwK 6.5	47,3	-3,28	-0,73	
213	LwK 6.5	54,0	3,42	0,76	
219	LwK 6.5	46,0	-4,58	-1,02	
220	LwK 6.5	53,0	2,42	0,54	
225	LwK 6.5	54,0	3,42	0,76	
237	LwK 6.5	39,0	-11,58	-2,58	
243	LwK 6.5	52,0	1,42	0,32	
248	LwK 6.5	53,0	2,42	0,54	
250	LwK 6.5	43,0	-7,58	-1,69	
251	LwK 6.5	45,0	-5,58	-1,24	
257	LwK 6.5	54,2	3,63	0,81	
261	LwK 6.5	63,0	12,45	2,78	
262	LwK 6.5	40,0	-10,58	-2,36	
263	LwK 6.5	190,0	139,43	31,10	(*)
264	LwK 6.5	58,0	7,42	1,66	
265	LwK 6.5	39,0	-11,58	-2,58	
277	LwK 6.5	48,0	-2,58	-0,57	
278	LwK 6.5	50,0	-0,58	-0,13	
279	LwK 6.5	43,0	-7,58	-1,69	
280	LwK 6.5	48,0	-2,58	-0,57	
287	LwK 6.5	52,0	1,42	0,32	
328	LwK 6.5	52,0	1,42	0,32	
330	LwK 6.5	36,0	-14,58	-3,25	
337	LwK 6.5	39,0	-11,58	-2,58	

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillation und Photometrie ab.

5.16.2 Laborergebnisse: jodometrisch, einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
10	Redox incl.	71,0	5,00	0,89	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	72,0	6,00	1,07	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	66,0	0,00	0,00	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	4,00	0,71	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	2,00	0,36	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	-18,00	-3,20	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	4,00	0,71	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	66,0	0,00	0,00	
30	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	-2,00	-0,36	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	-4,00	-0,71	
35	LwK 6.1(incl.Red.)	65,0	-1,00	-0,18	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	2,00	0,36	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	72,0	6,00	1,07	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	67,5	1,50	0,27	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	4,00	0,71	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	2,00	0,36	
59	Redox incl.	70,0	4,00	0,71	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	63,0	-3,00	-0,53	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	69,0	3,00	0,53	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	67,0	1,00	0,18	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	-10,00	-1,78	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	65,9	-0,10	-0,02	
73	LwK 6.1(incl.Red.)	53,0	-13,00	-2,31	
76	Redox incl.	49,0	-17,00	-3,02	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	74,0	8,00	1,42	
79	LwK 6.1(incl.Red.)	61,0	-5,00	-0,89	
83	Redox incl.	65,0	-1,00	-0,18	
84	Redox incl.	66,0	0,00	0,00	
86	Redox incl.	66,0	0,00	0,00	
102	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	-2,00	-0,36	
110	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	-2,00	-0,36	

5.16.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
19	LwK 6.1(excl.Red.)	48,8	0,80	0,19	0,14	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	0,00	0,00	0,00	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	53,0	5,00	1,17	0,89	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	46,4	-1,60	-0,37	-0,28	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	9,00	2,10	1,60	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	-2,00	-0,47	-0,36	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	46,8	-1,20	-0,28	-0,21	
62	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	-16,00	-3,73	-2,85	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	50,0	2,00	0,47	0,36	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	0,00	0,00	0,00	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	72,0	24,00	5,60	4,27	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	51,0	3,00	0,70	0,53	
96	LwK 6.1(excl.Red.)	47,0	-1,00	-0,23	-0,18	

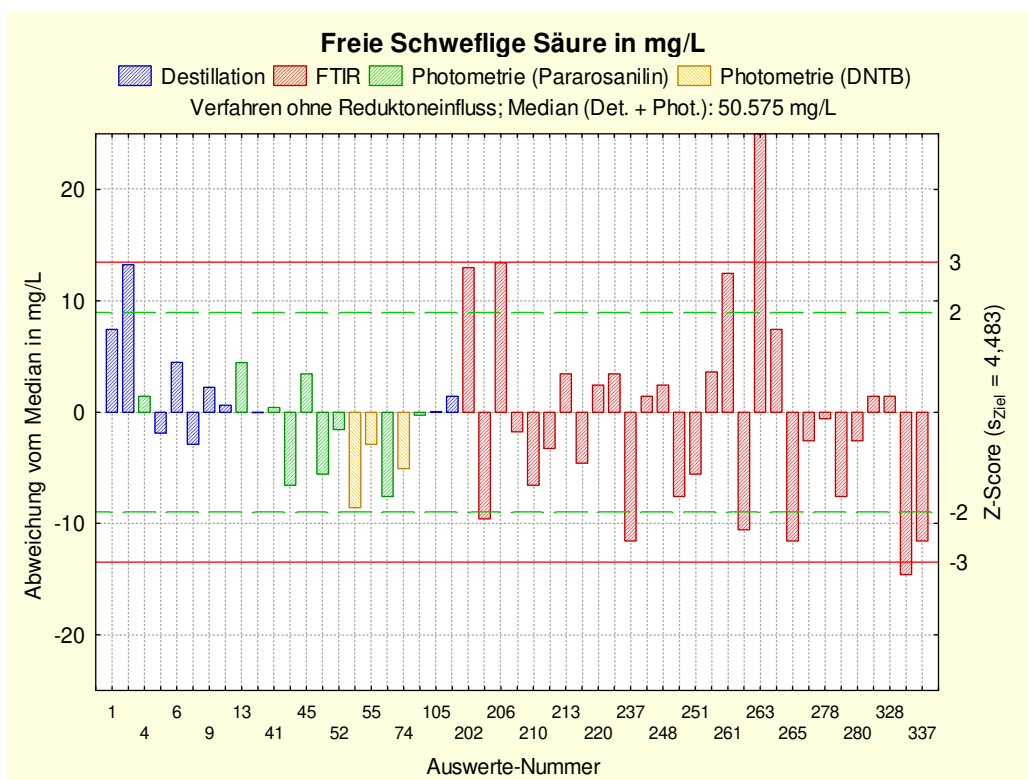
SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

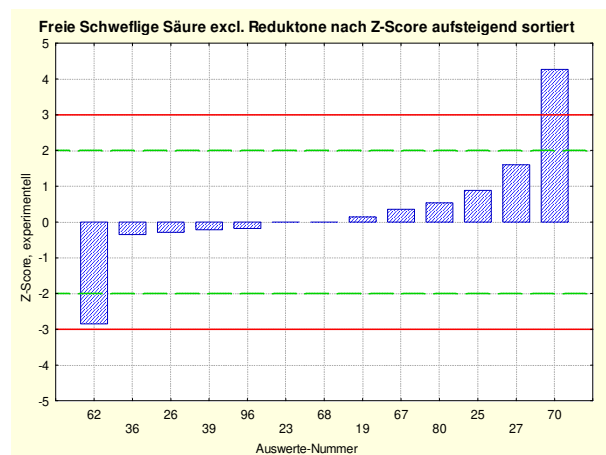
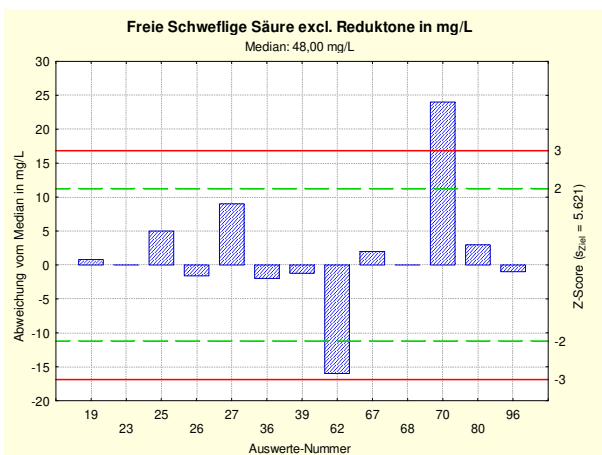
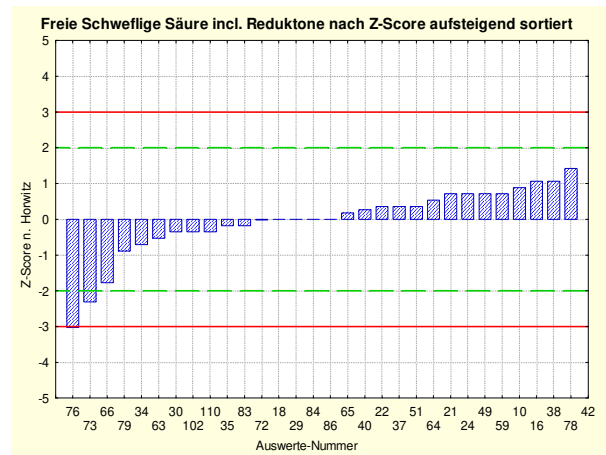
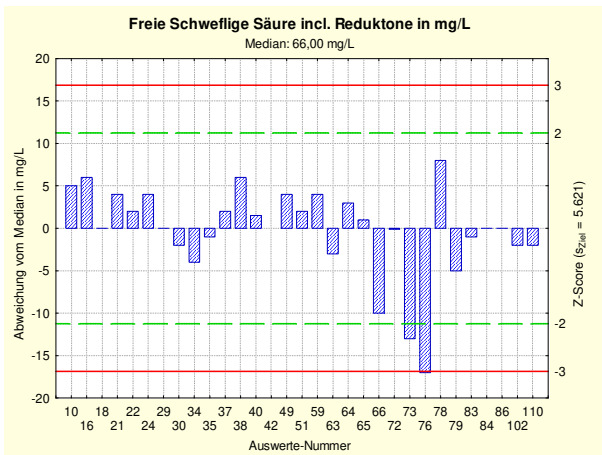
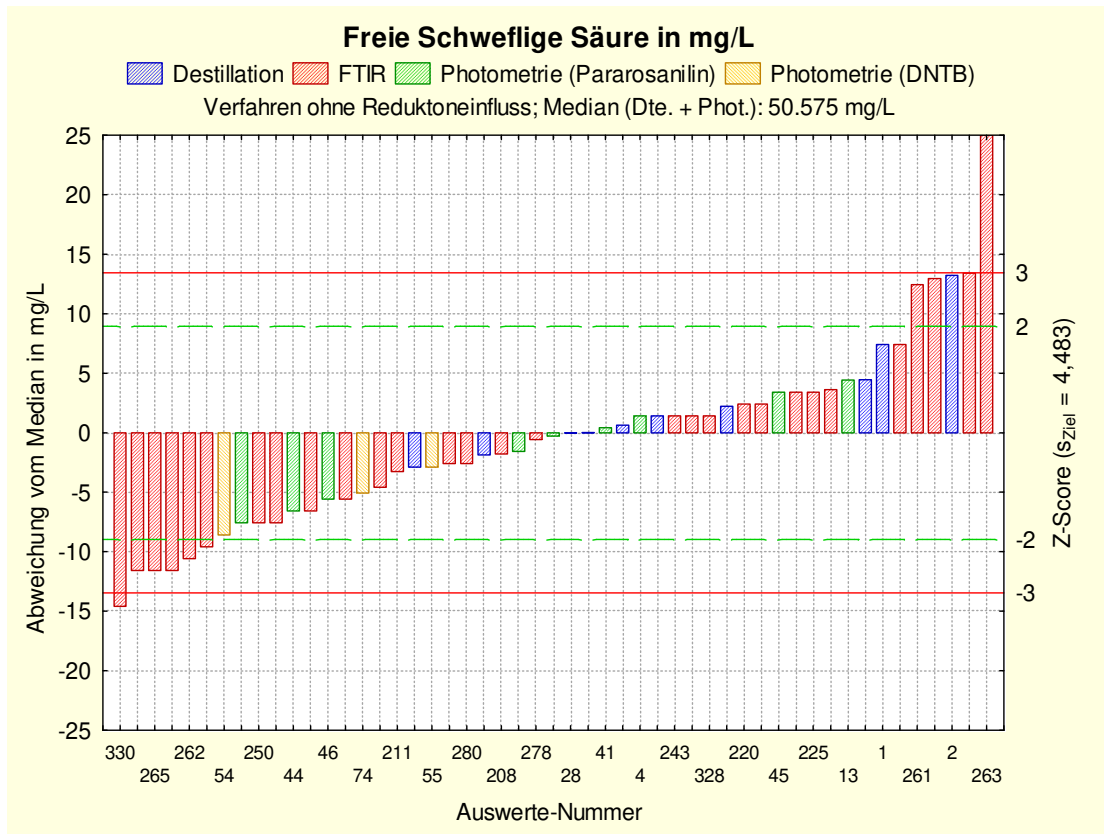
5.16.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation, Photometrie	Jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	22	30	13
Minimalwert	42,0	49,0	32,0
Mittelwert	50,40	65,75	49,69
Median	50,58	66,00	48,00
Maximalwert	63,8	74,0	72,0
Standardabweichung (s _L)	5,089	5,475	8,772
Standardfehler des Mittelwertes	1,085	1,000	2,433
Zielstandardabweichung	4,483	5,621	4,289
- nach Horwitz (s _H)			
- experimentell (s _H incl. Red.)			5,621
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,14	0,97	2,05
Quotient (s _L /s _H incl. Red.)			1,56
Quotient (u _M /s _H)	0,24	0,18	0,57
Quotient (u _M / s _{exp} herk.)			0,43

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	24	66,481	4,197
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	6	66,119	4,944
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	30	66,437	4,059
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - mit Abzug der Reduktone	13	49,064	4,133
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	52,515	4,150
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	9	49,256	4,945
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	45,067	3,260
	Destillations- und photometrische Verfahren	22	50,138	4,876
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	29	49,279	8,766





5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]**5.17.1 Laborergebnisse**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	176,0	-14,50	-1,05	-2,71	
02	LwK 7.3	207,5	17,00	1,23	3,17	
04	LwK 7.7	196,0	5,50	0,40	1,03	
05	LwK 7.3	197,8	7,30	0,53	1,36	
06	LwK 7.3	204,0	13,50	0,98	2,52	
07	LwK 7.4.2	189,0	-1,50	-0,11	-0,28	
08	LwK 7.3	193,4	2,90	0,21	0,54	
09	LwK 7.3	188,0	-2,50	-0,18	-0,47	
10	LwK 7.4.2	171,0	-19,50	-1,41	-3,64	
11	LwK 7.3	194,5	4,00	0,29	0,75	
13	LwK 7.4.1	195,0	4,50	0,33	0,84	
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	2,50	0,18	0,47	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	194,0	3,50	0,25	0,65	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	186,1	-4,40	-0,32	-0,82	
20	LwK 7.4.2	185,0	-5,50	-0,40	-1,03	
21	LwK 7.4.2	200,0	9,50	0,69	1,77	
22	LwK 7.3	150,0	-40,50	-2,93	-7,56	(**)
23	LwK 7.4.2m	182,0	-8,50	-0,61	-1,59	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	212,0	21,50	1,55	4,01	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	216,0	25,50	1,84	4,76	
26	LwK 7.4.2	185,0	-5,50	-0,40	-1,03	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	193,0	2,50	0,18	0,47	
28	LwK 7.3	201,5	11,00	0,80	2,05	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	214,0	23,50	1,70	4,39	
30	LwK 7.4.1	190,0	-0,50	-0,04	-0,09	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	209,0	18,50	1,34	3,45	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	202,0	11,50	0,83	2,15	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	205,0	14,50	1,05	2,71	
37	LwK 7.4.1	187,0	-3,50	-0,25	-0,65	
38	LwK 7.7	188,0	-2,50	-0,18	-0,47	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	202,0	11,50	0,83	2,15	
40	LwK 7.4.1	191,0	0,50	0,04	0,09	
41	LwK 7.6	201,0	10,50	0,76	1,96	
42	LwK 7.4.2	186,0	-4,50	-0,33	-0,84	
44	LwK 7.4.1	197,0	6,50	0,47	1,21	
45	LwK 7.7	198,0	7,50	0,54	1,40	
46	LwK 7.7	191,0	0,50	0,04	0,09	
49	LwK 7.4.2	181,0	-9,50	-0,69	-1,77	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	209,0	18,50	1,34	3,45	
52	LwK 7.7	186,0	-4,50	-0,33	-0,84	
54	LwK 7.7	192,0	1,50	0,11	0,28	
55	LwK 7.7	190,2	-0,30	-0,02	-0,06	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	224,0	33,50	2,42	6,25	(***)
60	LwK 7.3	174,0	-16,50	-1,19	-3,08	
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	193,0	2,50	0,18	0,47	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	220,0	29,50	2,13	5,51	(***)
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	197,0	6,50	0,47	1,21	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	211,0	20,50	1,48	3,83	
66	LwK 7.4.2	198,0	7,50	0,54	1,40	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	189,0	-1,50	-0,11	-0,28	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	204,0	13,50	0,98	2,52	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	210,0	19,50	1,41	3,64	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	189,2	-1,30	-0,09	-0,24	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	185,0	-5,50	-0,40	-1,03	
74	LwK 7.6	260,0	69,50	5,02	12,97	(***)
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	198,0	7,50	0,54	1,40	
78	LwK 7.4.1	191,0	0,50	0,04	0,09	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	208,0	17,50	1,27	3,27	
80	Redox excl.	181,0	-9,50	-0,69	-1,77	
83	Redox incl.	186,0	-4,50	-0,33	-0,84	

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

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

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	197,0	6,50	0,47	1,21	
90	LwK 7.4.2	186,0	-4,50	-0,33	-0,84	
94	LwK 7.6	190,0	-0,50	-0,04	-0,09	
95	LwK 7.4.2	201,2	10,70	0,77	2,00	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	190,0	-0,50	-0,04	-0,09	
97	LwK 7.3	195,9	5,40	0,39	1,01	
98	LwK 7.4.2	180,0	-10,50	-0,76	-1,96	
99	LwK 7.4.2	185,0	-5,50	-0,40	-1,03	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	201,0	10,50	0,76	1,96	
102	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	24,50	1,77	4,57	
105	LwK 7.3	195,5	5,00	0,36	0,93	
106	LwK 7.3	195,0	4,50	0,33	0,84	
107	LwK 7.4.2	185,0	-5,50	-0,40	-1,03	
110	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	24,50	1,77	4,57	
202	LwK 7.8	186,6	-3,90	-0,28	-0,73	
205	LwK 7.8	191,0	0,50	0,04	0,09	
206	LwK 7.8	197,1	6,60	0,48	1,23	
207	LwK 7.8	68,0	-122,50	-8,86	-22,87	(*)
208	LwK 7.8	203,2	12,70	0,92	2,37	
210	LwK 7.8	218,0	27,50	1,99	5,13	
211	LwK 7.8	216,0	25,52	1,85	4,76	
213	LwK 7.8	206,0	15,50	1,12	2,89	
219	LwK 7.8	189,0	-1,50	-0,11	-0,28	
220	LwK 7.8	195,0	4,50	0,33	0,84	
225	LwK 7.8	190,0	-0,50	-0,04	-0,09	
237	LwK 7.8	209,0	18,50	1,34	3,45	
243	LwK 7.8	183,0	-7,50	-0,54	-1,40	
248	LwK 7.8	202,0	11,50	0,83	2,15	
250	LwK 7.8	187,0	-3,50	-0,25	-0,65	
251	LwK 7.8	204,0	13,50	0,98	2,52	
257	LwK 7.8	186,0	-4,50	-0,33	-0,84	
261	LwK 7.8	191,2	0,67	0,05	0,13	
262	LwK 7.8	182,5	-8,00	-0,58	-1,49	
263	LwK 7.8	54,0	-136,50	-9,87	-25,48	(*)
264	LwK 7.8	191,0	0,50	0,04	0,09	
265	LwK 7.8	178,0	-12,50	-0,90	-2,33	
277	LwK 7.8	193,0	2,50	0,18	0,47	
278	LwK 7.8	212,0	21,50	1,55	4,01	
279	LwK 7.8	177,0	-13,50	-0,98	-2,52	
280	LwK 7.8	192,0	1,50	0,11	0,28	
287	LwK 7.8	191,0	0,50	0,04	0,09	
328	LwK 7.8	165,8	-24,71	-1,79	-4,61	
330	LwK 7.8	158,0	-32,50	-2,35	-6,07	
337	LwK 7.8	209,0	18,50	1,34	3,45	

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

Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

5.17.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Verfahren excl. Reduktone; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	186,1	-6,90	-0,49	-1,29	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	193,0	0,00	0,00	0,00	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	205,0	12,00	0,86	2,24	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	202,0	9,00	0,64	1,68	
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	193,0	0,00	0,00	0,00	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	189,0	-4,00	-0,29	-0,75	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	204,0	11,00	0,79	2,05	
80	Redox excl.	181,0	-12,00	-0,86	-2,24	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	190,0	-3,00	-0,21	-0,56	

5.17.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Verfahren incl. Reduktone; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	-15,50	-1,04	-2,89	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	194,0	-14,50	-0,97	-2,71	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	212,0	3,50	0,23	0,65	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	216,0	7,50	0,50	1,40	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	214,0	5,50	0,37	1,03	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	209,0	0,50	0,03	0,09	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	202,0	-6,50	-0,44	-1,21	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	209,0	0,50	0,03	0,09	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	224,0	15,50	1,04	2,89	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	220,0	11,50	0,77	2,15	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	197,0	-11,50	-0,77	-2,15	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	211,0	2,50	0,17	0,47	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	210,0	1,50	0,10	0,28	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	189,2	-19,30	-1,29	-3,60	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	185,0	-23,50	-1,57	-4,39	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	198,0	-10,50	-0,70	-1,96	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	208,0	-0,50	-0,03	-0,09	
83	Redox incl.	186,0	-22,50	-1,51	-4,20	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	197,0	-11,50	-0,77	-2,15	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	201,0	-7,50	-0,50	-1,40	
102	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	6,50	0,44	1,21	
110	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	6,50	0,44	1,21	

5.17.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	13	192,07	12,61
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	191,76	3,94
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	187,21	8,84
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	182,00	
	Destillationsverfahren	33	189,90	9,60
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	16	206,13	10,71
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	216,50	12,03
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	196,67	13,05
Redox incl.	Elektrometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und Redoxelektrode incl. Reduktone	1	186,00	
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	22	204,98	12,17
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	7	196,16	8,45
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	189,00	
Redox excl.	Elektrometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und Redoxelektrode excl. Reduktone	1	181,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	9	193,68	9,48
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	3	213,78	36,44
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	191,55	4,70
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	30	191,57	15,98

5.17.5 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		jodometrisch, Reduktone	
	alle Daten	ber. Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	33	32	22	9
Minimalwert	150,0	171,0	185,0	181,0
Mittelwert	189,04	190,26	204,78	193,68
Median	190,00	190,50	208,50	193,00
Maximalwert	207,5	207,5	224,0	205,0
Standardabweichung (s _L)	11,119	8,770	11,160	8,355
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,936	1,550	2,379	2,785
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s _H)	13,800	13,831	14,934	13,985
Zielstandardabweichung experimentell (s _{exp herk.})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,81	0,63	0,75	0,60
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	2,08	1,64	2,08	1,56
Quotient (u _M /s _H)	0,14	0,11	0,16	0,20
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,36	0,29	0,44	0,52

