



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2020“

**Teil 2
Durchführung und Ergebnisse
der Untersuchung eines Weißweines FT20P02
und eines Roséweines FT20P03**

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 Prüfmateriale FT20P02 und FT20P03	9
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	13
3	Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT20P02 und FT20P03	13
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	17
4	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT20P02	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 für Vergärbare Zucker	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	FTIR-Laborergebnisse	51
4.8.3	Deskriptive Ergebnisse	53
4.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	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	FTIR-Laborergebnisse	59
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse	61
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	Herkömmliche und 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]	72
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	72
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	72
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	73
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse	74
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	74
4.15	Reduktone [mg/L]	77
4.15.1	Laborergebnisse	77
4.15.2	Angaben zu den Analyseverfahren	77
4.15.3	Deskriptive Ergebnisse	78
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	79
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	79
4.16.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)	80
4.16.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)	80
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	81
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	81

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	83
4.17.1	Laborergebnisse	83
4.17.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inclusive Reduktone)	84
4.17.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)	85
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	85
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	85
5	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P03	88
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	88
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	88
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	89
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse	90
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	90
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	92
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	92
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	93
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse	94
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	95
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	97
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	97
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	97
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse	98
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	99
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	100
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	100
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	101
5.4.3	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	102
5.4.4	Deskriptive Ergebnisse	103
5.4.5	Angaben zu den Analyseverfahren	104
5.5	Glucose [g/L]	106
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	106
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	106
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse	108
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	108
5.6	Fructose [g/L]	110
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	110
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	110
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse	112
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	112
5.7	Glycerin [g/L]	114
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	114
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse	114
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	114
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	115
5.8	pH-Wert	117
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	117
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	117
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	118
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse	119

5.9	Gesamtsäure [g/L]	121
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	121
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	122
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse	123
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	123
5.10	Weinsäure [g/L]	125
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	125
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	125
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse	127
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	127
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	129
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	129
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	129
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse	131
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	131
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	133
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	133
5.12.2	Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	133
5.12.3	Deskriptive Ergebnisse	134
5.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	134
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	136
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	136
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	136
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	137
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse	138
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	138
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	140
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	140
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	140
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	141
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse	142
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	142
5.15	Reduktone [mg/L]	144
5.15.1	Laborergebnisse	144
5.15.2	Angaben zu den Analyseverfahren	144
5.15.3	Deskriptive Ergebnisse	145
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	146
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	146
5.16.2	Laborergebnisse, (jodometrische Verfahren inclusive Reduktone)	147
5.16.3	Laborergebnisse, (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)	147
5.16.4	Deskriptive Ergebnisse	148
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	148
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	150
5.17.1	Laborergebnisse	150
5.17.2	Deskriptive Ergebnisse	151
5.17.3	Angaben zu den Analyseverfahren	152

1 Einleitung

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

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

Teil 1 des Berichtes behandelt neben Aspekten, die für die gesamte Laborvergleichsuntersuchung von Bedeutung sind, die Ergebnisse für das Prüfgut FT20P01. Der vorliegende Teil 2 dokumentiert die Ergebnisse der Untersuchungen der Prüfgüter FT20P02 und FT20P03. Teil 3 berichtet die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT20P04 und FT20P05. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 des Berichtes besprochen wurden. Daher wird gegebenenfalls auf Teil 1 verwiesen.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT20P02 bzw. FT20P03 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfgüter durch die teilnehmenden Laboratorien behandelt.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Das Prüfgut FT20P02 war ein 2018er spanischer Rotwein aus der Region La Mancha, der als Vertreter ausländischer Weine aus gewerblicher Herstellung stammte. Der als lose Ware erhaltene Wein wurde bis auf ein Nachschwefeln unverändert in 0,375 L-Sektflaschen gefüllt. Weitere Angaben siehe Teil 1, Abschnitt 2.1.2 des Berichtes über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Als Prüfgut FT20P03 wurde ein 2019er rheinhessischer Portugieser Weißherbst verwendet, der mit Süßreserve auf etwa 6 g/L Restzucker eingestellt und dessen Gesamtsäuregehalt durch Zusatz von 0,5 g/L Äpfelsäure auf 3,9 g/L erhöht wurde. Analytische Werte aus Voranalysen finden sich in Teil 1, Abschnitt 2.1.2 des Berichtes über diese Laborvergleichsuntersuchung.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P02

Konzentrationen in g/L außer Relative Dichte und pH-Wert; Freie und Gesamte Schweflige Säure in mg/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Rel. Dichte		Vorh. Alkohol		Glucose	Fructose	Verg. Zucker	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	G-Äpfel-säure	G-Milch-säure	Flüchtige Säure	Freie SO ₂	Gesamte SO ₂
		dens	FTIR	NIR	FTIR												
1	3	1,00647	1,00672	96,866	98,156	15,618	16,382	31,959	8,965	3,466	5,107	1,922	0,083	1,527	0,621	36	140
2	5	1,00653	1,00677	96,866	97,930	15,867	16,427	32,081	8,984	3,483	5,091	1,954	0,004	1,580	0,643	35	142
3	2	1,00650	1,00675	96,866	97,944	15,527	16,420	32,266	9,103	3,473	5,113	1,950	-0,015	1,534	0,635	35	143
4	12	1,00650	1,00673	96,866	97,907	16,086	16,341	32,253	8,964	3,494	5,116	1,938	0,028	1,553	0,646	37	141
5	10	1,00651	1,00678	96,866	97,862	15,622	16,406	32,183	9,243	3,486	5,090	1,981	-0,019	1,589	0,670	37	138
6	7	1,00652	1,00681	96,866	97,907	16,021	16,393	32,145	9,091	3,492	5,098	1,942	0,060	1,533	0,650	37	138
7	14	1,00651	1,00675	96,787	97,907	16,007	16,369	32,005	8,955	3,499	5,089	1,921	-0,030	1,572	0,655	38	138
8	4	1,00655	1,00675	96,866	98,036	15,980	16,295	32,204	8,913	3,487	5,099	1,952	-0,023	1,522	0,659	38	140
9	16	1,00646	1,00671	96,787	97,605	15,832	16,393	31,675	8,846	3,474	5,085	1,948	-0,067	1,589	0,642	37	138
10	13	1,00651	1,00677	96,787	97,908	16,198	16,336	32,262	9,023	3,492	5,105	1,946	0,021	1,601	0,666	37	140
11	6	1,00655	1,00678	96,866	97,947	16,083	16,322	32,368	8,826	3,499	5,090	1,927	-0,038	1,547	0,651	36	142
12	9	1,00656	1,00679	96,866	97,954	16,211	16,358	32,233	9,005	3,491	5,097	1,958	0,014	1,584	0,654	36	141
13	14	1,00650	1,00675	96,787	97,873	16,198	16,241	32,026	9,016	3,491	5,097	1,940	-0,006	1,584	0,668	37	137
14	9	1,00654	1,00675	96,866	97,785	15,849	16,305	31,839	8,873	3,488	5,081	1,973	-0,009	1,562	0,662	35	141
15	13	1,00648	1,00679	96,787	97,870	15,842	16,299	32,113	9,015	3,491	5,102	1,922	0,058	1,563	0,639	35	137
16	5	1,00627	1,00679	96,945	98,199	15,776	16,515	32,158	9,088	3,500	5,123	1,902	0,004	1,517	0,655	33	140
17	10	1,00650	1,00670	96,866	97,959	15,829	16,381	32,117	9,069	3,490	5,101	1,945	0,013	1,495	0,640	33	134
18	6	1,00502	1,00693	96,866	96,941	16,848	15,455	31,669	9,093	3,508	5,106	1,785	-0,133	2,134	0,798	35	134
19	7	1,00655	1,00678	96,866	98,083	15,678	16,333	32,319	9,068	3,489	5,083	1,968	0,051	1,531	0,636	34	141
20	12	1,00655	1,00676	96,866	97,851	16,074	16,344	32,108	9,046	3,481	5,101	1,941	0,099	1,598	0,642	34	139
21	2	1,00652	1,00667	96,866	97,807	16,140	16,313	32,250	9,002	3,484	5,090	1,947	-0,051	1,584	0,656	34	140
22	4	1,00655	1,00680	96,866	98,033	15,620	16,386	32,222	9,099	3,490	5,095	1,943	0,023	1,594	0,636	36	136
23	16	1,00647	1,00673	96,787	97,956	15,579	16,418	31,997	8,975	3,486	5,111	1,953	0,062	1,556	0,643	34	133
24	3	1,00648	1,00683	96,787	97,723	16,216	16,390	32,209	8,991	3,501	5,088	1,960	-0,011	1,592	0,682	35	136

Mitteilung des Labors: Die Messung unter der laufenden Nummer 18 unterlagen einer Störung.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT20P02 und FT20P03

Eine Prüfung auf Homogenität wurde mit beiden Proben durchgeführt.

Vom Prüfgut **FT20P02** wurden 235 0,375 L-Sektflaschen gefüllt. Während der Füllung wurde jede 17. Flasche, insgesamt 16 Flaschen als Basis für die Homogenitätsprüfung entnommen und aufsteigend nummeriert. Mittels Zufallsgenerator wurden daraus 12 Flaschen für die Homogenitätsprüfung ausgewählt. Aus jeder Probe wurden 2 Serien von Messproben erstellt, die jeweils zweimal unter Wiederholbedingungen untersucht wurden. Für die Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. An den Proben der ersten Doppelserie wurden die Relative Dichte mit dem Biegeschwinger und der Vorhandene Alkohol mittels Nahinfrarotspektroskopie sowie mittels FTIR Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure, pH-Wert, Glucose, Fructose, Vergärbare Zucker, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtige Säure bestimmt. An der zweiten Doppelserie wurden mittels automatisierter colorimetrischer Bestimmung Freie und Gesamte Schweflige Säure bestimmt. Die Messergebnisse sind in Tabelle 1 enthalten.

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT20P02** wurden wie in Teil 1 beschrieben graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen und auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge bzw. Probenfolge geprüft. Nahezu alle Messergebnisse an der Probe-Nummer 6 zeigten bei der Wiederholung der Messung unter der laufenden Nummer 18 in den Graphiken eine deutliche Abweichung der Messergebnisse von den unauffälligen Werten bei der ersten Messung dieser Probe und allen anderen Messergebnissen. Nur für die Messergebnisse der Schwefligen Säure ergaben sich signifikante Korrelationen zur Messreihenfolge. Eine nähere Betrachtung der Graphiken zeigte, dass diese überwiegend auf einen Offset zwischen den beiden Messreihen beruht. Diese Beobachtungen werden bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden Varianzanalyse berücksichtigt, sofern sie geeignet sind, deren Aussagekraft zu beeinträchtigen oder die Ergebnisse der Varianzanalyse eine Inhomogenität des Prüfgutes aufzeigen.

Die Ergebnisse der Varianzanalyse in der Tabelle 2 zeigen nur für den Parameter Vorhandener Alkohol bei der Messung im NIR signifikante Unterschiede zwischen den Proben. Diese Signifikanz ist vor allem durch die sehr geringe Wiederholstandardabweichung bedingt. Mit dieser Ausnahme ist die Homogenität nachgewiesen, sofern der Quotient s_r/s_{Ziel} aus der Wiederholstandardabweichung (Fehler s_r) und der Zielstandardabweichung (s_{Ziel}) unter dem einzuhaltenen Wert von 0,5 liegt. Eine Überschreitung dieses Höchstwertes ist bei Ausschluss der offensichtlich fehlerhaften Messungen unter der laufenden Nummer 18 nur für die Parameter Glucose und Äpfelsäure gegeben, wobei die Überschreitung bei Glucose nur formaler Natur ist und der Gehalt an Gesamter Äpfelsäure unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens liegt. Aus diesen Gründen sind diese Befunde für die Entscheidung über die Homogenität des Prüfgutes unerheblich. Auch die Werte des bei einer nachgewiesenen Inhomogenität zu beachtenden Quotienten s_{Pr}/s_{Ziel} sowie die Forderung, dass die Standardabweichung der Proben s_{Pr} unterhalb des nach Fearn und Thompson ermittelten maximal tolerierbaren Wertes (s , letzte

Spalte der Tabelle 2) liegen muss, sind eingehalten. Damit ist von einer für die Laborvergleichsuntersuchung ausreichenden Homogenität des Prüfgutes auszugehen.

Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT20P02

	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, densitometr.	1,006442	24	0,8844	0,5772	0,000317		0,000132	2,403		0,000299
- ohne Lfd. Nr. 18	1,006503	23	1,0936	0,4423	0,000058	0,000013	0,000132	0,437	0,097	0,000075
Rel. Dichte, FTIR	1,006766	24	1,2776	0,3391	0,000048	0,000018	0,000132	0,361	0,134	0,000069
- ohne Lfd. Nr. 18	1,006759	23	0,9489	0,5339	0,000038		0,000132	0,289		0,000064
Vorh. Alkohol NIR	96,85	24	6,0000	0,0022	0,0228	0,0361	0,535	0,043	0,067	0,2157
Vorh. Alkohol FTIR	97,88	24	0,8088	0,6339	0,249		0,535	0,466		0,3152
- ohne Lfd. Nr. 18	97,92	23	0,5704	0,8171	0,147		0,535	0,275		0,2543
Glucose FTIR	15,95	24	1,0845	0,4431	0,287	0,0590	0,473	0,606	0,125	0,3267
- ohne Lfd. Nr. 18	15,91	23	0,6119	0,7860	0,251		0,472	0,532		0,3003
Fructose FTIR	16,33	24	1,2524	0,3513	0,183	0,0650	0,484	0,379	0,134	0,2578
- ohne Lfd. Nr. 18	16,36	23	1,7469	0,1844	0,0491	0,0307	0,485	0,101	0,063	0,1997
Vergärbare Zucker FTIR	32,11	24	0,7733	0,6613	0,193		0,910	0,212		0,4066
- ohne Lfd. Nr. 18	32,13	23	1,7612	0,1810	0,136	0,0857	0,910	0,149	0,094	0,3864
Glycerin	9,011	24	1,0291	0,4776	0,0920	0,0111	9,011	0,010	0,001	3,6162
pH-Wert, FTIR	3,489	24	0,9929	0,5013	0,0094		0,0476	0,198		0,0210
Gesamtsäure, FTIR	5,098	24	0,4672	0,8910	0,0125		0,107	0,117		0,0445
Weinsäure, FTIR	1,938	24	1,4140	0,2800	0,0339	0,0154	0,0992	0,341	0,155	0,0507
- ohne Lfd. Nr. 18	1,945	23	0,9297	0,5470	0,0183		0,0995	0,184		0,0434
Äpfelsäure, FTIR *)	0,0109	23	1,1487	0,4111	0,0413	0,0115	0,018	2,272	0,633	0,0390
Milchsäure, FTIR *)	1,561	23	0,3595	0,9479	0,0369		0,0826	0,446		0,0476
Flüchtige Säure, FTIR *	0,6500	23	0,2310	0,9888	0,0177		0,0392	0,452		0,0227
Freie SO ₂ , colorimetr.	35,58	24	0,7212	0,7022	1,58		3,33	0,475		1,9817
Gesamte SO ₂ , wie vor	138,71	24	1,0399	0,4707	2,68	0,379	5,357	0,501	0,071	3,2877

*) Die Messergebnisse für diese Parameter wurden ohne die laufende Nummer 18 ausgewertet.

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

Von dem Prüfgut **FT20P03** wurden insgesamt 355 0,33 L-Flaschen gefüllt. Die Ziehung von 21 Proben während der Füllung, die Zufallsauswahl von 12 Proben für die Homogenitätsprüfung und die analytischen Untersuchungen erfolgten wie bei dem Prüfgut FT20P02. Zusätzlich wurde jedoch eine automatisierte enzymatische Bestimmung der L-Äpfelsäure durchgeführt, da bei diesem Parameter die Wiederholstreuung des FTIR-Verfahrens häufig zu hoch ausfällt. Alle Messergebnisse sind in Tabelle 3 und Tabelle 4 zusammengestellt.

Tabelle 3: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P03

Teil 1: Maßeinheit (außer Relative Dichte): g/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Rel. Dichte		Vorh. Alkohol		Glucose	Fructose	verg. Zucker		Glycerin
		dens.	FTIR	NIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR
1	9	0,99421	0,99419	87,629	88,261	3,433	2,884	6,771	5,881	
2	18	0,99425	0,99413	87,550	88,244	3,199	2,878	6,792	5,853	
3	21	0,99423	0,99415	87,550	88,067	3,283	2,898	6,698	5,776	
4	7	0,99427	0,99416	87,550	88,183	3,399	2,756	6,670	5,851	
5	13	0,99425	0,99417	87,550	88,191	3,311	2,818	6,840	5,875	
6	15	0,99427	0,99420	87,550	87,983	3,488	2,902	6,602	5,740	
7	14	0,99421	0,99414	87,550	87,975	3,259	2,802	6,647	5,877	
8	17	0,99402	0,99416	87,471	88,208	3,208	2,870	6,707	5,881	
9	12	0,99426	0,99417	87,471	88,026	3,324	2,961	6,633	5,768	
10	4	0,99427	0,99420	87,471	88,095	3,252	3,127	6,885	5,848	
11	3	0,99393	0,99421	87,471	88,286	3,289	2,871	6,704	5,894	
12	11	0,99427	0,99423	87,471	88,022	3,358	2,994	6,646	5,880	
13	3	0,99427	0,99422	87,629	88,376	3,147	2,980	6,735	5,811	
14	18	0,99425	0,99408	87,550	88,358	2,854	2,886	6,718	5,856	
15	9	0,99423	0,99412	87,550	88,303	3,359	3,002	7,006	5,833	
16	17	0,99388	0,99421	87,550	88,027	3,414	2,820	6,748	5,855	
17	14	0,99421	0,99421	87,629	88,318	3,209	2,956	6,780	5,921	
18	13	0,99419	0,99418	87,550	88,418	3,431	3,030	6,812	5,875	
19	15	0,99424	0,99415	87,550	88,386	3,090	2,944	6,741	5,898	
20	11	0,99424	0,99416	87,550	88,221	2,917	3,576	7,054	5,756	
21	12	0,99421	0,99416	87,550	88,263	3,465	2,966	6,823	5,941	
22	21	0,99423	0,99412	87,550	88,335	3,285	2,950	6,854	5,874	
23	4	0,99424	0,99418	87,629	88,145	3,129	2,849	6,644	5,823	
24	7	0,99424	0,99418	87,550	88,365	3,358	3,006	6,773	5,861	

Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT20P03

Teil 2: Maßeinheit (außer pH-Wert): g/L ; Freie und Gesamte Schweflige Säure: mg/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	pH-Wert	Gesamt-säure	Weinsäure	Gesamte Äpfelsäure		Gesamte Milchsäure	Flüchtige Säure		Freie SO ₂	Gesamte SO ₂
		FTIR	FTIR	FTIR	enz.	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	color.	color.
1	9	3,390	3,898	1,615	0,714	0,463	1,485	0,499	54	103	
2	18	3,371	3,883	1,634	0,678	0,424	1,346	0,470	54	99	
3	21	3,375	3,912	1,617	0,670	0,501	1,369	0,456	54	98	
4	7	3,372	3,909	1,660	0,673	0,488	1,441	0,484	53	98	
5	13	3,379	3,896	1,607	0,675	0,410	1,450	0,475	53	97	
6	15	3,387	3,906	1,629	0,684	0,484	1,445	0,490	52	96	
7	14	3,375	3,897	1,671	0,671	0,451	1,413	0,488	54	97	
8	17	3,381	3,911	1,643	0,659	0,460	1,388	0,465	53	96	
9	12	3,365	3,923	1,603	0,654	0,494	1,437	0,460	53	97	
10	4	3,371	3,940	1,617	0,663	0,487	1,425	0,470	52	100	
11	3	3,373	3,922	1,625	0,666	0,500	1,364	0,475	52	96	
12	11	3,367	3,900	1,643	0,686	0,473	1,424	0,469	52	96	
13	3	3,365	3,919	1,605	0,664	0,502	1,398	0,457	53	98	
14	18	3,381	3,898	1,572	0,664	0,508	1,412	0,467	53	97	
15	9	3,380	3,910	1,614	0,673	0,535	1,429	0,472	53	97	
16	17	3,380	3,889	1,678	0,668	0,489	1,491	0,478	53	97	
17	14	3,378	3,909	1,588	0,679	0,459	1,369	0,464	52	97	
18	13	3,369	3,907	1,616	0,687	0,492	1,408	0,464	52	96	
19	15	3,361	3,914	1,626	0,680	0,498	1,411	0,460	52	98	
20	11	3,365	3,982	1,515	0,670	0,522	1,237	0,424	52	95	
21	12	3,377	3,904	1,607	0,672	0,523	1,447	0,491	51	96	
22	21	3,380	3,915	1,544	0,672	0,504	1,355	0,459	52	93	
23	4	3,368	3,910	1,618	0,681	0,507	1,431	0,465	51	93	
24	7	3,379	3,898	1,573	0,685	0,515	1,396	0,467	52	95	

Mit den Messergebnissen des Prüfgutes **FT20P03** wurde ebenso verfahren wie bei dem Prüfgut FT20P02. Die graphischen Auswertungen zeigten, wie regelmäßig beobachtet, abweichende einzelne Messergebnisse, bei denen die zweite Messung im zentralen Bereich der Streuung liegt. Ähnlich wie bei dem Prüfgut FT20P02 traten derartige Abweichungen bei einer Messprobe, hier mit der laufenden Nummer 20 gehäuft auf. Bei den densitometrischen Mess-

ergebnissen der Relativen Dichte traten drei abweichende Messergebnisse auf, von denen zwei auf die Probe-Nummer 17 entfielen. Allerdings wurden bei den mittels FTIR erhaltenen Messergebnissen diese Abweichungen nicht bestätigt. Signifikante Korrelationen der Messergebnisse zur laufenden Messnummer traten bei den FTIR-Messergebnissen für Gesamte Äpfelsäure, Flüchtige Säure und den Parametern Freie und Gesamte Schweflige Säure auf. Korrelationen zur Probennummer ergaben sich nicht.

Wie die Tabelle 5 mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse aufzeigt, ist nur bei den densitometrischen Messergebnissen des Parameters Relative Dichte ein signifikanter Unterschied zwischen den Proben und damit eine Inhomogenität nachweisbar. Die Ergebnisse der Varianzanalyse sind gültig, soweit der Wert für s_r/s_z nicht über 0,5 liegt. Die Forderung ist für Glucose und Fructose auch nach Elimination der auffälligen Messergebnisse und die FTIR-Messergebnisse für Äpfelsäure nicht erfüllt, während die Elimination der auffälligen Messergebnisse bei den Parametern Vergärbare Zucker, Milchsäure und Flüchtige Säure zur Erfüllung der Bedingung führte. Auf eine Korrektur der Korrelation der FTIR-Äpfelsäurewerte zur Messfolge wurde verzichtet, weil die Ergebnisse der enzymatischen Bestimmung keine Korrelation zur Messfolge zeigten. Bei vorsichtiger Interpretation tragen die Messergebnisse für Glucose und Fructose nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei, widersprechen ihr aber nicht. Für die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure führen die beobachteten Korrelationen nicht zu einer Überschreitung des Höchstwertes für den Quotienten s_r/s_z und beeinträchtigen daher das unauffällige Ergebnis der Varianzanalyse nicht.

Tabelle 5: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT20P03

	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 dens.	0,994203	24	2,7036	0,0508	0,000078	0,000072	0,000132	0,589	0,544	0,000089
ohne Lfd.Nr.11	0,994215	23	10,783	0,0002	0,000037	0,000083	0,000132	0,278	0,629	0,000063
wie vor + Pr.Nr. 17	0,994240	21	1,2970	0,3444	0,000022	0,000009	0,000132	0,170	0,067	0,000058
- FTIR	0,994170	24	1,6319	0,2063	0,000032	0,000018	0,000132	0,241	0,135	0,000061
Vorh. Alkohol NIR	87,55	24	0,4126	0,9233	0,0581		0,535	0,109		0,2213
- FTIR	88,21	24	0,5519	0,8329	0,157		0,535	0,293		0,2592
Glucose, FTIR	3,269	24	1,0494	0,4647	0,157	0,0247	0,131	1,199	0,188	0,1549
ohne Lfd.Nr. 14 + 20	3,304	22	0,7727	0,6619	0,118		0,132	0,896		0,1218
Fructose, FTIR	2,947	24	1,0677	0,4533	0,155	0,0286	0,122	1,269	0,233	0,1522
ohne Lfd.Nr. 20	2,920	23	0,3336	0,9590	0,105		0,122	0,860		0,1086
Verg. Zucker, FTIR	6,762	24	0,4887	0,8771	0,129		0,225	0,570		0,1496
ohne Lfd.Nr. 20	6,749	23	0,7208	0,7018	0,102		0,225	0,454		0,1309
Glycerin, FTIR	5,851	24	0,2968	0,9734	0,0621		0,254	0,245		0,1169
pH-Wert FTIR	3,375	24	1,0312	0,4762	0,0073	0,0009	0,0476	0,153	0,019	0,0203
Gesamtsäure FTIR	3,911	24	0,9366	0,5397	0,0197		0,107	0,184		0,0466
Weinsäure FTIR	1,613	24	0,5388	0,8424	0,0417		0,0849	0,491		0,0515
Äpfelsäure, enzymat.	0,6745	24	1,1677	0,3952	0,01	0,0034	0,035	0,332	0,096	0,0177
- FTIR	0,4870	24	0,7846	0,6525	0,0319		0,030	1,054		0,0320
Milchsäure FTIR	1,407	24	1,1273	0,4178	0,0506	0,0128	0,0756	0,669	0,169	0,0558
ohne Lfd.Nr. 20	1,415	23	1,4378	0,2786	0,0347	0,0166	0,0759	0,457	0,218	0,0443
Flüchtige Säure FTIR	0,4695	24	0,7784	0,6574	0,0160		0,0286	0,560		0,0187
ohne Lfd.Nr. 20	0,4715	23	0,5047	0,8639	0,0137		0,0286	0,479		0,0171
Freie SO ₂	52,58	24	1,0707	0,4515	0,866	0,163	4,63	0,187	0,035	2,025
Gesamte SO ₂	96,88	24	0,5030	0,8674	2,37		5,357	0,443		3,074

Zusammenfassend ist festzustellen, dass auch das Prüfgut FT20P03 nach den Ergebnissen der Homogenitätsprüfung uneingeschränkt für die Laborvergleichsuntersuchung geeignet ist.

2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

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

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

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT20P02 und FT20P03

3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT20P02 wird durch die in Tabelle 6 und für das Prüfgut FT20P03 durch die in Tabelle 7 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter belegt. In beiden Tabellen wird wie in Teil 1 das Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden dargestellt. Auf den Teil 1 wird auch hinsichtlich der Bedeutung der zur Bewertung des Gesamtergebnisses herangezogenen Größen und der Regeln zu ihrer Interpretation Bezug genommen. Eine Betrachtung des Gesamtergebnisses der FTIR-Messungen auf der Basis der Vergleichsstandardabweichungen dieses Verfahrens erfolgt im Abschnitt 3.2.

Zu dem **Prüfgut FT20P02** wurden für den Parameter Gesamte Äpfelsäure insgesamt nur 8 Laborergebnisse, davon die Hälfte als unter Bestimmungsgrenze liegend mitgeteilt. Daher wurde für diesen Parameter keine Auswertung durchgeführt. Grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte traten nur bei 2 Datengruppen, den Reduktionen und der L-Äpfelsäure auf. Dieser Befund ist bei dem erstgenannten Parameter häufig zu beobachten. Der Höchstanteil von 22,2 % ausgeschlossener Laborergebnisse für die Ermittlung von gültigen Z-Scores ist noch nicht erreicht. Bei dem Parameter L-Äpfelsäure, zu dem zwei Teilnehmer ein Unterschreiten der Bestimmungsgrenze mitgeteilt haben, liegt der Gehalt an der Untergrenze der Anwendbarkeit der enzymatischen Bestimmungsmethode, womit ein erhöhter Anteil an Fehlergebnissen zu erwarten ist. Im Übrigen kam es bei 17 der 26 – und damit der überwiegenden Anzahl – der Datengruppen zu keinem Ergebnisausschluss.

Tabelle 6: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT20P02

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	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	55	53	1,00664	1,00660	0,000098	0,000013			0,000132	0,000190		0,74	0,52	0,10	0,07
Vorhandener Alkohol [g/L]	24	24	96,79	96,89	0,628	0,128	2,753		0,535	0,886	0,23	1,17	0,71	0,24	0,14
Gesamtextrakt [g/L]	49	49	59,00	59,00	0,483	0,0691	1,807		0,594		0,27	0,81		0,12	
Vergärbare Zucker [g/L]	38	38	30,93	30,85	0,899	0,146	1,042		0,876		0,86	1,03		0,17	
Glucose [g/L]	40	40	15,07	15,08	0,313	0,0494	0,567		0,450		0,55	0,69		0,11	
Fructose [g/L]	38	37	15,74	15,78	0,483	0,0794	0,589		0,469		0,82	1,03		0,17	
Glycerin [g/L]	20	20	8,357	8,328	0,460	0,1028	0,342			0,348	1,34		1,32	0,30	0,30
pH-Wert	45	45	3,545	3,550	0,0707	0,0105			0,0476	0,0493		1,48	1,43	0,22	0,21
Gesamtsäure [g/L]	49	49	4,974	4,960	0,127	0,0181	0,220		0,107	0,145	0,58	1,18	0,87	0,17	0,12
Weinsäure [g/L], - HPLC + IC	10	10	2,369	2,345	0,265	0,0838	0,117			0,227		2,27	1,17	0,72	0,37
-alle herk. Verfahren, Z _{Max} = 5,0	30	29	2,405	2,370	0,244	0,0453	0,118			0,227		2,07	1,07	0,38	0,20
-alle herk. Verfahren, Z _{Max} = 4,5	30	27	2,368	2,350	0,208	0,0401	0,117			0,227		1,78	0,92	0,34	0,18
Flüchtige Säure [g/L]	21	21	0,4764	0,4900	0,0550	0,0120	0,0309		0,0286	0,089	1,78	1,93	0,62	0,42	0,13
Acetat als Essigsäure [g/L]	25	24	0,3991	0,4040	0,0464	0,0095	0,0262				1,77			0,36	
L-Äpfelsäure [g/L]	28 (2)	28	0,1234	0,1200	0,0365	0,0069	0,0093		0,0209		3,91	1,74		0,33	
Gesamte Milchsäure [g/L] - herk. Verfahren	16	15	1,645	1,620	0,157	0,0405	0,0852			0,209	1,84		0,75	0,48	0,19
- herk. Verfahren + ¹ H-NMR	22	21	1,612	1,553	0,146	0,0318	0,0822			0,209	1,77		0,70	0,39	0,15
L-Milchsäure [g/L]	31	31	1,343	1,340	0,103	0,0185	0,0725		0,0774		1,42	1,33		0,24	
Reduktone [mg/L]	36 (8)	36	14,90	15,00	3,95	0,658	1,60				2,47			0,41	
Freie Schweflige Säure [mg/L] Destillationsverfahren	10	10	37,80	37,30	3,25	1,03	3,46				0,94			0,30	
Destillation + Photometrie	22	22	34,51	35,65	5,41	1,15	3,33				1,62			0,35	
- jodometrisch incl. Reduktone	28	28	41,14	40,00	4,75	0,90	3,67				1,29			0,24	
- jodometrisch excl. Reduktone	13	13	30,16	27,50	6,51	1,81	2,67		3,67		2,44	1,77		0,49	
Gesamte Schweflige Säure [mg/L] - Destillationsverfahren	33	33	112,10	112,50	6,27	1,09	8,84		5,36	8,84	0,71	1,17	0,71	0,20	0,12
- jodometr. incl. Reduktone	19	19	119,48	120,00	7,82	1,79	9,34		5,36		0,84	1,46		0,34	
- jodometr. excl. Reduktone	22	22	104,94	106,50	7,60	1,62	8,44		5,36		0,90	1,42		0,30	

Erläuterungen zur Tabelle 6 und zur Tabelle 7:**Labor-Stdabw. (s_L)** = Standardabweichung der Ergebniswerte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz (s_H)** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. herk. (s_{exp})** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (in der Regel aus der OIV-Methodensammlung)**Zielstdabw. exp. FTIR (s_{FTIR})** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Berücksichtigung von Matrixeffekten**Quotient (s_L/s_H)** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient (s_L/s_{exp})** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten (s_{exp})**Quotient (s_L/s_{FTIR})** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient (u_M/s_{Ziel})** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden**Quotient (u_M/s_{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 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.

Die für den Gesamterfolg maßgeblichen Quotienten s_L/s_{Ziel} lagen bei 15 Datengruppen unter dem Richtwert 1,5. Dieser wurde bei den 8 Datengruppen mit Werten zwischen 1,6 und 1,9 mäßig überschritten. Betroffen waren die Parameter Weinsäure, Flüchtige Säure, Acetat, L-Äpfelsäure, Gesamte Milchsäure und zwei Datengruppen zum Parameter Freie Schweflige Säure. Mit Ausnahme des Parameters L-Äpfelsäure war zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes mäßig eingeschränkt. Bei den Parametern Flüchtige Säure, Acetat und Gesamte Milchsäure werden erhöhte Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} häufiger beobachtet. Die Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} überschritten den Höchstwert 2,0 bei zugleich eingeschränkter Zuverlässigkeit des Bezugswertes bei zwei Auswertungsvarianten des Parameters Weinsäure. Erst nach Ausschluss zweier Laborergebnisse, deren Z-Score knapp unter 5 lag, wurde ein Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} unter 2,0 erhalten. Für den Parameter **Reduktone** konnten wegen der Überschreitung des Höchstwertes für den Quotienten s_L/s_{Ziel} **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden. Für **alle anderen Parameter** sind die erhaltenen **Z-Scores aussagekräftig**. Prüfgutübergreifend wurden die Ergebnisse für die auffälligen Parameter bereits in Teil 1 des Berichtes dargestellt und diskutiert.

Bei dem Prüfgut **FT20P03** war in der Auswertung bei 16 von 26 Wertegruppen kein Laborergebnis auszuschließen. Bei den verbleibenden 10 Wertegruppen waren in 6 Fällen insgesamt 10 grob fehlerhafte Werte auszuschließen, von denen jeweils 2 auf 2 unterschiedliche Auswertungsvarianten für den Parameter Flüchtige Säure und 3 auf den Parameter **Reduktone** entfielen. Bei allen Parametern wurde somit die Voraussetzung erfüllt, dass für die Ermittlung gültiger Z-Scores höchstens 22,2 % der Laborergebnisse ausgeschlossen werden dürfen.

Mit 20 Wertegruppen lag bei drei Vierteln der Wertegruppen der Quotient s_L/s_{Ziel} im unauffälligen Bereich bis zu 1,5. Bei vier Wertegruppen war der Quotient mäßig auf einen Betrag von rund 1,6 bis 1,9 erhöht und bei zwei Wertegruppen zugleich die Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel} 0,4) mäßig eingeschränkt. Eine mäßig eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes ergab sich wegen der geringen Ergebnisanzahl bei unauffälligem Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} auch für die die Acetatbestimmung mit anderen Methoden als der automatisierten enzymatischen Bestimmung und für den Parameter Gesamte Äpfelsäure. Der Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} überschritt den Höchstwert 2,0 bei zugleich eingeschränkter Zuverlässigkeit des Bezugswertes bei Auswertung des Parametes Flüchtige Säure mit eine absoluten Höchstwert des Z-Scores von 5. Erst nach Ausschluss eines weiteren Laborergebnisses, dessen Z-Score 4,9 betrug, wurde ein Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} unter 2,0 bei weiterhin mäßiger Einschränkung der Zuverlässigkeit des Bezugswertes erhalten. Nur bei dem Parameter **Reduktone** wurde der Höchstwert 2,0 des Quotienten s_L/s_{Ziel} überschritten. Wegen der hohen Anzahl an Ergebnissen war zwar eine hinreichende Sicherheit des Bezugswertes noch gegeben, dennoch war **keine gültige Bewertung** der Laborleistung durch **Z-Scores** möglich. Bei zusammenfassender Betrachtung wurden mit nur einer Ausnahme **gültige Z-Scores** erhalten.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Roseweinprüfgut FT20P03

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. SL	Labor-Stdfehler UM	Zielstandardabweichung			Quotienten					
							n. Horwitz SH	exp. herk. S _{exp}	exp. FTIR SÜ FTIR	SL/SH	SL/S _{exp}	SL/SÜ FTIR	UM/SZiel	UM/SÜ FTIR	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	57	55	0,99433	0,99431	0,000101	0,000014			0,000132	0,000190		0,76	0,531	0,10	0,07
Vorhandener Alkohol [g/L]	25	25	86,93	87,11	0,714	0,143	2,516	0,535	0,886	0,28	1,34	0,806	0,27	0,16	
Gesamtextrakt [g/L]	50	50	23,46	23,40	0,460	0,0650	0,824	0,594		0,56	0,77		0,11		
Vergärbare Zucker [g/L]	34	34	6,667	6,645	0,203	0,0348	0,283	0,222	0,584	0,72	0,91	0,347	0,16	0,06	
Glucose [g/L]	36	36	3,316	3,324	0,106	0,0176	0,157	0,133	0,408	0,67	0,80	0,259	0,13	0,04	
Fructose [g/L]	36	36	3,355	3,330	0,157	0,0261	0,157	0,133	0,330	1,00	1,18	0,474	0,20	0,08	
Glycerin [g/L]	20	20	5,527	5,500	0,201	0,0448	0,241		0,348	0,83		0,576	0,19	0,13	
pH-Wert	44	44	3,585	3,600	0,0714	0,0108			0,0476	0,0493		1,50	1,449	0,23	0,22
Gesamtsäure [g/L]	49 (1)	48	4,065	4,055	0,128	0,0185	0,186	0,107	0,145	0,69	1,20	0,885	0,17	0,13	
Weinsäure [g/L]															
- HPLC	10	10	1,739	1,754	0,0791	0,0250	0,0912			0,227	0,87		0,348	0,27	0,11
- alle herkömmlichen Verfahren	29 (1)	29	1,828	1,790	0,144	0,0268	0,0928			0,227	1,56		0,636	0,29	0,12
Flüchtige Säure [g/L], z _{Max} = 5,0	18 (2)	18	0,3065	0,3053	0,0587	0,0138	0,0206		0,0286	0,0891	2,84	2,05	0,659	0,48	0,16
z _{Max} = 4,5	18 (2)	17	0,2987	0,3000	0,0498	0,0121	0,0203		0,0286	0,0891	2,45	1,74	0,559	0,42	0,14
Acetat als Essigsäure [g/L]															
- enzymatisch, automatisiert	23	23	0,2673	0,2600	0,0338	0,0071	0,0180				1,88			0,39	
- sonstige Verfahren ohne FTIR	9	9	0,2212	0,2290	0,0213	0,0071	0,0162				1,32			0,44	
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	9	8	0,7093	0,7245	0,0491	0,0174	0,0430		0,0363	0,218	1,14	1,35	0,225	0,48	0,08
L-Äpfelsäure [g/L]	34 (1)	34	0,7000	0,7000	0,0571	0,0098	0,0418		0,0357		1,37	1,60		0,27	
Gesamte Milchsäure [g/L]	17	16	1,962	1,945	0,114	0,0286	0,0995			0,209	1,15		0,548	0,29	0,14
L-Milchsäure [g/L]	34	34	1,698	1,686	0,0968	0,0166	0,0882		0,0928		1,10	1,04		0,18	
Reduktone [mg/L]	43 (3)	43	16,21	16,00	3,49	0,532	1,69				2,07			0,32	
Freie Schweflige Säure [mg/L]															
- Destillation + Photometrie	21	21	46,51	46,30	3,66	0,800	4,16				0,88			0,19	
- jodometr. incl. Reduktone	28	28	58,85	60,00	4,67	0,882	5,18				0,90			0,17	
- jodometr. excl. Reduktone	15	15	46,00	44,00	6,38	1,65	3,98		5,18		1,60	1,23		0,32	
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]															
- Destillationsverfahren	33	32	83,17	83,50	5,18	0,916	6,86		5,36		0,75	0,97		0,17	
- jodometr. incl. Reduktone	18	18	96,98	95,50	7,34	1,73	7,69		5,36		0,95	1,37		0,32	
- jodometr. excl. Reduktone	9	9	92,50	91,00	5,09	1,70	7,38		5,36		0,69	0,95		0,32	

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

3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 begründet, wurden auch für die Prüfgüter FT20P02 und FT20P03 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unter Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung der Laborergebnisse durch ein robustes Verfahren unterzogen. Hierbei werden vor allem die Standardabweichungen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens (s_{FTIR}) als Zielstandardabweichungen und Maßstab einer möglichen Übereinstimmung der FTIR-Laborergebnisse verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT20P02 in der Tabelle 8 und für das Prüfgut FT20P03 in der Tabelle 9 zusammengefasst.

Wie bereits in Teil 1 des Berichtes für das Prüfgut FT20P01 angesprochen, weisen auch bei den Prüfgütern **FT20P02** und **FT20P03** die Messergebnisse für fast alle Parameter bei Verwendung der Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens als Zielstandardabweichung (Leistungskriterium) **erhöhte Quotienten s_L/s_{FTIR}** auf. Dies dürfte vor allem auf den Einsatz unterschiedlicher Kalibrierungen zurückzuführen sein, weil bei einheitlicher Kalibrierung Matrixeffekte für den Vergleich von FTIR-Ergebnissen untereinander nicht zur Streuung zwischen den Laboratorien beitragen. Insoweit zeigt auch dieser Befund eine mangelhafte Nutzung der Möglichkeiten des Verfahrens an.

Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut FT20P02

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. (s _L)	Zielstdabw n. Horwitz (s _H)	Zielstdabw exp. FTIR (s _{FTIR})	Quotient s _L /s _H	Quotient s _L /s _{FTIR}	Quotient u _M /s _{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	83	1,00687	1,006870	0,000353		0,000146		2,42	0,27
Vorhandener Alkohol [g/L]	84	96,998	96,990	0,966	2,756	0,739	0,35	1,31	0,14
Gesamtextrakt [g/L]	36	59,492	59,680	0,914	1,824	0,415	0,50	2,20	0,37
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	82	31,722	31,700	1,062	1,066	0,354	1,00	3,00	0,33
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	80	31,490	31,355	1,224	1,056	0,354	1,16	3,46	0,39
Glucose [g/L]	80	15,359	15,315	0,703	0,575	0,288	1,22	2,44	0,27
Fructose [g/L]	80	16,096	16,000	0,918	0,596	0,222	1,54	4,14	0,46
Glycerin [g/L]	71	8,322	8,290	0,546	0,341	0,265	1,60	2,06	0,24
pH-Wert	80	3,548	3,550	0,060		0,0188		3,17	0,35
Gesamtsäure [g/L]	85	5,106	5,130	0,241	0,227	0,0816	1,06	2,96	0,32
Weinsäure [g/L]	77	2,301	2,300	0,256	0,115	0,132	2,23	1,94	0,22
Flüchtige Säure [g/L]	76	0,543	0,535	0,087	0,0333	0,0427	2,62	2,04	0,23
Gesamte Äpfelsäure [g/L] ¹⁾			< BG			0,0975			
Gesamte Milchsäure [g/L]	77	1,493	1,500	0,248	0,0798	0,0805	3,10	3,08	0,35
Freie Schweflige Säure [mg/L]	30	37,62	36,60	6,74	3,41	3,41	1,98	1,98	0,36
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	31	109,91	110,00	11,47	8,67	8,67	1,32	1,32	0,24

¹⁾ Der Gehalt an Gesamter Äpfelsäure liegt unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Die Messergebnisse wurden daher nicht ausgewertet.

Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roseweinprüfgut FT20P03

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	0,99447	0,994440	0,000272		0,000146		1,86	0,20
Vorhandener Alkohol [g/L]	84	87,521	87,475	0,875	2,525	0,739	0,35	1,18	0,13
Gesamtextrakt [g/L]	36	24,218	24,250	0,591	0,849	0,415	0,70	1,42	0,24
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	82	6,561	6,520	0,589	0,278	0,354	2,12	1,66	0,18
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	80	6,786	6,820	0,681	0,289	0,354	2,36	1,92	0,21
Glucose [g/L]	80	3,350	3,335	0,430	0,157	0,288	2,73	1,49	0,17
Fructose [g/L]	80	3,392	3,355	0,440	0,158	0,222	2,78	1,98	0,22
Glycerin [g/L]	72	5,625	5,650	0,428	0,246	0,265	1,74	1,62	0,19
pH-Wert	81	3,529	3,530	0,0711		0,0188		3,78	0,42
Gesamtsäure [g/L]	85	4,077	4,100	0,200	0,188	0,0816	1,07	2,45	0,27
Weinsäure [g/L]	78	1,843	1,850	0,187	0,095	0,132	1,96	1,42	0,16
Flüchtige Säure [g/L]	77	0,370	0,360	0,0940	0,0237	0,0427	3,96	2,20	0,25
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	77	0,596	0,600	0,3050	0,0367	0,0975	8,32	3,13	0,36
Gesamte Milchsäure [g/L]	77	1,724	1,700	0,235	0,089	0,0805	2,64	2,92	0,33
Freie Schweflige Säure [mg/L]	29	44,22	45,00	6,29	4,06	4,06	1,55	1,55	0,29
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	30	87,43	87,50	9,98	7,14	7,14	1,40	1,40	0,26

Schließlich ist auch für diese Prüfgüter von Interesse, inwieweit die Medianwerte der FTIR-Ergebnisse und der Ergebnisse der herkömmlichen Methoden übereinstimmen bzw. sich unterscheiden. Hierzu sind in Tabelle 10 und Tabelle 11 die Abweichungen der Mediane beider Ergebnisgruppen sowie die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores wiedergegeben, die sich bei Division der Abweichung durch die zur Bewertung der Laborergebnisse verwendete Zielstandardabweichung ergeben.

Tabelle 10: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT20P02

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $S_{\text{Ü FTIR}}$	$Z_{\text{Ü FTIR}}$ - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,006870	1,00660	0,000270	0,000190	1,42
Vorhandener Alkohol [g/L]	96,99	96,89	0,105	0,886	0,12
Gesamtextrakt [g/L]	59,68	59,00	0,680	0,594	1,14
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	31,70	30,85	0,850	0,584	1,46
Vergärbare Zucker [g/L], Summe	31,36	30,85	0,505	0,584	0,86
Glucose [g/L]	15,32	15,08	0,235	0,408	0,58
Fructose [g/L]	16,00	15,78	0,218	0,330	0,66
Glycerin [g/L]	8,290	8,328	-0,038	0,348	-0,11
pH-Wert	3,550	3,550	0,000	0,049	0,00
Gesamtsäure [g/L]	5,130	4,960	0,170	0,145	1,17
Weinsäure [g/L]	2,300	2,350	-0,050	0,227	-0,22
Flüchtige Säure [g/L]	0,535	0,4900	0,045	0,089	0,51
Gesamte Äpfelsäure [g/L]		< BG		0,218	
Gesamte Milchsäure [g/L]	1,50	1,620	-0,120	0,209	-0,57
Freie Schweflige Säure [mg/L]	36,60	37,30	-0,70	3,33	-0,21
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	110,00	112,50	-2,50	8,84	-0,28

Die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der Mediane zeigen an, in welchem "mittleren" Ausmaß die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Z-Scores der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren verschoben sind. Bei absoluten Beträgen unter eins ist die Bewertung der FTIR-Laborleistung durch die auf den Median der herkömmlichen Laborergebnisse bezogenen $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores sinnvoll, während bei absoluten Beträgen der $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der FTIR-Medianwerte über 1,5 von erheblichen Matrixeffekten auszugehen ist. Bei entsprechenden Vergleichen ist zu berücksichtigen, dass in den Tabellen der FTIR-Laborergebnisse in der Spalte 'Z-Score, exper.' In der Regel die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der FTIR-Laborergebnisse ausgewiesen sind.

Erläuterungen zu Tabelle 8 und Tabelle 9:

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

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

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

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

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

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

Blau markierte Daten sind auffällig und werden diskutiert.

Rot markierte Daten weisen auf die Überschreitung von Grenzen hin.

Ein erheblicher Unterschied der Medianwerte mit einem Z_{FTIR} -Score über 1,5 zeigt sich bei dem Prüfgut **FT20P02** nicht. Die absoluten Beträge der Z_{FTIR} -Scores für die Parameter Relative Dichte und Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt) erreichen jedoch fast diesen Wert, während bei Gesamtextrakt und Gesamtsäure die Z_{FTIR} nur geringfügig über den Richtwert 1,0 erhöht sind. Dies deutet mit Ausnahme der Parameter Relative Dichte und Vergärbare Zucker (wie mitgeteilt) auf relativ geringe Matrixeffekte bei dem vorliegenden Prüfgut hin. Die Z_{FTIR} -Scores der eigenen Laborergebnisse sind mit dieser Einschränkung zur Bewertung der eigenen Arbeitsumgebung hinsichtlich des Gerätezustands, der Eignung der eigenen Kalibrierung und der Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung geeignet.

Nur geringe Matrixeffekte zeigen sich auch bei dem Prüfgut **FT20P03**. Hier liegen mit unterschiedlichen Vorzeichen nur die Z_{FTIR} -Scores für die Parameter Gesamtextrakt und pH-Wert deutlich sowie für Gesamte Milchsäure knapp über dem Richtwert 1,0. Die Messergebnisse bei diesem Prüfgut sind daher mit Einschränkung für die Parameter Gesamtextrakt und pH-Wert ebenfalls zur Überprüfung der eigenen Arbeitsumgebung geeignet.

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

Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT20P03

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw Z_{FTIR}	Z_{FTIR} - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99444	0,99431	0,000130	0,000190	0,68
Vorhandener Alkohol [g/L]	87,47	87,11	0,365	0,886	0,41
Gesamtextrakt [g/L]	24,25	23,40	0,850	0,594	1,43
Vergärbare Zucker [g/L], wie mitgeteilt	6,520	6,645	-0,125	0,584	-0,21
Vergärbare Zucker [g/L, Summe]	6,820	6,645	0,175	0,584	0,30
Glucose [g/L]	3,335	3,324	0,011	0,408	0,03
Fructose [g/L]	3,355	3,330	0,025	0,330	0,08
Glycerin [g/L]	5,650	5,500	0,150	0,348	0,43
pH-Wert	3,530	3,600	-0,070	0,049	-1,42
Gesamtsäure [g/L]	4,100	4,055	0,045	0,145	0,31
Weinsäure [g/L]	1,850	1,790	0,060	0,227	0,26
Flüchtige Säure [g/L]	0,3600	0,3000	0,060	0,089	0,67
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	0,6000	0,7245	-0,124	0,218	-0,57
Gesamte Milchsäure [g/L]	1,700	1,945	-0,245	0,209	-1,17
Freie Schweflige Säure [mg/L]	45,00	46,30	-1,30	4,16	-0,31
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	87,50	83,50	4,00	6,86	0,58

4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Prüfgutes FT20P02

4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	1,00656	-0,000040	-0,30	
03	LwK 8.4	1,00661	0,000010	0,08	
04	LwK 8.4	1,00658	-0,000020	-0,15	
05	LwK 8.4	1,00662	0,000020	0,15	
06	LwK 8.4	1,00668	0,000080	0,61	
08	LwK 8.1	1,00651	-0,000090	-0,68	
09	LwK 8.4	1,00665	0,000050	0,38	
10	LwK 8.4	1,00661	0,000010	0,08	
11	LwK 8.4	1,00661	0,000010	0,08	
12	LwK 8.4	1,00650	-0,000100	-0,76	
13	LwK 8.4	1,00657	-0,000030	-0,23	
16	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
18	LwK 8.4	1,00650	-0,000100	-0,76	
19	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
21	LwK 8.4	1,00661	0,000010	0,08	
22	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
23	LwK 8.4	1,00674	0,000140	1,06	
24	LwK 8.4	1,00651	-0,000090	-0,68	
26	LwK 8.4	1,00658	-0,000020	-0,15	
27	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
28	LwK 8.4	1,00659	-0,000010	-0,08	
30	LwK 8.4	1,00659	-0,000010	-0,08	
34	LwK 8.4	1,00657	-0,000030	-0,23	
36	LwK 8.4	1,00670	0,000100	0,76	
37	LwK 8.3	1,00476	-0,001840	-13,94	(**)
38	LwK 8.4	1,00663	0,000030	0,23	
39	LwK 8.4	1,00656	-0,000040	-0,30	
40	LwK 8.4	1,00657	-0,000030	-0,23	
41	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	1,00656	-0,000040	-0,30	
44	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
45	LwK 8.4	1,00670	0,000100	0,76	
46	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
49	LwK 8.4	1,00662	0,000020	0,15	
50	LwK 8.4	1,00690	0,000300	2,27	
51	LwK 8.4	1,00666	0,000062	0,47	
52	LwK 8.4	1,00680	0,000200	1,52	
55	LwK 8.4	1,00667	0,000070	0,53	
56	LwK 8.4	1,00670	0,000100	0,76	
59	LwK 8.4	1,00670	0,000100	0,76	
60	LwK 8.4	1,00690	0,000300	2,27	
61	LwK 8.4	1,00659	-0,000015	-0,11	
63	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
64	LwK 8.4	1,00680	0,000200	1,52	
66	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
68	LwK 8.4	1,00680	0,000200	1,52	
72	LwK 8.4	0,98379	-0,022813	-172,83	(**)
73	LwK 8.4	1,00750	0,000900	6,82	(**)
78	LwK 8.4	1,00675	0,000150	1,14	
79	LwK 8.2	1,00680	0,000200	1,52	
80	LwK 8.4	1,00690	0,000300	2,27	
81	LwK 8.4	1,00661	0,000010	0,08	
82	LwK 8.4	1,00656	-0,000040	-0,30	
86	LwK 8.4	1,00660	0,000000	0,00	
91	LwK 8.4	1,00658	-0,000020	-0,15	
110	LwK 8.4	1,00670	0,000100	0,76	

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

4.1.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
202	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
203	FTIR	1,00715	0,000545	2,87	
204	FTIR	1,00650	-0,000105	-0,55	
205	FTIR	1,00630	-0,000305	-1,61	
206	FTIR	1,00667	0,000065	0,34	
207	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
208	FTIR	1,00663	0,000025	0,13	
209	FTIR	1,00634	-0,000265	-1,39	
210	FTIR	1,00634	-0,000265	-1,39	
211	FTIR	1,00639	-0,000215	-1,13	
212	FTIR	1,00620	-0,000405	-2,13	
213	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
215	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
216	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
217	FTIR	1,00740	0,000795	4,18	
218	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
219	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
220	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
221	FTIR	1,00665	0,000045	0,24	
222	FTIR	1,00702	0,000415	2,18	
223	FTIR	1,00591	-0,000695	-3,66	
224	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
225	FTIR	1,00720	0,000595	3,13	
226	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
227	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
228	FTIR	1,00703	0,000425	2,24	
229	FTIR	1,00700	0,000395	2,08	
230	FTIR	1,00666	0,000055	0,29	
232	FTIR	1,00700	0,000395	2,08	
234	FTIR	1,00693	0,000325	1,71	
235	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
236	FTIR	1,00713	0,000525	2,76	
237	FTIR	1,00726	0,000655	3,45	
240	FTIR	1,00681	0,000205	1,08	
241	FTIR	1,00697	0,000365	1,92	
242	FTIR	1,00687	0,000265	1,39	
243	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
244	FTIR	1,00670	0,000095	0,50	
245	FTIR	1,00670	0,000095	0,50	
246	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
247	FTIR	1,00740	0,000795	4,18	
248	FTIR	1,00700	0,000395	2,08	
249	FTIR	1,00670	0,000095	0,50	
250	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
251	FTIR	1,00733	0,000725	3,82	
253	FTIR	1,00720	0,000595	3,13	
255	FTIR	1,00658	-0,000025	-0,13	
256	FTIR	1,00720	0,000595	3,13	
257	FTIR	1,00730	0,000695	3,66	
258	FTIR	1,00737	0,000765	4,03	
259	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
260	FTIR	1,00740	0,000795	4,18	
261	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
262	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
263	FTIR	1,00780	0,001195	6,29	(***)
264	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
265	FTIR	1,00670	0,000095	0,50	
266	FTIR	1,00667	0,000065	0,34	
267	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
268	FTIR	1,00620	-0,000405	-2,13	
269	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
270	FTIR	1,00675	0,000145	0,76	
271	FTIR	1,00715	0,000545	2,87	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
273	FTIR	1,00780	0,001195	6,29	(***)
274	FTIR	1,00698	0,000375	1,97	
275	FTIR	1,00650	-0,000105	-0,55	
276	FTIR	1,00670	0,000095	0,50	
277	FTIR	1,00640	-0,000205	-1,08	
278	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
279	FTIR	1,00780	0,001195	6,29	(***)
280	FTIR	1,00721	0,000605	3,18	
281	FTIR	1,00600	-0,000605	-3,18	
282	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
283	FTIR	1,00720	0,000595	3,13	
284	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
285	FTIR	1,00660	-0,000005	-0,03	
286	FTIR	1,00720	0,000595	3,13	
287	FTIR	1,00680	0,000195	1,03	
321	FTIR	1,00710	0,000495	2,61	
328	FTIR	1,00656	-0,000045	-0,24	
330	FTIR	1,00690	0,000295	1,55	
337	FTIR	1,00723	0,000625	3,29	

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

4.1.3 Deskriptive Ergebnisse

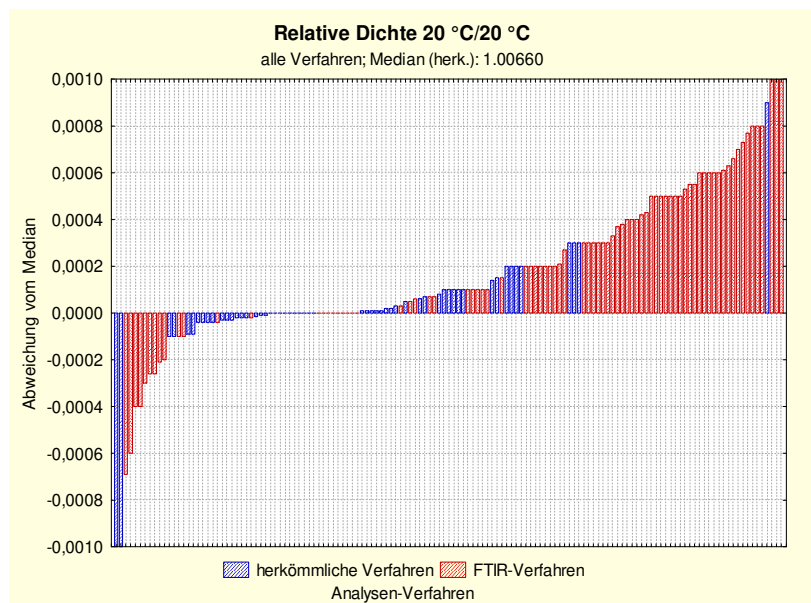
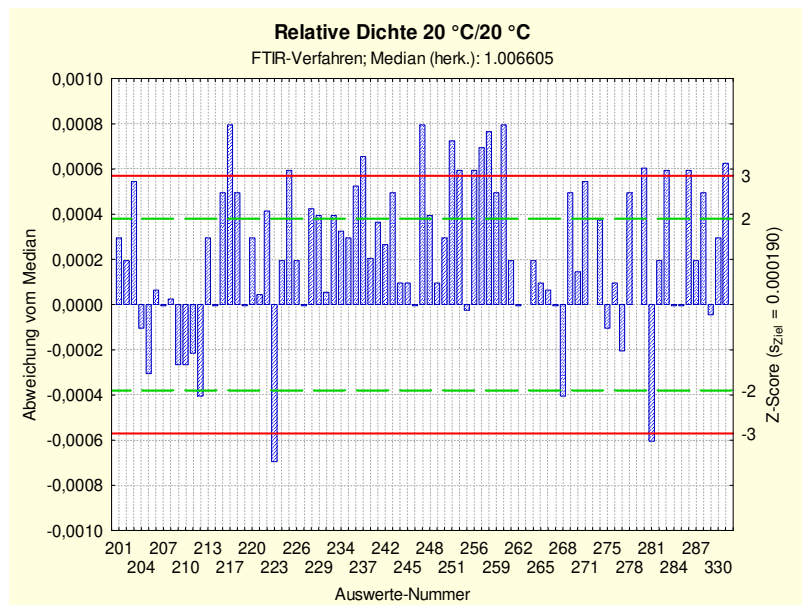
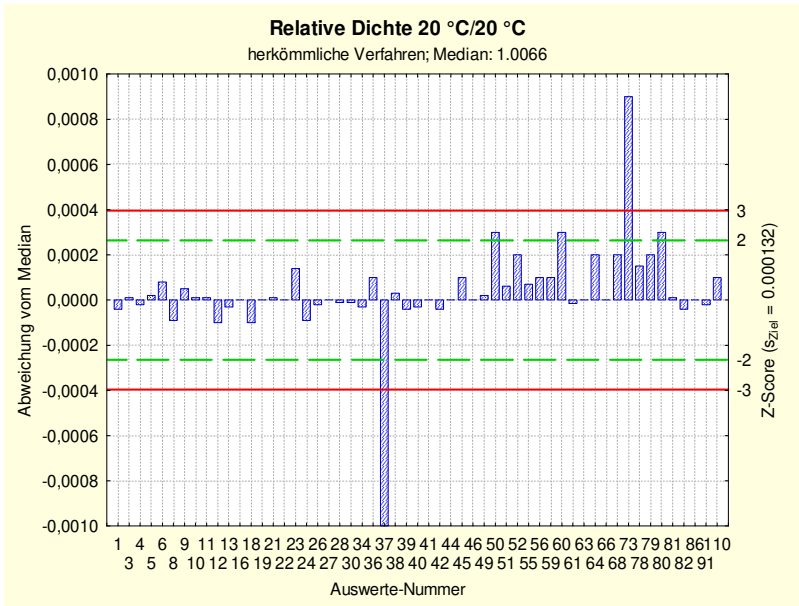
Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	55	53
Minimalwert	1,00476	1,00650
Mittelwert	1,006622	1,006641
Median	1,006600	1,006600
Maximalwert	1,00750	1,00690
Standardabweichung (s_L)	0,000297	0,000098
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000040	0,000013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,25	0,74
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	1,56	0,54
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,30	0,10
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,21	0,07

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	2	1,00654	0,000040
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00680	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,00476	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	51	1,00663	0,000081
	herkömmliche Verfahren	55	1,00663	0,000086
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	1,00687	0,000353

Anmerkung:

Die statistischen Berechnungen erfolgten ohne Berücksichtigung des Wertes zur Auswertenummer 72, da versehentlich die Relative Dichte des alkoholischen Destillates mitgeteilt wurde.



4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

4.2.1 Herkömmliche Laboreergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.4	96,45	-0,435	-0,16	-0,81	
03	LwK 2.9	98,21	1,325	0,48	2,48	
04	LwK 2.1	97,23	0,349	0,13	0,65	
05	LwK 2.4	97,02	0,135	0,05	0,25	
06	LwK 2.9	96,61	-0,275	-0,10	-0,51	
08	LwK 2.4	98,07	1,185	0,43	2,21	
09	LwK 2.1	97,35	0,465	0,17	0,87	
10	LwK 2.1	96,60	-0,285	-0,10	-0,53	
11	LwK 2.4	95,73	-1,155	-0,42	-2,16	
12	LwK 2.1	97,40	0,515	0,19	0,96	
13	LwK 2.1	96,20	-0,685	-0,25	-1,28	
16	LwK 2.9	96,80	-0,085	-0,03	-0,16	
18	LwK 2.9	97,30	0,415	0,15	0,78	
19	LwK 2.1	97,81	0,925	0,34	1,73	
21	LwK 2.9	96,70	-0,185	-0,07	-0,35	
22	LwK 2.7	96,45	-0,435	-0,16	-0,81	
23	LwK 2.9	97,00	0,115	0,04	0,21	
24	LwK 2.5	98,10	1,215	0,44	2,27	
26	LwK 2.1	97,20	0,315	0,11	0,59	
27	LwK 2.4	96,90	0,015	0,01	0,03	
28	LwK 2.5	97,40	0,515	0,19	0,96	
30	LwK 2.1	96,93	0,045	0,02	0,08	
33	LwK 2.9	97,20	0,315	0,11	0,59	
35	LwK 2.9	96,50	-0,385	-0,14	-0,72	
37	LwK 2.2	107,00	10,115	3,67	18,91	(***)
38	LwK 2.9	96,90	0,015	0,01	0,03	
39	LwK 2.9	97,20	0,315	0,11	0,59	
40	LwK 2.4	96,95	0,065	0,02	0,12	
41	LwK 2.9	96,87	-0,015	-0,01	-0,03	
42	LwK 2.4	96,40	-0,485	-0,18	-0,91	
44	LwK 2.1	97,10	0,215	0,08	0,40	
45	LwK 2.9	97,70	0,815	0,30	1,52	
46	LwK 2.9	111,70	14,815	5,38	27,69	(***)
49	LwK 2.9	97,15	0,265	0,10	0,50	
50	LwK 2.9	94,70	-2,185	-0,79	-4,08	
51	LwK 2.9	96,73	-0,155	-0,06	-0,29	
52	LwK 2.9	97,50	0,615	0,22	1,15	
54	LwK 2.1	96,78	-0,105	-0,04	-0,20	
55	LwK 2.9	96,40	-0,485	-0,18	-0,91	
56	LwK 2.5	98,00	1,115	0,40	2,08	
59	LwK 2.1	96,70	-0,185	-0,07	-0,35	
60	LwK 2.9	97,00	0,115	0,04	0,21	
61	LwK 2.1	96,54	-0,345	-0,13	-0,64	
63	LwK 2.5	97,37	0,485	0,18	0,91	
64	LwK 2.9	97,80	0,915	0,33	1,71	
66	LwK 2.1	96,70	-0,185	-0,07	-0,35	
68	LwK 2.5	96,94	0,055	0,02	0,10	
70	LwK 2.3	97,00	0,115	0,04	0,21	
72	LwK 2.4	97,00	0,113	0,04	0,21	
73	LwK 2.9	96,90	0,015	0,01	0,03	
75	LwK 2.4	96,87	-0,015	-0,01	-0,03	
78	LwK 2.1	95,70	-1,185	-0,43	-2,21	
79	LwK 2.2	101,20	4,315	1,57	8,07	(***)
81	LwK 2.9	97,28	0,395	0,14	0,74	
82	LwK 2.9	97,25	0,362	0,13	0,68	
91	LwK 2.9	96,29	-0,595	-0,22	-1,11	
96	LwK 2.9	97,30	0,415	0,15	0,78	
99	LwK 2.9	97,28	0,395	0,14	0,74	
101	LwK 2.9	96,79	-0,095	-0,03	-0,18	

Rot markierte Messwerte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter in die Einheit g/L umgerechnet.
 (***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Destillationsergebnisse ab.

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
103	LwK 2.9	97,30	0,415	0,15	0,78	
104	LwK 2.4	95,36	-1,525	-0,55	-2,85	
109	LwK 2.9	98,20	1,315	0,48	2,46	
110	LwK 2.9	96,70	-0,185	-0,07	-0,35	
111	NMR	97,24	0,353	0,13	0,66	
112	NMR	93,87	-3,012	-1,09	-5,63	(***)
113	NMR	96,61	-0,275	-0,10	-0,51	
114	NMR	96,60	-0,281	-0,10	-0,52	
116	NMR	95,21	-1,671	-0,61	-3,12	
117	NMR	96,90	0,015	0,01	0,03	

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

4.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	96,11	-0,775	-0,28	-0,87	
202	LwK 2.8	98,20	1,315	0,48	1,48	
203	LwK 2.8	95,74	-1,145	-0,42	-1,29	
204	LwK 2.8	97,39	0,507	0,18	0,57	
205	LwK 2.8	96,89	0,005	0,00	0,01	
206	LwK 2.8	99,66	2,775	1,01	3,13	
207	LwK 2.8	96,70	-0,185	-0,07	-0,21	
208	LwK 2.8	98,58	1,695	0,62	1,91	
209	LwK 2.8	97,25	0,365	0,13	0,41	
210	LwK 2.8	96,78	-0,105	-0,04	-0,12	
211	LwK 2.8	97,34	0,455	0,17	0,51	
212	LwK 2.8	96,40	-0,485	-0,18	-0,55	
213	LwK 2.8	98,49	1,605	0,58	1,81	
215	LwK 2.8	98,00	1,115	0,40	1,26	
216	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
217	LwK 2.8	97,74	0,855	0,31	0,97	
218	LwK 2.8	97,70	0,815	0,30	0,92	
219	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
220	LwK 2.8	96,30	-0,585	-0,21	-0,66	
221	LwK 2.8	96,65	-0,235	-0,09	-0,27	
222	LwK 2.8	96,00	-0,885	-0,32	-1,00	
224	LwK 2.8	97,80	0,915	0,33	1,03	
225	LwK 2.8	97,26	0,375	0,14	0,42	
226	LwK 2.8	97,29	0,405	0,15	0,46	
227	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
228	LwK 2.8	96,91	0,025	0,01	0,03	
229	LwK 2.8	97,40	0,515	0,19	0,58	
230	LwK 2.8	95,54	-1,345	-0,49	-1,52	
232	LwK 2.8	96,30	-0,585	-0,21	-0,66	
234	LwK 2.8	98,05	1,165	0,42	1,31	
235	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
236	LwK 2.8	97,00	0,115	0,04	0,13	
237	LwK 2.8	95,99	-0,895	-0,33	-1,01	
240	LwK 2.8	97,00	0,115	0,04	0,13	
241	LwK 2.8	96,87	-0,015	-0,01	-0,02	
242	LwK 2.8	95,77	-1,115	-0,40	-1,26	
243	LwK 2.8	96,20	-0,685	-0,25	-0,77	
244	LwK 2.8	96,95	0,065	0,02	0,07	
245	LwK 2.8	95,80	-1,085	-0,39	-1,22	
246	LwK 2.8	96,30	-0,585	-0,21	-0,66	
247	LwK 2.8	97,24	0,355	0,13	0,40	
248	LwK 2.8	97,40	0,515	0,19	0,58	
249	LwK 2.8	96,98	0,095	0,03	0,11	
250	LwK 2.8	97,40	0,515	0,19	0,58	
251	LwK 2.8	97,45	0,565	0,21	0,64	
253	LwK 2.8	98,10	1,215	0,44	1,37	
254	LwK 2.8	95,90	-0,985	-0,36	-1,11	
255	LwK 2.8	97,10	0,215	0,08	0,24	

Rot markierte Messwerte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter in die Einheit g/L umgerechnet.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

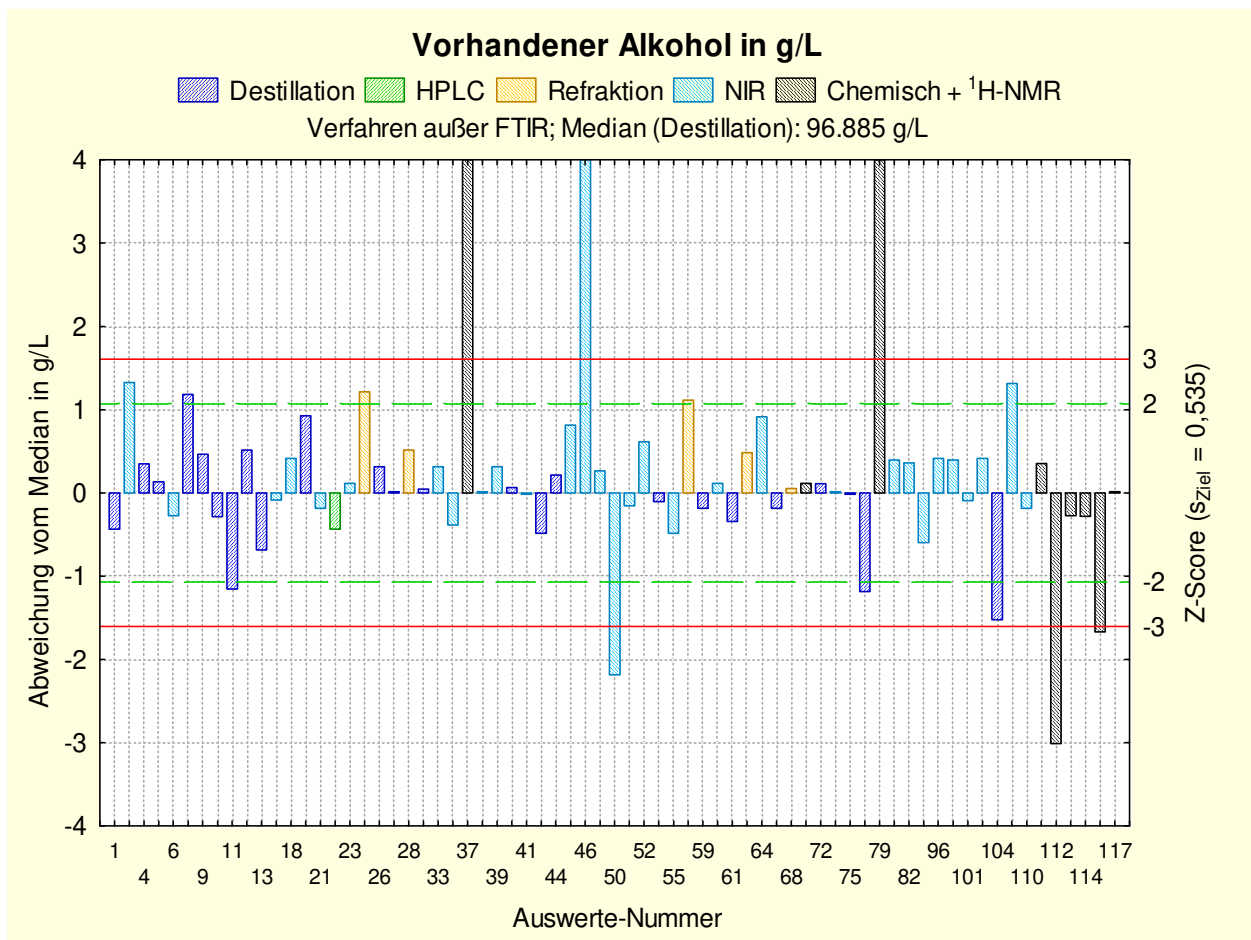
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
256	LwK 2.8	99,00	2,115	0,77	2,39	
257	LwK 2.8	98,10	1,215	0,44	1,37	
258	LwK 2.8	98,13	1,245	0,45	1,41	
259	LwK 2.8	95,00	-1,885	-0,68	-2,13	
260	LwK 2.8	96,30	-0,585	-0,21	-0,66	
261	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
262	LwK 2.8	96,80	-0,085	-0,03	-0,10	
263	LwK 2.8	96,00	-0,885	-0,32	-1,00	
264	LwK 2.8	98,73	1,845	0,67	2,08	
265	LwK 2.8	96,10	-0,785	-0,29	-0,89	
266	LwK 2.8	95,73	-1,155	-0,42	-1,30	
267	LwK 2.8	97,85	0,965	0,35	1,09	
268	LwK 2.8	95,88	-1,005	-0,37	-1,13	
269	LwK 2.8	100,43	3,545	1,29	4,00	
270	LwK 2.8	96,80	-0,085	-0,03	-0,10	
271	LwK 2.8	96,64	-0,245	-0,09	-0,28	
273	LwK 2.8	96,60	-0,285	-0,10	-0,32	
274	LwK 2.8	98,11	1,225	0,44	1,38	
275	LwK 2.8	97,66	0,776	0,28	0,88	
276	LwK 2.8	96,20	-0,685	-0,25	-0,77	
277	LwK 2.8	98,00	1,115	0,40	1,26	
278	LwK 2.8	96,00	-0,885	-0,32	-1,00	
279	LwK 2.8	97,84	0,955	0,35	1,08	
280	LwK 2.8	98,80	1,915	0,70	2,16	
281	LwK 2.8	96,39	-0,495	-0,18	-0,56	
282	LwK 2.8	96,61	-0,270	-0,10	-0,30	
283	LwK 2.8	93,61	-3,275	-1,19	-3,70	
284	LwK 2.8	95,29	-1,595	-0,58	-1,80	
285	LwK 2.8	97,50	0,615	0,22	0,69	
286	LwK 2.8	98,06	1,175	0,43	1,33	
287	LwK 2.8	97,20	0,315	0,11	0,36	
312	LwK 2.8	96,80	-0,085	-0,03	-0,10	
321	LwK 2.8	96,90	0,015	0,01	0,02	
328	LwK 2.8	96,28	-0,605	-0,22	-0,68	
330	LwK 2.8	96,60	-0,285	-0,10	-0,32	
337	LwK 2.8	95,77	-1,115	-0,40	-1,26	

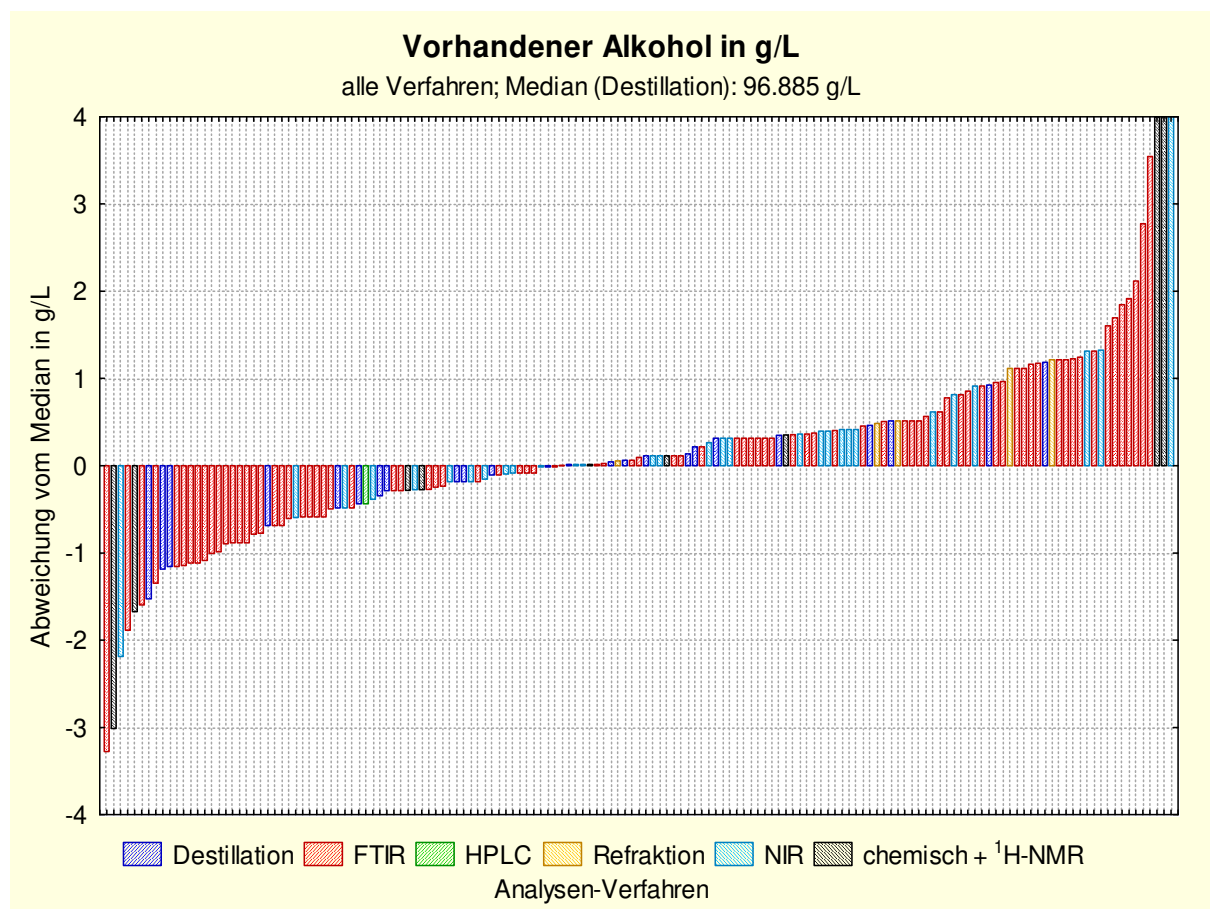
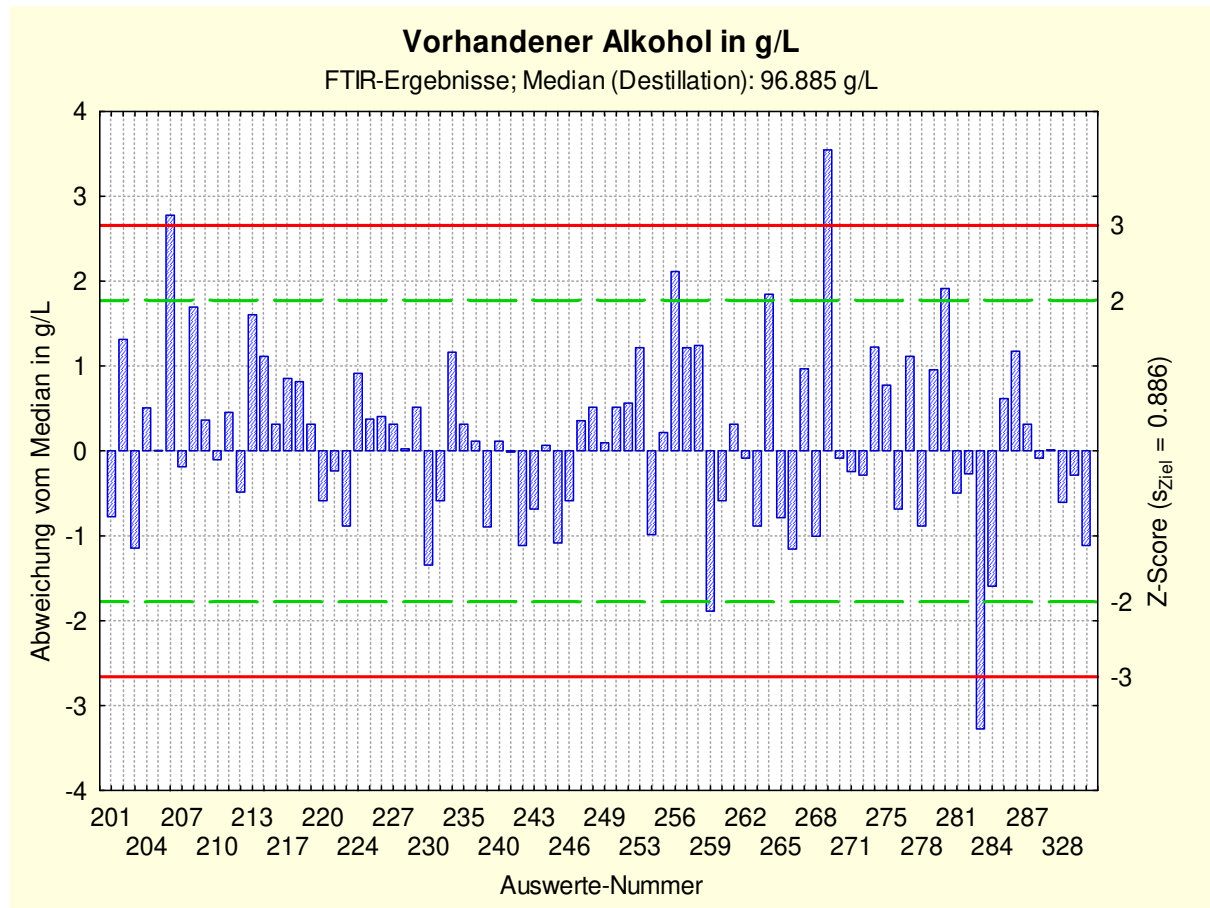
4.2.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	95,36
Mittelwert	96,791
Median	96,885
Maximalwert	98,07
Standardabweichung (s_L)	0,628
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,128
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,753
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,23
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,17
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,71
Quotient (u_M/s_H)	0,05
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,24
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,14

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	96,895	0,517
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	10	96,669	0,733
	Destillationsverfahren	24	96,816	0,546
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	104,100	4,651
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr.Rebelein	1	97,000	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	5	97,562	0,547
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	1	96,450	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	96,998	0,966
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	30	97,077	0,511
NMR	¹ H- Kernresonanzspektroskopie	6	96,103	1,388





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	57,9	-1,10	-0,61	-1,85	
03	LwK 3.3	59,5	0,50	0,28	0,84	
04	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
05	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	
06	LwK 3.3	59,0	-0,02	-0,01	-0,03	
08	LwK 3.1	59,0	0,00	0,00	0,00	
09	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
10	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
11	LwK 3.1	58,6	-0,40	-0,22	-0,67	
12	LwK 3.2	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
13	LwK 3.3	58,5	-0,50	-0,28	-0,84	
16	LwK 3.3	58,7	-0,30	-0,17	-0,51	
18	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
19	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
21	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
22	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
23	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
24	LwK 3.3	59,1	0,10	0,06	0,17	
26	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
28	LwK 3.3	59,3	0,30	0,17	0,51	
30	LwK 3.2	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
37	LwK 3.3	58,0	-1,00	-0,55	-1,68	
38	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 3.3	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
40	LwK 3.3	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
41	LwK 3.3	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
42	LwK 3.3	58,6	-0,40	-0,22	-0,67	
44	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
45	LwK 3.3	59,4	0,40	0,22	0,67	
46	LwK 3.3	59,1	0,10	0,06	0,17	
49	LwK 3.3	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
51	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	
52	LwK 3.3	58,7	-0,30	-0,17	-0,51	
54	LwK 3.2	59,0	0,00	0,00	0,00	
55	LwK 3.3	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
56	LwK 3.3	59,5	0,50	0,28	0,84	
59	LwK 3.2	59,0	0,00	0,00	0,00	
60	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 3.2	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
63	FTIR (gemessen)	58,9	-0,10	-0,06	-0,17	
66	LwK 3.2	58,4	-0,60	-0,33	-1,01	
73	LwK 3.3	59,6	0,60	0,33	1,01	
78	LwK 3.2	58,6	-0,40	-0,22	-0,67	
79	LwK 3.3	61,1	2,10	1,16	3,54	
81	LwK 3.3	59,3	0,30	0,17	0,51	
82	LwK 3.3	59,2	0,20	0,11	0,34	
91	LwK 3.3	58,7	-0,30	-0,17	-0,51	
109	LwK 3.3	60,2	1,20	0,66	2,02	
110	LwK 3.3	59,0	0,00	0,00	0,00	

4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	58,5	-0,45	-0,25	-0,76	
202	FTIR (gemessen)	60,2	1,20	0,66	2,02	
203	FTIR (gemessen)	60,0	0,98	0,54	1,65	
205	FTIR (gemessen)	59,7	0,66	0,37	1,11	
208	FTIR (gemessen)	59,5	0,50	0,28	0,84	
209	FTIR-Basis	58,5	-0,50	-0,28	-0,84	
210	k. A.	58,7	-0,34	-0,19	-0,57	
211	FTIR (gemessen)	58,9	-0,11	-0,06	-0,19	
217	FTIR (gemessen)	59,9	0,90	0,50	1,52	
218	FTIR (gemessen)	59,3	0,30	0,17	0,51	
219	FTIR (gemessen)	59,3	0,30	0,17	0,51	
220	FTIR (gemessen)	60,0	1,00	0,55	1,68	
221	FTIR (gemessen)	58,4	-0,65	-0,36	-1,09	
222	FTIR (gemessen)	57,9	-1,10	-0,61	-1,85	
224	FTIR (gemessen)	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
227	FTIR (gemessen)	60,1	1,10	0,61	1,85	
228	FTIR (gemessen)	59,7	0,73	0,40	1,23	
232	k. A.	58,8	-0,19	-0,11	-0,32	
236	LwK 3.3 (herk.)	59,2	0,20	0,11	0,34	
237	FTIR (gemessen)	60,3	1,27	0,70	2,14	
250	FTIR (gemessen)	60,7	1,70	0,94	2,86	
251	FTIR (gemessen)	60,7	1,66	0,92	2,79	
253	FTIR (gemessen)	60,1	1,10	0,61	1,85	
257	herk./FTIR	59,6	0,60	0,33	1,01	
258	FTIR-Basis	61,2	2,20	1,22	3,70	
259	FTIR-Basis	59,5	0,50	0,28	0,84	
261	FTIR (gemessen)	59,9	0,90	0,50	1,52	
262	k. A.	58,6	-0,35	-0,19	-0,59	
263	FTIR (gemessen)	60,5	1,50	0,83	2,53	
266	FTIR (gemessen)	58,8	-0,24	-0,13	-0,40	
267	FTIR (gemessen)	58,7	-0,33	-0,18	-0,56	
269	k. A.	60,5	1,53	0,85	2,58	
270	k. A.	89,6	30,60	16,94	51,52	(*)
271	k. A.	58,8	-0,20	-0,11	-0,34	
273	FTIR (gemessen)	58,7	-0,30	-0,17	-0,51	
276	FTIR (gemessen)	58,7	-0,30	-0,17	-0,51	
277	FTIR (gemessen)	51,7	-7,30	-4,04	-12,29	(***)
278	FTIR (gemessen)	60,5	1,50	0,83	2,53	
279	FTIR (gemessen)	62,1	3,10	1,72	5,22	(***)
280	FTIR (gemessen)	56,9	-2,10	-1,16	-3,54	
281	FTIR (gemessen)	59,7	0,70	0,39	1,18	
282	FTIR-Basis	59,5	0,50	0,28	0,84	
283	FTIR (gemessen)	58,8	-0,25	-0,14	-0,42	
284	FTIR-Basis	58,4	-0,57	-0,32	-0,96	
285	k. A.	59,0	0,00	0,00	0,00	
286	FTIR (gemessen)	60,0	0,95	0,53	1,60	
321	FTIR (gemessen)	60,3	1,30	0,72	2,19	
328	FTIR (gemessen)	59,9	0,89	0,49	1,50	
337	FTIR (gemessen)	59,3	0,27	0,15	0,45	

(*) 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.

Rote Verfahrensangabe: fehlerhafte Auswahl

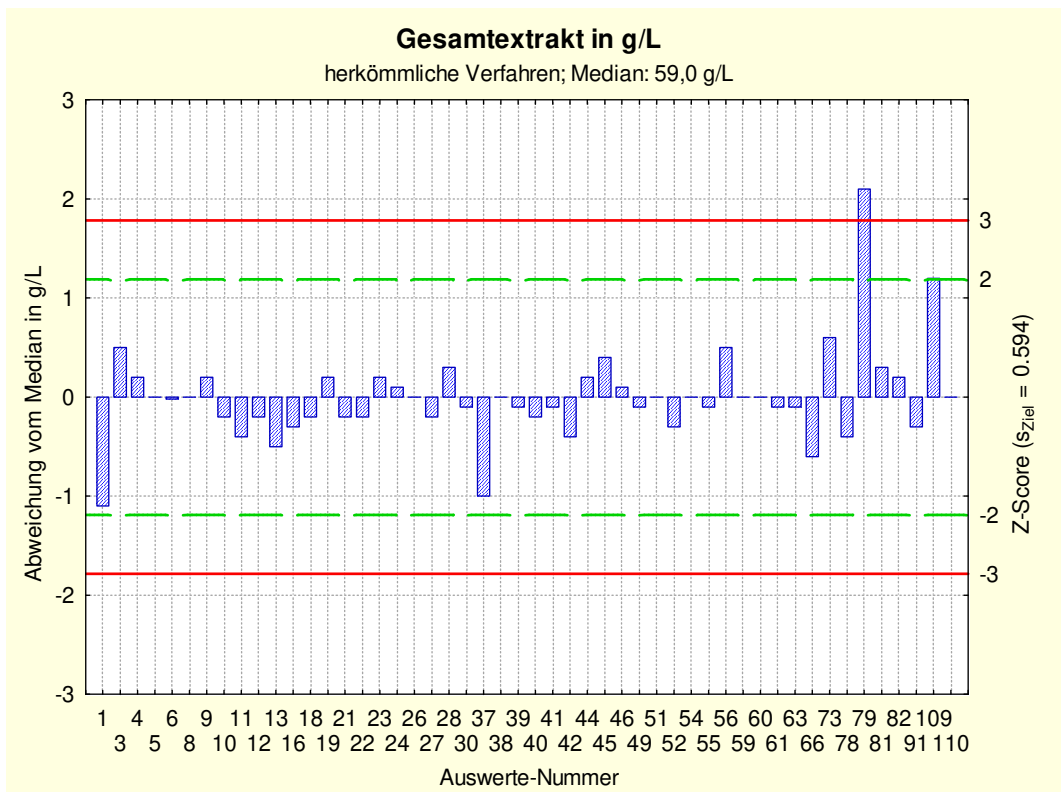
4.3.3 Deskriptive Ergebnisse

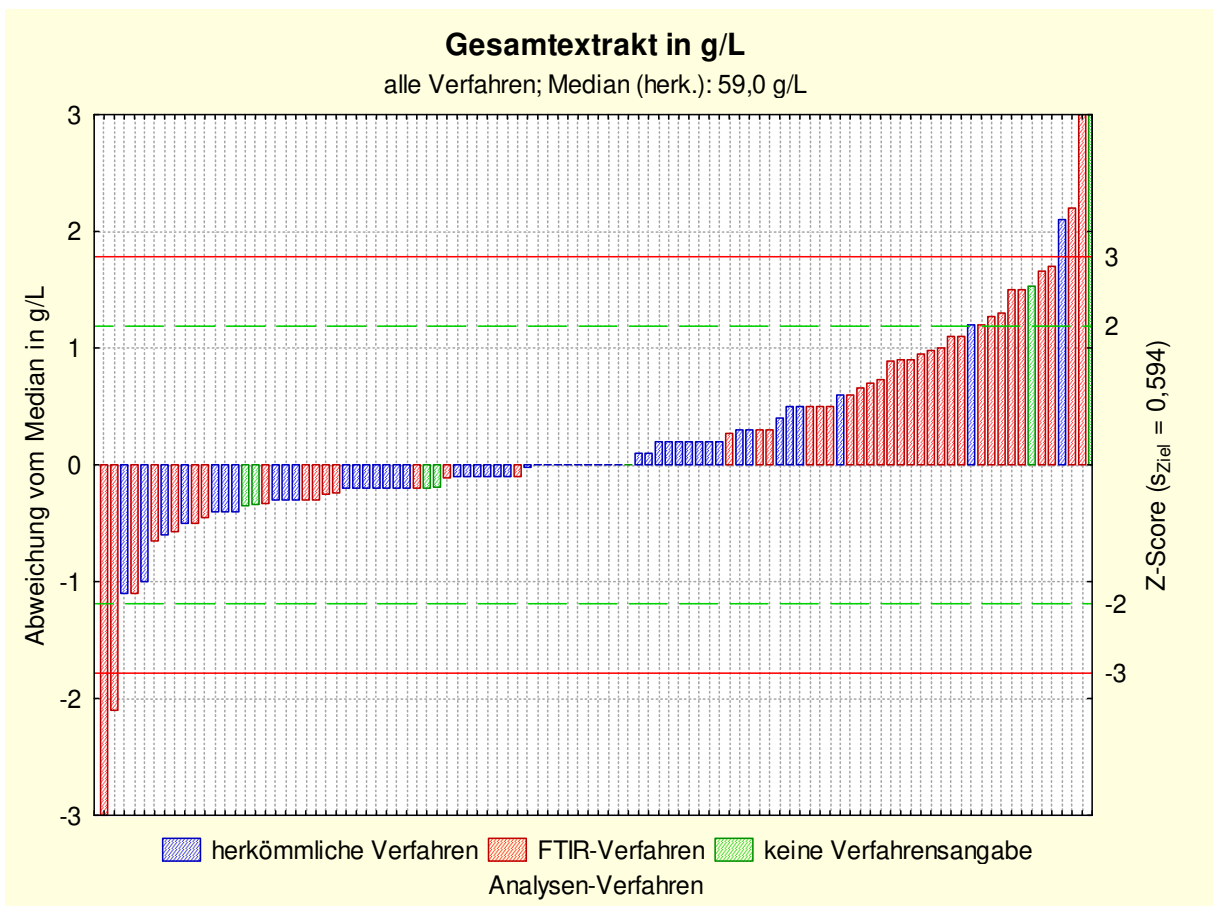
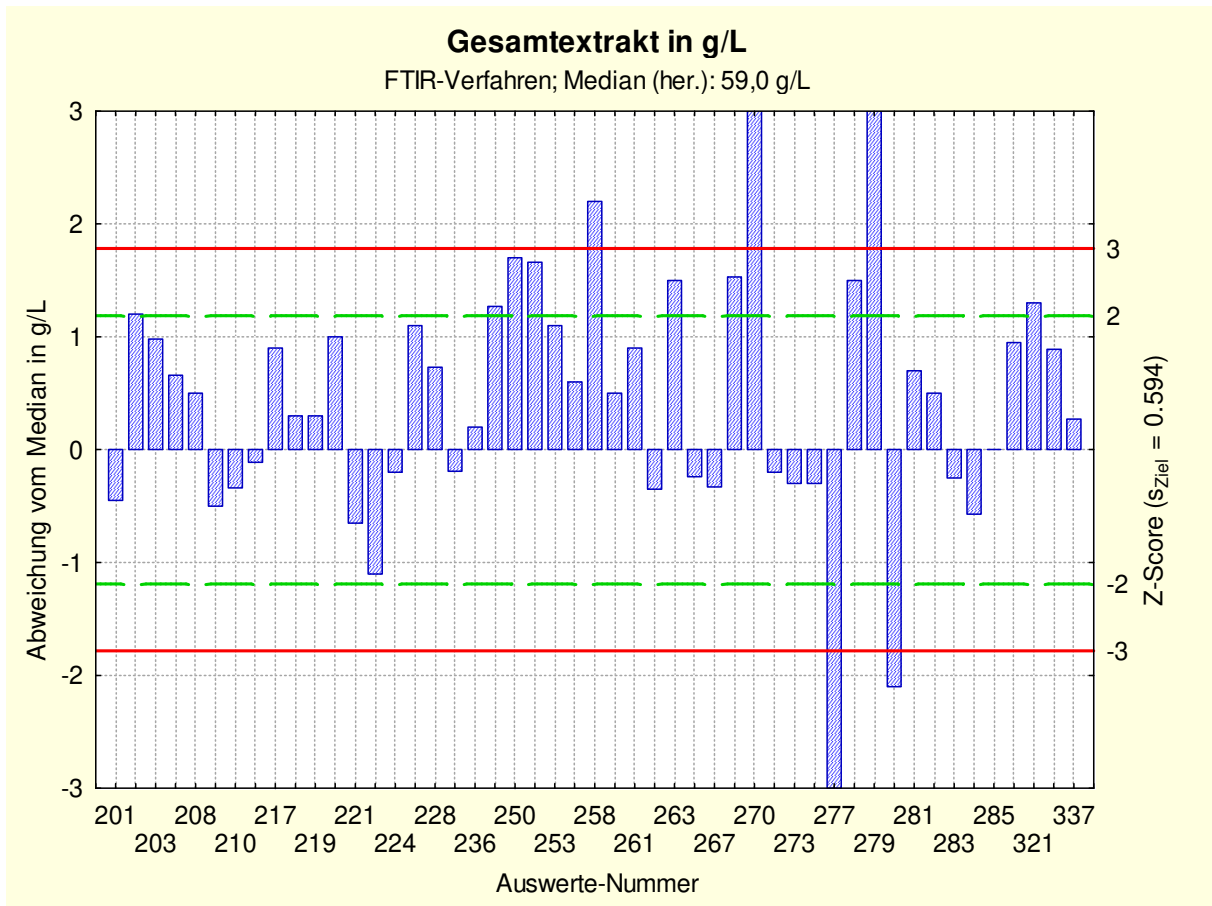
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	49
Minimalwert	57,9
Mittelwert	59,00
Median	59,00
Maximalwert	61,1
Standardabweichung (s _L)	0,483
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,069
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,807
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	(0,565)
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,27
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,81
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	(0,81)
Quotient (u _M /s _H)	0,04
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,12
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	(0,12)

^{*)} 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	58,800	0,321
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	7	58,813	0,225
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	40	59,019	0,323
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	49	58,969	0,308
herk./FTIR	Berechnung nach Tabarie (Basis: Dichte n. LwK 8.1 bis 8.4; FTIR-Alkohol)	36	59,492	0,914
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie (Basis: FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol)	1	59,600	
k. A.	keine Verfahrensangabe	5	59,426	1,269
		7	59,352	1,121





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	32,39	1,540	1,48	1,76	
02	LwK 4.5	29,87	-0,980	-0,94	-1,12	
05	LwK 4.5	30,30	-0,550	-0,53	-0,63	
06	LwK 4.5	29,60	-1,250	-1,20	-1,43	
08	LwK 4.5	29,78	-1,070	-1,03	-1,22	
09	LwK 4.7	31,90	1,050	1,01	1,20	
10	LwK 4.1	31,80	0,950	0,91	1,08	
11	LwK 4.7	31,13	0,280	0,27	0,32	
12	LwK 4.7	31,80	0,950	0,91	1,08	
13	LwK 4.5	31,10	0,250	0,24	0,29	
16	LwK 4.5	30,30	-0,550	-0,53	-0,63	
19	LwK 4.5	30,69	-0,160	-0,15	-0,18	
21	LwK 4.7	30,92	0,070	0,07	0,08	
22	LwK 4.7	31,10	0,250	0,24	0,29	
23	LwK 4.7	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
24	LwK 4.4	31,10	0,250	0,24	0,29	
26	LwK 4.5	30,42	-0,430	-0,41	-0,49	
27	LwK 4.7	30,00	-0,850	-0,82	-0,97	
28	LwK 4.4	31,75	0,900	0,86	1,03	
30	LwK 4.5	30,52	-0,330	-0,32	-0,38	
35	LwK 4.5	30,70	-0,150	-0,14	-0,17	
37	LwK 4.3	34,00	3,150	3,02	3,60	
38	LwK 4.5	31,70	0,850	0,82	0,97	
39	LwK 4.7	31,10	0,250	0,24	0,29	
40	LwK 4.5	30,80	-0,050	-0,05	-0,06	
41	LwK 4.5	30,37	-0,480	-0,46	-0,55	
42	LwK 4.5	31,19	0,343	0,33	0,39	
44	LwK 4.5	30,90	0,050	0,05	0,06	
45	LwK 4.5	33,60	2,750	2,64	3,14	
46	LwK 4.5	30,80	-0,050	-0,05	-0,06	
49	LwK 4.5	31,21	0,360	0,35	0,41	
51	LwK 4.5	32,93	2,080	2,00	2,37	
52	LwK 4.5	31,70	0,850	0,82	0,97	
54	LwK 4.5	31,00	0,150	0,14	0,17	
55	LwK 4.5	30,61	-0,240	-0,23	-0,27	
56	LwK 4.5	31,71	0,860	0,83	0,98	
59	LwK 4.4	33,00	2,150	2,06	2,45	
60	LwK 4.7	30,10	-0,750	-0,72	-0,86	
61	LwK 4.5	28,86	-1,990	-1,91	-2,27	
63	LwK 4.4	32,00	1,150	1,10	1,31	
66	LwK 4.4	33,40	2,550	2,45	2,91	
68	LwK 4.5	31,19	0,340	0,33	0,39	
72	LwK 4.4	31,50	0,650	0,62	0,74	
73	LwK 4.4	34,70	3,850	3,70	4,40	
75	LwK 4.4	33,00	2,150	2,06	2,45	
78	LwK 4.5	30,66	-0,190	-0,18	-0,22	
79	LwK 4.3	33,40	2,550	2,45	2,91	
99	LwK 4.7	31,42	0,568	0,55	0,65	
109	LwK 4.4	34,30	3,450	3,31	3,94	
110	LwK 4.7	30,20	-0,650	-0,62	-0,74	
111	NMR	29,25	-1,599	-1,54	-1,83	
112	NMR	31,04	0,195	0,19	0,22	
113	NMR	30,52	-0,330	-0,32	-0,38	
114	NMR	29,51	-1,343	-1,29	-1,53	
115	NMR	30,50	-0,350	-0,34	-0,40	
116	NMR	30,42	-0,430	-0,41	-0,49	

4.4.2 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	32,44	1,590	1,53	1,82	
202	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
203	LwK 4.8	31,34	0,490	0,47	0,56	
204	LwK 4.8	30,19	-0,660	-0,63	-0,75	
205	LwK 4.8	31,93	1,080	1,04	1,23	
206	LwK 4.8	31,97	1,120	1,08	1,28	
207	LwK 4.8	32,40	1,550	1,49	1,77	
208	LwK 4.8	31,78	0,930	0,89	1,06	
209	LwK 4.8	32,10	1,250	1,20	1,43	
210	LwK 4.8	30,35	-0,500	-0,48	-0,57	
211	LwK 4.8	30,95	0,100	0,10	0,11	
212	LwK 4.8	32,68	1,830	1,76	2,09	
213	LwK 4.8	31,76	0,910	0,87	1,04	
215	LwK 4.8	31,50	0,650	0,62	0,74	
216	LwK 4.8	28,83	-2,020	-1,94	-2,31	
217	LwK 4.8	29,25	-1,600	-1,54	-1,83	
218	LwK 4.8	31,14	0,290	0,28	0,33	
219	LwK 4.8	30,65	-0,200	-0,19	-0,23	
220	LwK 4.8	33,00	2,150	2,06	2,45	
221	LwK 4.8	30,63	-0,220	-0,21	-0,25	
223	LwK 4.8	30,20	-0,650	-0,62	-0,74	
224	LwK 4.8	31,10	0,250	0,24	0,29	
225	LwK 4.8	32,91	2,060	1,98	2,35	
226	LwK 4.8	31,16	0,310	0,30	0,35	
227	LwK 4.8	33,50	2,650	2,54	3,03	
228	LwK 4.8	32,72	1,870	1,80	2,14	
229	LwK 4.8	32,07	1,220	1,17	1,39	
230	LwK 4.8	30,66	-0,190	-0,18	-0,22	
232	LwK 4.8	31,59	0,740	0,71	0,84	
234	LwK 4.8	33,13	2,280	2,19	2,60	
235	LwK 4.8	32,30	1,450	1,39	1,66	
236	LwK 4.8	31,60	0,750	0,72	0,86	
237	LwK 4.8	32,35	1,500	1,44	1,71	
240	LwK 4.8	30,41	-0,440	-0,42	-0,50	
241	LwK 4.8	30,90	0,050	0,05	0,06	
242	LwK 4.8	30,82	-0,030	-0,03	-0,03	
243	LwK 4.8	30,70	-0,150	-0,14	-0,17	
244	LwK 4.8	31,22	0,370	0,36	0,42	
245	LwK 4.8	31,11	0,260	0,25	0,30	
246	LwK 4.8	31,70	0,850	0,82	0,97	
247	LwK 4.8	32,57	1,720	1,65	1,96	
248	LwK 4.8	31,70	0,850	0,82	0,97	
249	LwK 4.8	32,46	1,610	1,55	1,84	
250	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
251	LwK 4.8	32,93	2,080	2,00	2,37	
253	LwK 4.8	33,00	2,150	2,06	2,45	
254	LwK 4.8	31,80	0,950	0,91	1,08	
255	LwK 4.8	31,20	0,350	0,34	0,40	
256	LwK 4.8	32,48	1,630	1,56	1,86	
257	LwK 4.8	31,00	0,150	0,14	0,17	
258	LwK 4.8	33,50	2,650	2,54	3,03	
259	LwK 4.8	32,50	1,650	1,58	1,88	
260	LwK 4.8	33,60	2,750	2,64	3,14	
261	LwK 4.8	29,61	-1,240	-1,19	-1,42	
262	LwK 4.8	31,40	0,550	0,53	0,63	
263	LwK 4.8	35,30	4,450	4,27	5,08	(**)
264	LwK 4.8	32,59	1,740	1,67	1,99	
265	LwK 4.8	31,22	0,370	0,36	0,42	
266	LwK 4.8	31,94	1,090	1,05	1,24	
267	LwK 4.8	31,93	1,080	1,04	1,23	
268	LwK 4.8	34,40	3,550	3,41	4,05	
269	LwK 4.8	30,92	0,070	0,07	0,08	
270	LwK 4.8	32,60	1,750	1,68	2,00	
271	LwK 4.8	32,05	1,200	1,15	1,37	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 4.8	33,08	2,230	2,14	2,55	
274	LwK 4.8	32,32	1,470	1,41	1,68	
275	LwK 4.8	30,84	-0,010	-0,01	-0,01	
276	LwK 4.8	31,80	0,950	0,91	1,08	
277	LwK 4.8	28,30	-2,550	-2,45	-2,91	
278	LwK 4.8	31,30	0,450	0,43	0,51	
279	LwK 4.8	33,20	2,350	2,26	2,68	
280	LwK 4.8	32,53	1,680	1,61	1,92	
281	LwK 4.8	34,93	4,080	3,92	4,66	
283	LwK 4.8	31,65	0,800	0,77	0,91	
284	LwK 4.8	31,52	0,670	0,64	0,76	
285	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
286	LwK 4.8	32,04	1,190	1,14	1,36	
287	LwK 4.8	31,00	0,150	0,14	0,17	
321	LwK 4.8	31,29	0,440	0,42	0,50	
328	LwK 4.8	31,49	0,640	0,61	0,73	
330	LwK 4.8	31,80	0,950	0,91	1,08	
337	LwK 4.8	31,35	0,500	0,48	0,57	

4.4.3 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; 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	32,44	1,590	1,53	1,82	
202	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
203	LwK 4.8	31,34	0,490	0,47	0,56	
204	LwK 4.8	30,19	-0,660	-0,63	-0,75	
205	LwK 4.8	31,93	1,080	1,04	1,23	
207	LwK 4.8	32,50	1,650	1,58	1,88	
208	LwK 4.8	31,78	0,930	0,89	1,06	
209	LwK 4.8	32,10	1,250	1,20	1,43	
210	LwK 4.8	30,35	-0,500	-0,48	-0,57	
211	LwK 4.8	30,95	0,100	0,10	0,11	
212	LwK 4.8	32,19	1,340	1,29	1,53	
213	LwK 4.8	31,13	0,280	0,27	0,32	
215	LwK 4.8	30,50	-0,350	-0,34	-0,40	
216	LwK 4.8	30,32	-0,530	-0,51	-0,61	
217	LwK 4.8	29,13	-1,720	-1,65	-1,96	
218	LwK 4.8	29,03	-1,820	-1,75	-2,08	
219	LwK 4.8	30,65	-0,200	-0,19	-0,23	
220	LwK 4.8	33,00	2,150	2,06	2,45	
221	LwK 4.8	30,63	-0,220	-0,21	-0,25	
222	LwK 4.8	33,83	2,980	2,86	3,40	
223	LwK 4.8	30,20	-0,650	-0,62	-0,74	
224	LwK 4.8	31,00	0,150	0,14	0,17	
225	LwK 4.8	31,27	0,420	0,40	0,48	
226	LwK 4.8	31,16	0,310	0,30	0,35	
227	LwK 4.8	33,40	2,550	2,45	2,91	
228	LwK 4.8	31,40	0,550	0,53	0,63	
229	LwK 4.8	30,51	-0,340	-0,33	-0,39	
230	LwK 4.8	31,71	0,860	0,83	0,98	
232	LwK 4.8	31,59	0,740	0,71	0,84	
234	LwK 4.8	30,97	0,120	0,12	0,14	
235	LwK 4.8	27,10	-3,750	-3,60	-4,28	
236	LwK 4.8	30,70	-0,150	-0,14	-0,17	
237	LwK 4.8	31,37	0,520	0,50	0,59	
240	LwK 4.8	30,41	-0,440	-0,42	-0,50	
241	LwK 4.8	31,54	0,690	0,66	0,79	
242	LwK 4.8	30,82	-0,030	-0,03	-0,03	
243	LwK 4.8	31,30	0,450	0,43	0,51	
244	LwK 4.8	32,53	1,680	1,61	1,92	
245	LwK 4.8	29,34	-1,510	-1,45	-1,72	
246	LwK 4.8	31,70	0,850	0,82	0,97	
248	LwK 4.8	32,30	1,450	1,39	1,66	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
249	LwK 4.8	33,57	2,720	2,61	3,11	
250	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
251	LwK 4.8	32,08	1,230	1,18	1,40	
253	LwK 4.8	31,10	0,250	0,24	0,29	
255	LwK 4.8	32,20	1,350	1,30	1,54	
256	LwK 4.8	32,84	1,990	1,91	2,27	
257	LwK 4.8	31,00	0,150	0,14	0,17	
258	LwK 4.8	35,40	4,550	4,37	5,19	(***)
259	LwK 4.8	31,70	0,850	0,82	0,97	
260	LwK 4.8	34,00	3,150	3,02	3,60	
261	LwK 4.8	29,87	-0,980	-0,94	-1,12	
262	LwK 4.8	31,40	0,550	0,53	0,63	
263	LwK 4.8	32,50	1,650	1,58	1,88	
264	LwK 4.8	32,59	1,740	1,67	1,99	
265	LwK 4.8	31,01	0,160	0,15	0,18	
266	LwK 4.8	31,94	1,090	1,05	1,24	
267	LwK 4.8	31,04	0,190	0,18	0,22	
269	LwK 4.8	31,41	0,560	0,54	0,64	
270	LwK 4.8	31,90	1,050	1,01	1,20	
271	LwK 4.8	33,23	2,380	2,29	2,72	
273	LwK 4.8	31,64	0,790	0,76	0,90	
274	LwK 4.8	32,14	1,290	1,24	1,47	
275	LwK 4.8	30,84	-0,010	-0,01	-0,01	
276	LwK 4.8	29,60	-1,250	-1,20	-1,43	
277	LwK 4.8	28,30	-2,550	-2,45	-2,91	
278	LwK 4.8	31,30	0,450	0,43	0,51	
280	LwK 4.8	33,61	2,760	2,65	3,15	
281	LwK 4.8	35,00	4,150	3,98	4,74	
282	LwK 4.8	34,30	3,450	3,31	3,94	
283	LwK 4.8	33,78	2,930	2,81	3,35	
284	LwK 4.8	34,46	3,610	3,47	4,12	
285	LwK 4.8	30,90	0,050	0,05	0,06	
286	LwK 4.8	31,02	0,170	0,16	0,19	
287	LwK 4.8	30,60	-0,250	-0,24	-0,29	
312	LwK 4.8	29,97	-0,880	-0,84	-1,00	
321	LwK 4.8	31,29	0,440	0,42	0,50	
328	LwK 4.8	31,49	0,640	0,61	0,73	
330	LwK 4.8	31,30	0,450	0,43	0,51	
337	LwK 4.8	32,08	1,230	1,18	1,40	

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

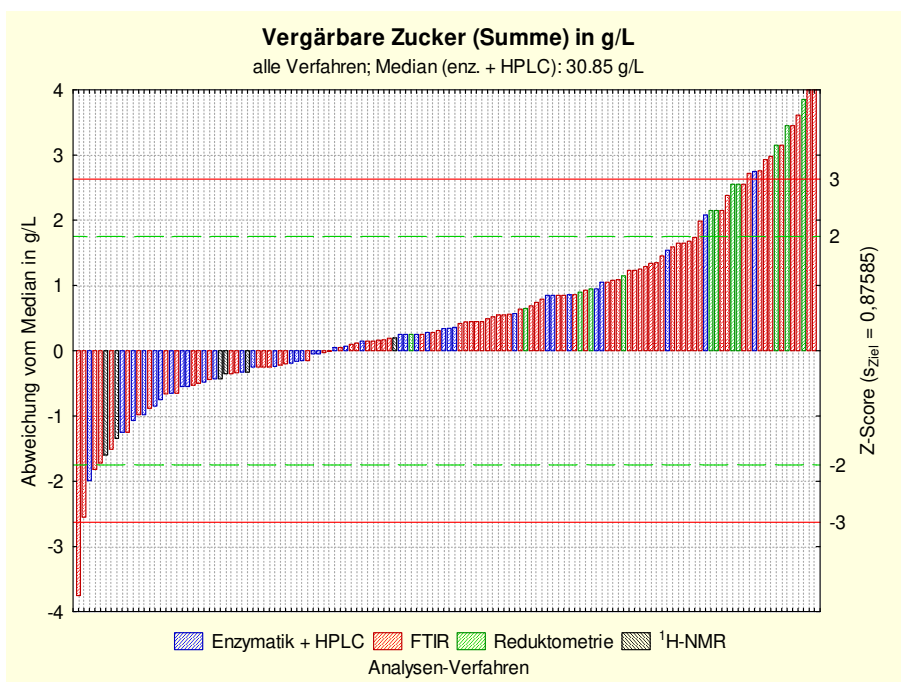
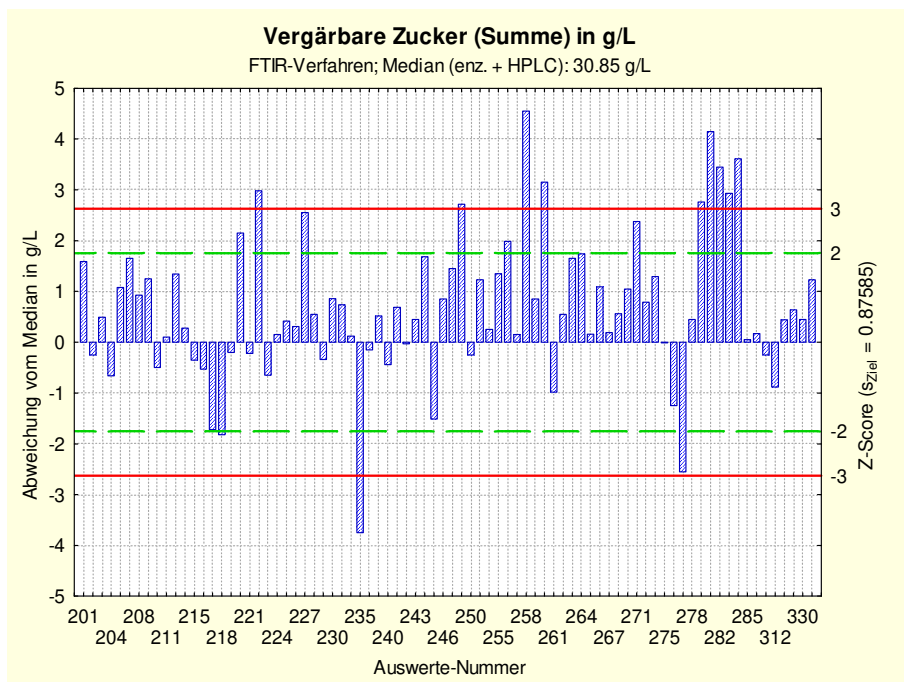
4.4.4 Deskriptive Ergebnisse

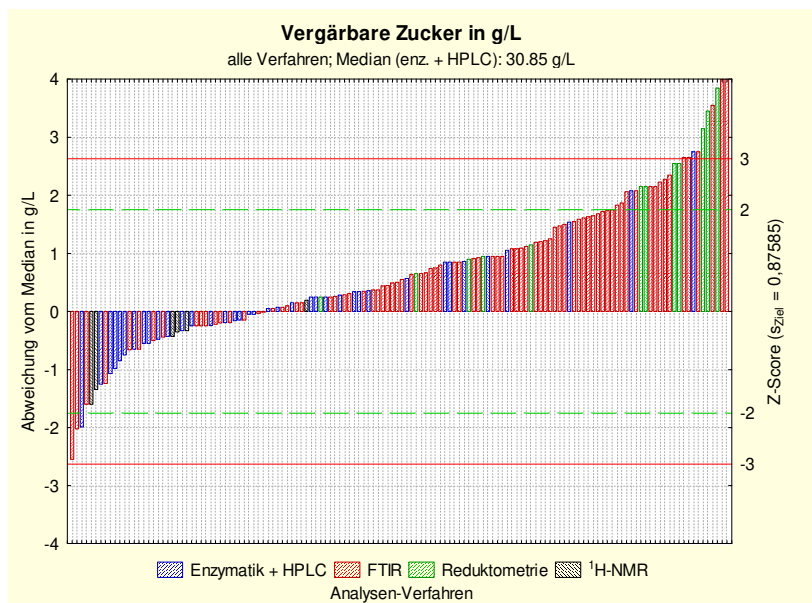
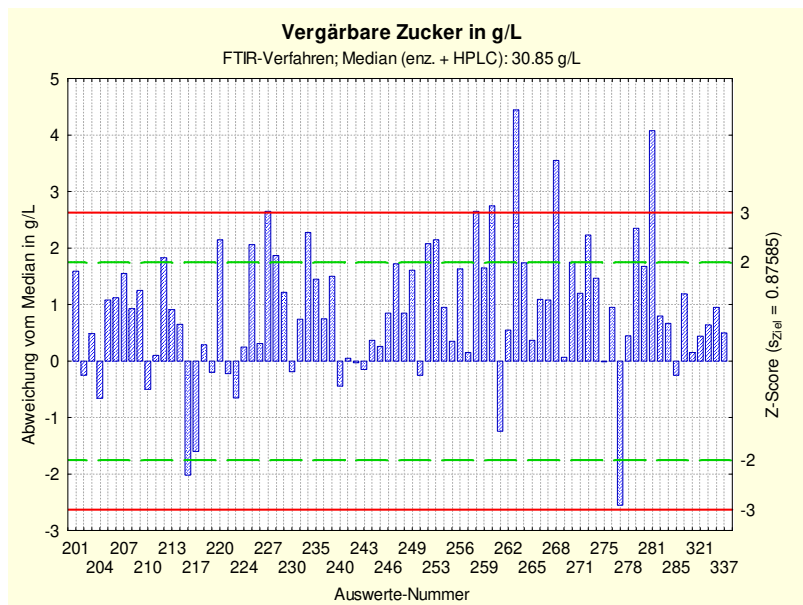
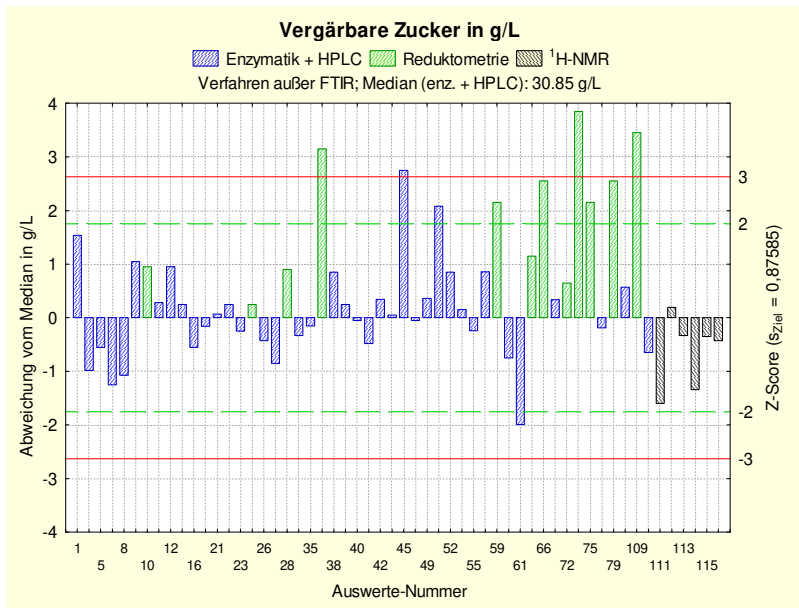
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L] nur enzymatische und HPLC-Verfahren	alle Daten
Gültige Werte	38
Minimalwert	28,86
Mittelwert	30,926
Median	30,850
Maximalwert	33,60
Standardabweichung (s_L)	0,899
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,146
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,042
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,876
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,584)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,86
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,03
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,54
Quotient (u_M/s_H)	0,14
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,25

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

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	31,800	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	33,700	0,481
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	9	32,750	1,423
		12	32,829	1,342
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	27	30,853	0,815
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	30,933	0,737
	enzymatische und HPLC-Verfahren	38	30,877	0,761
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	31,722	1,062
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	80	31,490	1,224
	Basis: Vergärbare Zucker(S)			
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	30,255	0,708





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	15,74	0,660	1,16	1,47	
02	enzymat., autom.	14,71	-0,370	-0,65	-0,82	
03	enzymat., autom.	14,60	-0,480	-0,85	-1,07	
04	enzymat., autom.	15,33	0,250	0,44	0,56	
05	enzymat., autom.	14,90	-0,180	-0,32	-0,40	
08	enzymat. Hand	14,72	-0,360	-0,63	-0,80	
09	HPLC	15,80	0,720	1,27	1,60	
10	enzymat., autom.	14,67	-0,410	-0,72	-0,91	
11	HPLC	15,46	0,380	0,67	0,84	
12	HPLC	15,50	0,420	0,74	0,93	
13	enzymat., autom.	15,17	0,090	0,16	0,20	
16	enzymat., autom.	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
19	enzymat., autom.	14,95	-0,130	-0,23	-0,29	
21	HPLC	15,06	-0,020	-0,04	-0,04	
22	HPLC	15,22	0,140	0,25	0,31	
23	HPLC	14,90	-0,180	-0,32	-0,40	
26	enzymat., autom.	14,86	-0,220	-0,39	-0,49	
27	HPLC	14,90	-0,180	-0,32	-0,40	
30	enzymat., autom.	14,72	-0,358	-0,63	-0,80	
35	enzymat., autom.	14,90	-0,180	-0,32	-0,40	
38	enzymat., autom.	15,19	0,110	0,19	0,24	
39	HPLC	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
40	enzymat., autom.	15,00	-0,076	-0,13	-0,17	
41	enzymat., autom.	14,79	-0,290	-0,51	-0,64	
42	enzymat., autom.	15,28	0,201	0,35	0,45	
44	enzymat., autom.	15,20	0,120	0,21	0,27	
45	enzymat., autom.	15,40	0,320	0,56	0,71	
46	enzymat., autom.	15,10	0,020	0,04	0,04	
49	enzymat., autom.	15,21	0,130	0,23	0,29	
51	enzymat., autom.	14,85	-0,230	-0,41	-0,51	
52	enzymat., autom.	15,35	0,270	0,48	0,60	
55	enzymat., autom.	15,13	0,050	0,09	0,11	
56	enzymat., autom.	15,22	0,138	0,24	0,31	
60	HPLC	15,20	0,120	0,21	0,27	
61	enzymat. Hand	14,34	-0,740	-1,31	-1,64	
68	enzymat., autom.	14,98	-0,100	-0,18	-0,22	
78	enzymat. Hand	15,46	0,380	0,67	0,84	
91	HPLC	15,14	0,060	0,11	0,13	
99	HPLC	15,349	0,269	0,47	0,60	
110	HPLC	14,60	-0,480	-0,85	-1,07	
111	NMR	14,23	-0,850	-1,50	-1,89	
112	NMR	15,23	0,155	0,27	0,34	
113	NMR	15,07	-0,010	-0,02	-0,02	
114	NMR	14,46	-0,616	-1,09	-1,37	
115	NMR	14,99	-0,090	-0,16	-0,20	
116	NMR	14,70	-0,382	-0,67	-0,85	
117	NMR	15,71	0,634	1,12	1,41	

4.5.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	15,121	0,383
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	15,009	0,252
enzymat. autom. 2	OIV-MA-AS313-29; enzymatisch, automatisiert	1	15,330	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	4	15,065	0,734
	herkömmliche Verfahren	40	15,067	0,312
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	15,359	0,703
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	14,927	0,531

4.5.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	15,35	0,270	0,48	0,60	
202	FTIR	14,73	-0,350	-0,62	-0,78	
203	FTIR	14,68	-0,400	-0,71	-0,89	
204	FTIR	14,34	-0,740	-1,31	-1,64	
205	FTIR	15,89	0,810	1,43	1,80	
207	FTIR	15,30	0,220	0,39	0,49	
208	FTIR	15,47	0,390	0,69	0,87	
209	FTIR	16,00	0,920	1,62	2,04	
210	FTIR	15,15	0,070	0,12	0,16	
211	FTIR	15,25	0,170	0,30	0,38	
212	FTIR	15,27	0,190	0,34	0,42	
213	FTIR	15,29	0,210	0,37	0,47	
215	FTIR	15,70	0,620	1,09	1,38	
216	FTIR	14,80	-0,280	-0,49	-0,62	
217	FTIR	14,30	-0,780	-1,38	-1,73	
218	FTIR	14,30	-0,780	-1,38	-1,73	
219	FTIR	14,73	-0,350	-0,62	-0,78	
220	FTIR	17,00	1,920	3,39	4,27	
221	FTIR	14,91	-0,170	-0,30	-0,38	
222	FTIR	15,77	0,690	1,22	1,53	
223	FTIR	14,30	-0,780	-1,38	-1,73	
224	FTIR	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
225	FTIR	15,21	0,130	0,23	0,29	
226	FTIR	15,33	0,250	0,44	0,56	
227	FTIR	16,00	0,920	1,62	2,04	
228	FTIR	16,26	1,180	2,08	2,62	
229	FTIR	14,83	-0,250	-0,44	-0,56	
230	FTIR	15,20	0,120	0,21	0,27	
232	FTIR	15,69	0,610	1,08	1,36	
234	FTIR	15,45	0,370	0,65	0,82	
235	FTIR	14,10	-0,980	-1,73	-2,18	
236	FTIR	15,50	0,420	0,74	0,93	
237	FTIR	16,73	1,650	2,91	3,67	
240	FTIR	15,08	0,000	0,00	0,00	
241	FTIR	14,94	-0,140	-0,25	-0,31	
242	FTIR	14,68	-0,400	-0,71	-0,89	
243	FTIR	15,20	0,120	0,21	0,27	
244	FTIR	15,33	0,250	0,44	0,56	
245	FTIR	14,41	-0,670	-1,18	-1,49	
246	FTIR	15,70	0,620	1,09	1,38	
248	FTIR	15,60	0,520	0,92	1,16	
249	FTIR	16,55	1,470	2,59	3,27	
250	FTIR	14,90	-0,180	-0,32	-0,40	
251	FTIR	15,66	0,580	1,02	1,29	
253	FTIR	15,80	0,720	1,27	1,60	
255	FTIR	14,80	-0,280	-0,49	-0,62	
256	FTIR	16,64	1,560	2,75	3,47	
257	FTIR	15,30	0,220	0,39	0,49	
258	FTIR	17,20	2,120	3,74	4,71	
259	FTIR	15,70	0,620	1,09	1,38	
260	FTIR	17,20	2,120	3,74	4,71	
261	FTIR	14,52	-0,560	-0,99	-1,24	
262	FTIR	15,80	0,720	1,27	1,60	
263	FTIR	15,40	0,320	0,56	0,71	
264	FTIR	16,22	1,140	2,01	2,53	
265	FTIR	14,81	-0,270	-0,48	-0,60	
266	FTIR	15,88	0,800	1,41	1,78	
267	FTIR	15,35	0,270	0,48	0,60	
269	FTIR	16,27	1,190	2,10	2,64	
270	FTIR	15,18	0,100	0,18	0,22	
271	FTIR	15,74	0,660	1,16	1,47	
273	FTIR	15,50	0,420	0,74	0,93	
274	FTIR	15,34	0,260	0,46	0,58	
275	FTIR	16,01	0,930	1,64	2,07	
276	FTIR	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
277	FTIR	14,30	-0,780	-1,38	-1,73	

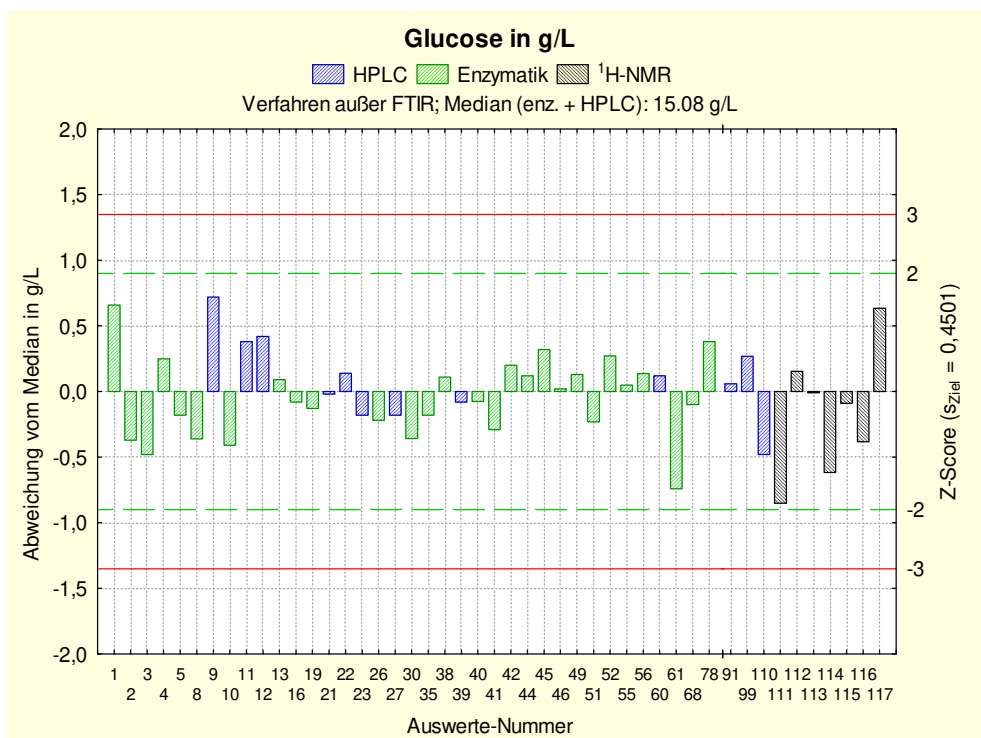
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

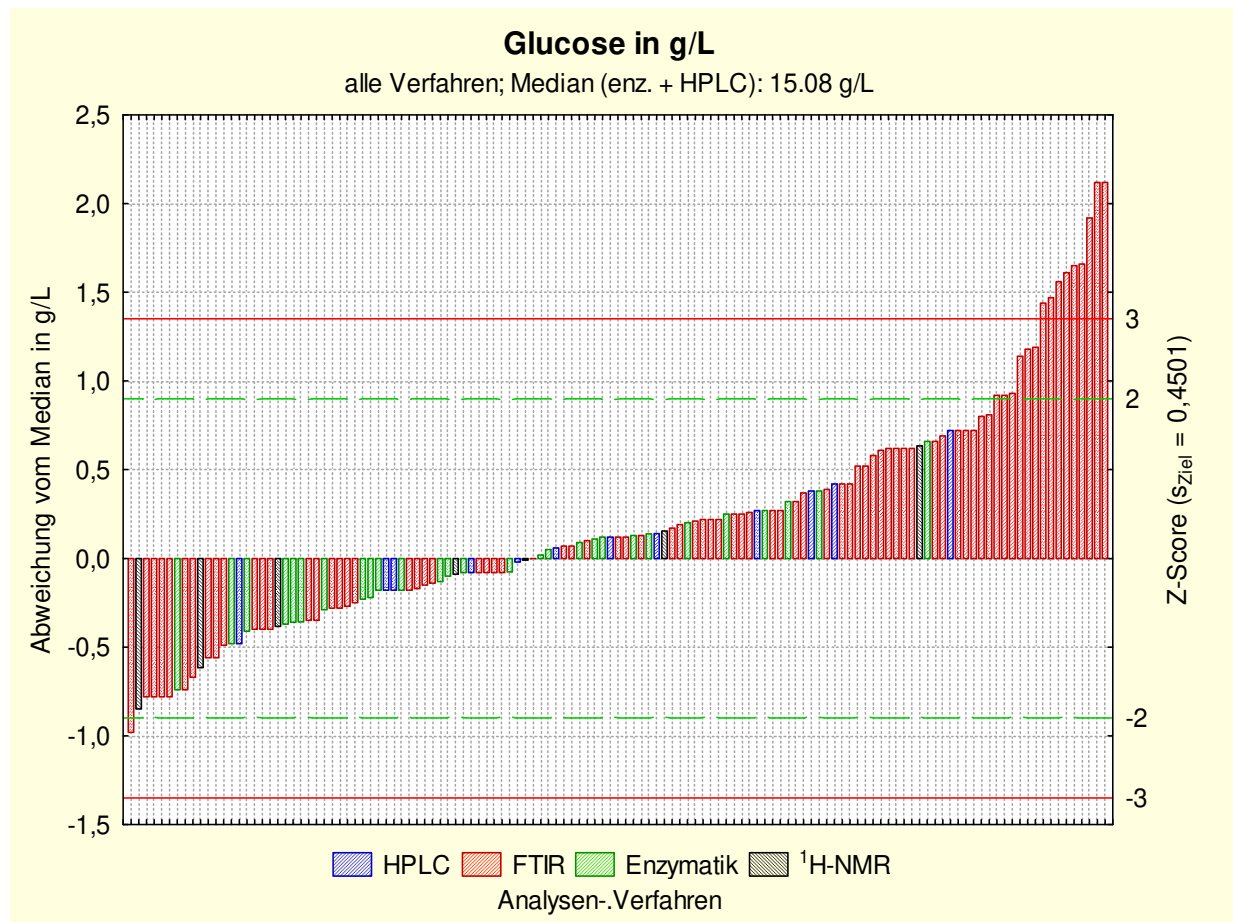
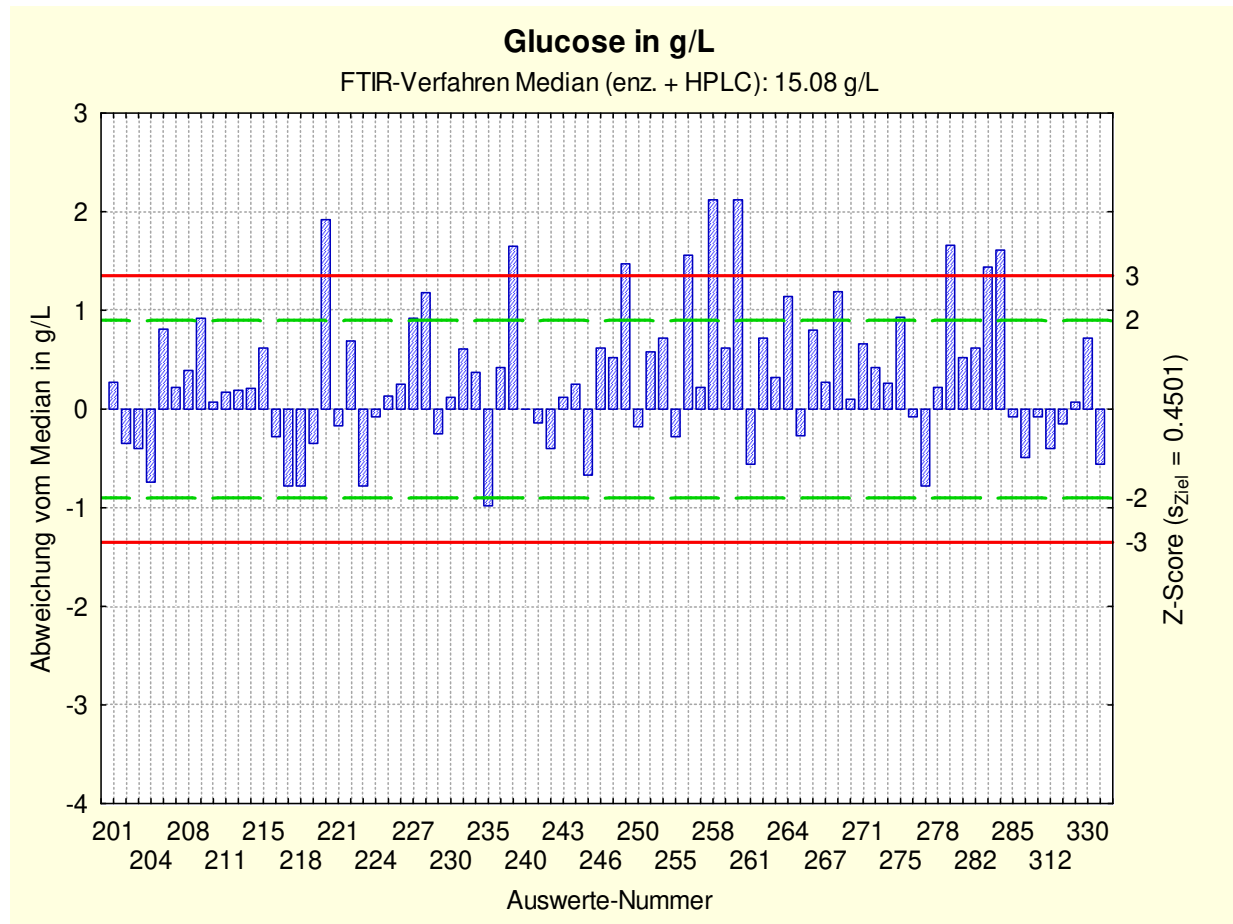
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	15,30	0,220	0,39	0,49	
280	FTIR	16,74	1,660	2,93	3,69	
281	FTIR	15,60	0,520	0,92	1,16	
282	FTIR	15,70	0,620	1,09	1,38	
283	FTIR	16,52	1,440	2,54	3,20	
284	FTIR	16,69	1,610	2,84	3,58	
285	FTIR	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
286	FTIR	14,59	-0,490	-0,86	-1,09	
287	FTIR	15,00	-0,080	-0,14	-0,18	
312	FTIR	14,68	-0,400	-0,71	-0,89	
321	FTIR	14,93	-0,150	-0,26	-0,33	
328	FTIR	15,15	0,070	0,12	0,16	
330	FTIR	15,80	0,720	1,27	1,60	
337	FTIR	14,52	-0,560	-0,99	-1,24	

4.5.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	40
Minimalwert	14,34
Mittelwert	15,073
Median	15,080
Maximalwert	15,80
Standardabweichung (s _L)	0,313
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,049
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,567
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,450
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	(0,408)
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,55
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,69
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	(0,77)
Quotient (u _M /s _H)	0,09
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,11
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	(0,12)

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





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	16,65	0,868	1,47	1,85	
02	enzymat., autom.	15,16	-0,622	-1,06	-1,33	
04	enzymat., autom.	15,58	-0,202	-0,34	-0,43	
05	enzymat., autom.	15,40	-0,382	-0,65	-0,81	
08	enzymat. Hand	15,06	-0,722	-1,23	-1,54	
09	HPLC	16,10	0,318	0,54	0,68	
10	enzymat., autom.	14,66	-1,122	-1,90	-2,39	
11	HPLC	15,67	-0,112	-0,19	-0,24	
12	HPLC	16,30	0,518	0,88	1,10	
13	enzymat., autom.	15,95	0,168	0,29	0,36	
16	enzymat., autom.	15,30	-0,482	-0,82	-1,03	
19	enzymat., autom.	15,74	-0,042	-0,07	-0,09	
21	HPLC	15,86	0,078	0,13	0,17	
22	HPLC	15,88	0,098	0,17	0,21	
23	HPLC	15,70	-0,082	-0,14	-0,17	
26	enzymat., autom.	15,56	-0,222	-0,38	-0,47	
27	HPLC	15,10	-0,682	-1,16	-1,45	
30	enzymat., autom.	15,63	-0,157	-0,27	-0,33	
35	enzymat., autom.	15,80	0,018	0,03	0,04	
38	enzymat., autom.	16,53	0,748	1,27	1,59	
39	HPLC	16,10	0,318	0,54	0,68	
40	enzymat., autom.	15,84	0,061	0,10	0,13	
41	enzymat., autom.	15,58	-0,202	-0,34	-0,43	
42	enzymat., autom.	15,78	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	15,70	-0,082	-0,14	-0,17	
45	enzymat., autom.	18,20	2,418	4,10	5,16	(**)
46	enzymat., autom.	15,80	0,018	0,03	0,04	
49	enzymat., autom.	16,00	0,218	0,37	0,46	
51	enzymat., autom.	15,78	-0,002	-0,00	-0,00	
52	enzymat., autom.	16,25	0,468	0,79	1,00	
55	enzymat., autom.	15,48	-0,302	-0,51	-0,64	
56	enzymat., autom.	16,18	0,397	0,67	0,85	
60	HPLC	16,10	0,318	0,54	0,68	
61	enzymat. Hand	14,52	-1,262	-2,14	-2,69	
68	enzymat., autom.	15,86	0,078	0,13	0,17	
78	enzymat. Hand	15,19	-0,592	-1,00	-1,26	
91	HPLC	16,66	0,878	1,49	1,87	
99	HPLC	16,069	0,287	0,49	0,61	
111	NMR	15,02	-0,762	-1,29	-1,62	
112	NMR	15,81	0,028	0,05	0,06	
113	NMR	15,45	-0,332	-0,56	-0,71	
114	NMR	15,04	-0,738	-1,25	-1,57	
115	NMR	15,51	-0,272	-0,46	-0,58	
116	NMR	15,72	-0,060	-0,10	-0,13	
117	NMR	14,48	-1,305	-2,21	-2,78	

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

4.6.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	15,975	0,328
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	22	15,758	0,375
enzymat. autom. 2	OIV-MA-AS313-29; enzymatisch, automatisiert	1	15,580	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	4	15,337	0,994
	herkömmliche Verfahren	38	15,780	0,474
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	16,096	0,918
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	15,296	0,520

4.6.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	17,09	1,308	2,22	2,79	
202	FTIR	15,87	0,088	0,15	0,19	
203	FTIR	16,66	0,878	1,49	1,87	
204	FTIR	15,85	0,068	0,12	0,14	
205	FTIR	16,04	0,258	0,44	0,55	
207	FTIR	17,20	1,418	2,41	3,02	
208	FTIR	16,31	0,528	0,90	1,13	
209	FTIR	16,10	0,318	0,54	0,68	
210	FTIR	15,20	-0,582	-0,99	-1,24	
211	FTIR	15,70	-0,082	-0,14	-0,17	
212	FTIR	16,92	1,138	1,93	2,43	
213	FTIR	15,84	0,058	0,10	0,12	
215	FTIR	14,80	-0,982	-1,67	-2,09	
216	FTIR	15,52	-0,262	-0,44	-0,56	
217	FTIR	14,83	-0,952	-1,62	-2,03	
218	FTIR	14,73	-1,052	-1,78	-2,24	
219	FTIR	15,92	0,138	0,23	0,29	
220	FTIR	16,00	0,218	0,37	0,46	
221	FTIR	15,72	-0,062	-0,11	-0,13	
222	FTIR	18,06	2,278	3,87	4,86	
223	FTIR	15,90	0,118	0,20	0,25	
224	FTIR	16,00	0,218	0,37	0,46	
225	FTIR	16,06	0,278	0,47	0,59	
226	FTIR	15,83	0,048	0,08	0,10	
227	FTIR	17,40	1,618	2,75	3,45	
228	FTIR	15,14	-0,642	-1,09	-1,37	
229	FTIR	15,68	-0,102	-0,17	-0,22	
230	FTIR	16,51	0,728	1,24	1,55	
232	FTIR	15,90	0,118	0,20	0,25	
234	FTIR	15,52	-0,262	-0,44	-0,56	
235	FTIR	13,00	-2,782	-4,72	-5,93	(***)
236	FTIR	15,20	-0,582	-0,99	-1,24	
237	FTIR	14,64	-1,142	-1,94	-2,43	
240	FTIR	15,33	-0,452	-0,77	-0,96	
241	FTIR	16,60	0,818	1,39	1,74	
242	FTIR	16,14	0,358	0,61	0,76	
243	FTIR	16,10	0,318	0,54	0,68	
244	FTIR	17,20	1,418	2,41	3,02	
245	FTIR	14,93	-0,852	-1,45	-1,82	
246	FTIR	16,00	0,218	0,37	0,46	
248	FTIR	16,70	0,918	1,56	1,96	
249	FTIR	17,02	1,238	2,10	2,64	
250	FTIR	15,70	-0,082	-0,14	-0,17	
251	FTIR	16,42	0,638	1,08	1,36	
253	FTIR	15,30	-0,482	-0,82	-1,03	
255	FTIR	17,40	1,618	2,75	3,45	
256	FTIR	16,20	0,418	0,71	0,89	
257	FTIR	15,70	-0,082	-0,14	-0,17	
258	FTIR	18,20	2,418	4,10	5,16	(***)
259	FTIR	16,00	0,218	0,37	0,46	
260	FTIR	16,80	1,018	1,73	2,17	
261	FTIR	15,35	-0,432	-0,73	-0,92	
262	FTIR	15,60	-0,182	-0,31	-0,39	
263	FTIR	17,10	1,318	2,24	2,81	
264	FTIR	16,37	0,588	1,00	1,25	
265	FTIR	16,20	0,418	0,71	0,89	
266	FTIR	16,06	0,278	0,47	0,59	
267	FTIR	15,69	-0,092	-0,16	-0,20	
269	FTIR	15,14	-0,642	-1,09	-1,37	
270	FTIR	16,72	0,938	1,59	2,00	
271	FTIR	17,49	1,708	2,90	3,64	
273	FTIR	16,14	0,358	0,61	0,76	
274	FTIR	16,80	1,018	1,73	2,17	
275	FTIR	14,83	-0,952	-1,62	-2,03	
276	FTIR	14,60	-1,182	-2,01	-2,52	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

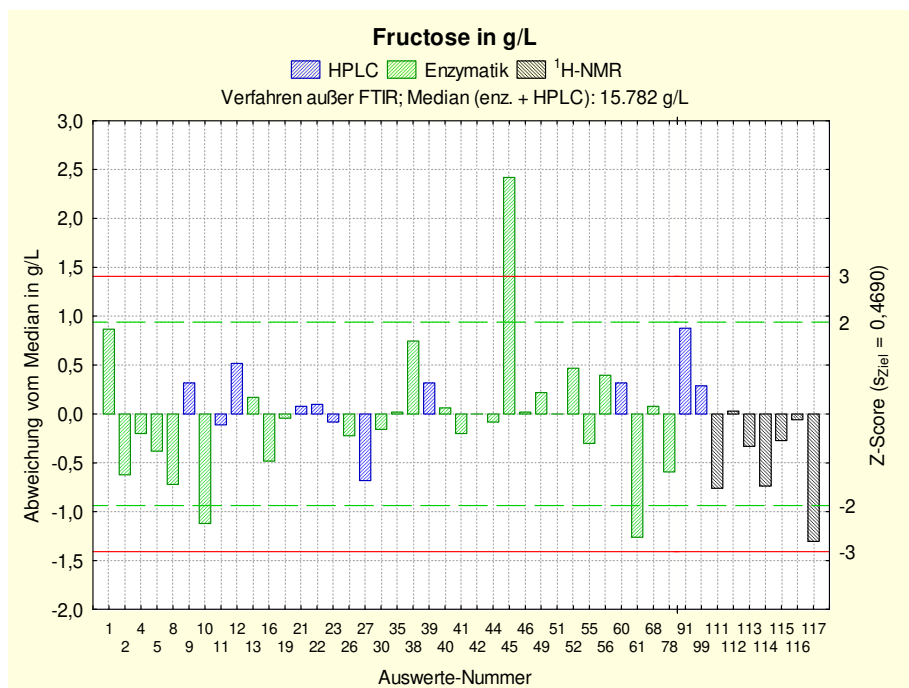
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	14,00	-1,782	-3,02	-3,80	
278	FTIR	16,00	0,218	0,37	0,46	
280	FTIR	16,87	1,088	1,85	2,32	
281	FTIR	19,40	3,618	6,14	7,71	(***)
282	FTIR	18,60	2,818	4,78	6,01	(***)
283	FTIR	17,26	1,478	2,51	3,15	
284	FTIR	17,77	1,988	3,37	4,24	
285	FTIR	15,90	0,118	0,20	0,25	
286	FTIR	16,43	0,648	1,10	1,38	
287	FTIR	15,60	-0,182	-0,31	-0,39	
312	FTIR	15,29	-0,492	-0,83	-1,05	
321	FTIR	16,36	0,578	0,98	1,23	
328	FTIR	16,34	0,558	0,95	1,19	
330	FTIR	15,50	-0,282	-0,48	-0,60	
337	FTIR	17,56	1,778	3,02	3,79	

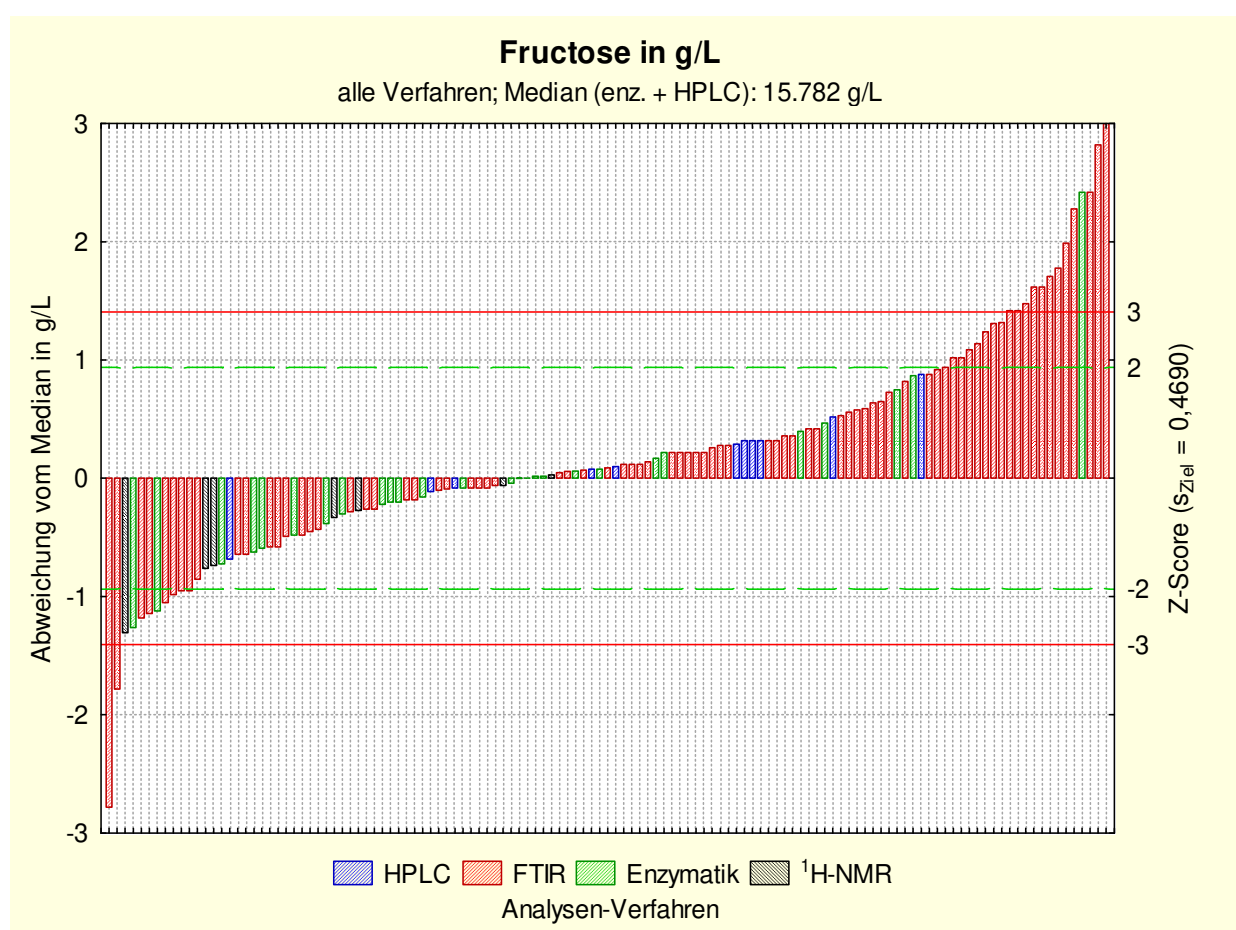
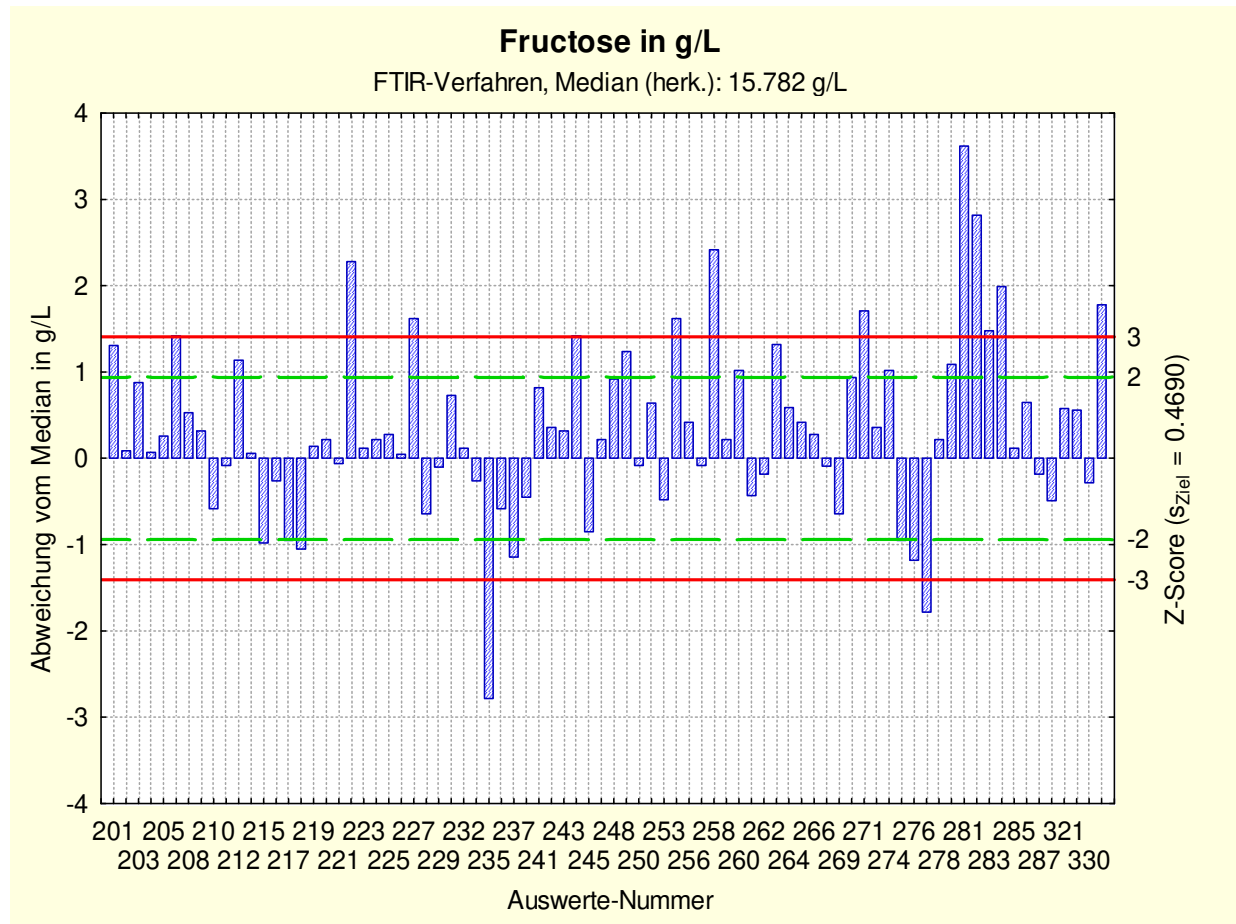
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

4.6.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	38	37
Minimalwert	14,52	14,52
Mittelwert	15,808	15,744
Median	15,791	15,782
Maximalwert	18,20	16,66
Standardabweichung (s _L)	0,621	0,483
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,101	0,079
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,590	0,589
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,469	0,469
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,330)	(0,330)
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,05	0,82
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,32	1,03
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(1,88)	(1,46)
Quotient (u _M /s _H)	0,17	0,13
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,21	0,17
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,31)	(0,24)

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





4.7 Glycerin [g/L]

4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	8,99	0,662	1,93	
02	enzymat. autom.	8,30	-0,027	-0,08	
04	enzymat. autom.	8,06	-0,268	-0,78	
05	enzymat. autom.	8,19	-0,138	-0,40	
06	enzymat. Hand	8,58	0,252	0,74	
08	HPLC	9,28	0,952	2,78	
09	enzymat. autom.	7,41	-0,918	-2,68	
10	enzymat. Hand	8,11	-0,218	-0,64	
11	HPLC	8,30	-0,027	-0,08	
21	HPLC	8,09	-0,238	-0,69	
22	HPLC	8,24	-0,088	-0,26	
23	HPLC	8,40	0,072	0,21	
27	HPLC	9,10	0,772	2,26	
39	HPLC	8,74	0,412	1,20	
42	HPLC	8,36	0,027	0,08	
60	HPLC	8,40	0,072	0,21	
61	enzymat. Hand	7,72	-0,608	-1,77	
78	enzymat. Hand	7,79	-0,538	-1,57	
91	HPLC	8,70	0,372	1,09	
99	HPLC	8,377	0,050	0,14	
111	NMR	8,77	0,439	1,28	
112	NMR	8,60	0,277	0,81	
113	NMR	8,33	0,002	0,01	
114	NMR	8,69	0,363	1,06	
115	NMR	8,40	0,072	0,21	
116	NMR	8,81	0,485	1,42	

4.7.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	8,29	-0,038	-0,11	-0,11	
202	FTIR	7,86	-0,468	-1,37	-1,34	
203	FTIR	8,41	0,082	0,24	0,24	
205	FTIR	8,17	-0,158	-0,46	-0,45	
206	FTIR	7,14	-1,188	-3,47	-3,41	
207	FTIR	8,80	0,473	1,38	1,36	
208	FTIR	8,36	0,032	0,09	0,09	
210	FTIR	8,83	0,502	1,47	1,44	
211	FTIR	8,28	-0,053	-0,15	-0,15	
212	FTIR	7,64	-0,688	-2,01	-1,98	
213	FTIR	7,80	-0,528	-1,54	-1,52	
215	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
216	FTIR	8,84	0,512	1,50	1,47	
217	FTIR	9,46	1,133	3,31	3,25	
218	FTIR	6,84	-1,488	-4,34	-4,27	
219	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
220	FTIR	9,70	1,372	4,01	3,94	
221	FTIR	8,69	0,362	1,06	1,04	
222	FTIR	8,95	0,622	1,82	1,79	
223	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
224	FTIR	8,00	-0,328	-0,96	-0,94	
225	FTIR	8,10	-0,228	-0,66	-0,65	
226	FTIR	8,50	0,172	0,50	0,50	
227	FTIR	8,60	0,272	0,80	0,78	
228	FTIR	8,60	0,272	0,80	0,78	
229	FTIR	8,27	-0,058	-0,17	-0,17	
230	FTIR	9,86	1,532	4,48	4,40	
232	FTIR	7,97	-0,358	-1,04	-1,03	
234	FTIR	8,44	0,112	0,33	0,32	
236	FTIR	7,80	-0,528	-1,54	-1,52	
237	FTIR	9,34	1,012	2,96	2,91	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

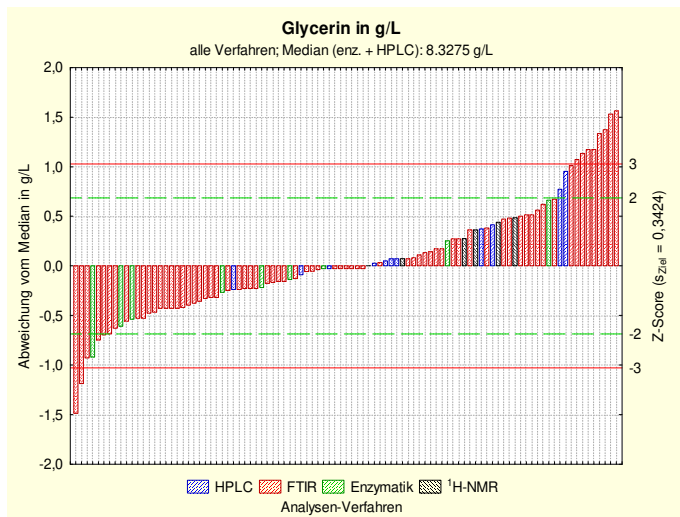
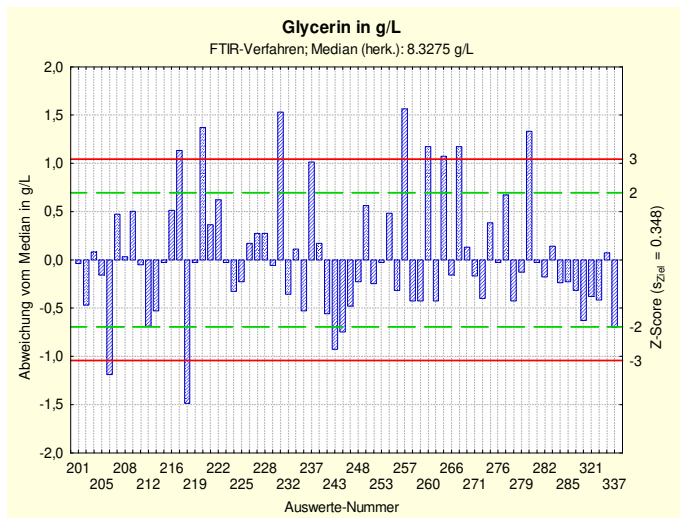
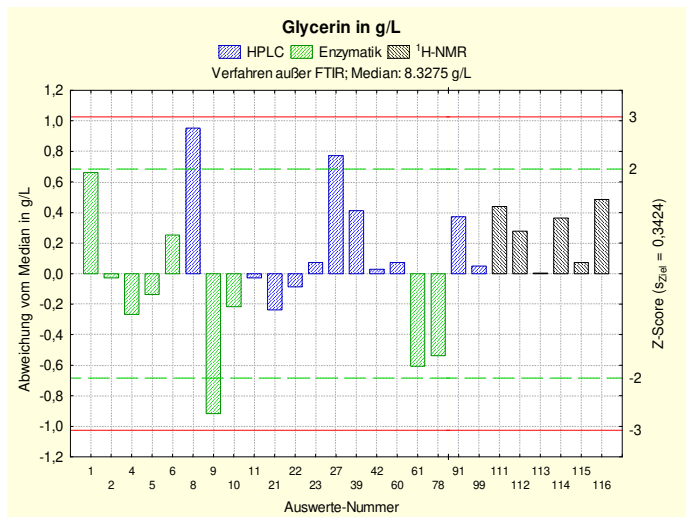
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
240	FTIR	8,50	0,172	0,50	0,50	
241	FTIR	7,77	-0,558	-1,63	-1,60	
243	FTIR	7,40	-0,928	-2,71	-2,67	
244	FTIR	7,58	-0,748	-2,18	-2,15	
245	FTIR	7,85	-0,478	-1,39	-1,37	
248	FTIR	8,10	-0,228	-0,66	-0,65	
249	FTIR	8,89	0,563	1,64	1,62	
251	FTIR	8,08	-0,248	-0,72	-0,71	
253	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
255	FTIR	8,81	0,482	1,41	1,39	
256	FTIR	8,01	-0,318	-0,93	-0,91	
257	FTIR	9,89	1,563	4,56	4,49	
258	FTIR	7,90	-0,428	-1,25	-1,23	
259	FTIR	7,90	-0,428	-1,25	-1,23	
260	FTIR	9,50	1,172	3,42	3,37	
262	FTIR	7,90	-0,428	-1,25	-1,23	
265	FTIR	9,40	1,072	3,13	3,08	
266	FTIR	8,17	-0,158	-0,46	-0,45	
267	FTIR	9,50	1,172	3,42	3,37	
270	FTIR	8,46	0,133	0,39	0,38	
271	FTIR	8,16	-0,168	-0,49	-0,48	
273	FTIR	7,93	-0,398	-1,16	-1,14	
274	FTIR	8,71	0,383	1,12	1,10	
276	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
277	FTIR	9,00	0,672	1,96	1,93	
278	FTIR	7,90	-0,428	-1,25	-1,23	
279	FTIR	8,20	-0,128	-0,37	-0,37	
280	FTIR	9,66	1,332	3,89	3,83	
281	FTIR	8,30	-0,027	-0,08	-0,08	
282	FTIR	8,15	-0,178	-0,52	-0,51	
283	FTIR	8,47	0,143	0,42	0,41	
284	FTIR	8,09	-0,238	-0,69	-0,68	
285	FTIR	8,10	-0,228	-0,66	-0,65	
286	FTIR	8,01	-0,318	-0,93	-0,91	
287	FTIR	7,70	-0,628	-1,83	-1,80	
321	FTIR	7,95	-0,378	-1,10	-1,08	
328	FTIR	7,91	-0,418	-1,22	-1,20	
330	FTIR	8,40	0,072	0,21	0,21	
337	FTIR	7,63	-0,698	-2,04	-2,00	

4.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	20
Minimalwert	7,41
Mittelwert	8,357
Median	8,328
Maximalwert	9,28
Standardabweichung (s_L)	0,460
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,103
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,342
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,34
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,32
Quotient (u_M/s_H)	0,30
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,30

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	8,469	0,435
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	4	7,998	0,434
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	8,236	0,608
	herkömmliche Verfahren mit Ausreißer	21	8,316	0,495
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	8,322	0,546
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	8,601	0,223



4.8 pH-Wert

4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,60	0,050	1,05	
02	potentiometr.	3,54	-0,010	-0,21	
04	potentiometr.	3,60	0,050	1,05	
05	potentiometr.	3,52	-0,025	-0,53	
06	potentiometr.	3,58	0,030	0,63	
08	potentiometr.	3,55	0,000	0,00	
09	potentiometr.	3,61	0,060	1,26	
10	potentiometr.	3,58	0,030	0,63	
11	potentiometr.	3,47	-0,080	-1,68	
12	potentiometr.	3,44	-0,110	-2,31	
13	potentiometr.	3,57	0,020	0,42	
16	potentiometr.	3,56	0,010	0,21	
19	potentiometr.	3,55	0,000	0,00	
21	potentiometr.	3,55	0,000	0,00	
22	potentiometr.	3,51	-0,040	-0,84	
23	potentiometr.	3,55	0,000	0,00	
26	k. A.	3,67	0,120	2,52	
27	potentiometr.	3,64	0,090	1,89	
28	potentiometr.	3,58	0,030	0,63	
30	potentiometr.	3,48	-0,070	-1,47	
35	potentiometr.	3,45	-0,100	-2,10	
37	potentiometr.	3,50	-0,050	-1,05	
38	potentiometr.	3,52	-0,030	-0,63	
39	potentiometr.	3,58	0,030	0,63	
40	potentiometr.	3,59	0,035	0,74	
41	potentiometr.	3,47	-0,080	-1,68	
44	potentiometr.	3,54	-0,010	-0,21	
45	potentiometr.	3,48	-0,070	-1,47	
46	potentiometr.	3,35	-0,200	-4,20	
49	potentiometr.	3,56	0,010	0,21	
51	potentiometr.	3,51	-0,040	-0,84	
52	potentiometr.	3,43	-0,120	-2,52	
55	potentiometr.	3,58	0,030	0,63	
56	potentiometr.	3,55	0,000	0,00	
59	potentiometr.	3,59	0,040	0,84	
60	potentiometr.	3,50	-0,050	-1,05	
61	potentiometr.	3,53	-0,020	-0,42	
63	potentiometr.	3,62	0,070	1,47	
68	potentiometr.	3,48	-0,070	-1,47	
72	potentiometr.	3,46	-0,090	-1,89	
73	potentiometr.	3,75	0,200	4,20	
75	potentiometr.	3,62	0,070	1,47	
78	potentiometr.	3,69	0,140	2,94	
79	potentiometr.	3,57	0,020	0,42	
94	potentiometr.	3,51	-0,040	-0,84	
110	potentiometr.	3,60	0,050	1,05	

4.8.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
202	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
203	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
204	FTIR	3,60	0,050	1,01	
205	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
206	FTIR	3,55	0,000	0,00	
207	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
208	FTIR	3,56	0,010	0,20	
210	FTIR	3,34	-0,210	-4,26	
211	FTIR	3,57	0,020	0,41	
212	FTIR	3,57	0,020	0,41	
213	FTIR	3,58	0,030	0,61	
215	FTIR	3,57	0,020	0,41	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	3,61	0,060	1,22	
217	FTIR	3,57	0,020	0,41	
218	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
219	FTIR	3,57	0,020	0,41	
220	FTIR	3,68	0,130	2,64	
221	FTIR	3,56	0,010	0,20	
222	FTIR	3,62	0,070	1,42	
223	FTIR	3,59	0,040	0,81	
224	FTIR	3,60	0,050	1,01	
225	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
226	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
227	FTIR	3,64	0,090	1,83	
228	FTIR	3,59	0,040	0,81	
229	FTIR	3,60	0,050	1,01	
230	FTIR	3,57	0,020	0,41	
232	FTIR	3,63	0,080	1,62	
234	FTIR	3,58	0,030	0,61	
235	FTIR	3,34	-0,210	-4,26	
236	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
237	FTIR	3,62	0,070	1,42	
240	FTIR	3,58	0,030	0,61	
241	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
242	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
243	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
244	FTIR	3,51	-0,040	-0,81	
245	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
246	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
248	FTIR	3,51	-0,040	-0,81	
249	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
250	FTIR	3,65	0,100	2,03	
251	FTIR	3,53	-0,020	-0,41	
253	FTIR	3,57	0,020	0,41	
255	FTIR	3,61	0,060	1,22	
256	FTIR	3,56	0,010	0,20	
257	FTIR	3,47	-0,080	-1,62	
258	FTIR	3,48	-0,070	-1,42	
259	FTIR	3,71	0,160	3,25	
260	FTIR	3,55	0,000	0,00	
262	FTIR	3,59	0,040	0,81	
263	FTIR	3,59	0,040	0,81	
264	FTIR	3,56	0,010	0,20	
265	FTIR	3,29	-0,260	-5,27	(***)
266	FTIR	3,61	0,060	1,22	
267	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
268	FTIR	3,32	-0,230	-4,67	
269	FTIR	3,65	0,100	2,03	
270	FTIR	3,32	-0,230	-4,67	
271	FTIR	3,47	-0,080	-1,62	
273	FTIR	3,67	0,120	2,43	
274	FTIR	3,57	0,020	0,41	
275	FTIR	3,60	0,050	1,01	
276	FTIR	3,36	-0,190	-3,85	
277	FTIR	3,57	0,020	0,41	
278	FTIR	3,59	0,040	0,81	
279	FTIR	3,49	-0,060	-1,22	
280	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
281	FTIR	3,41	-0,140	-2,84	
282	FTIR	3,48	-0,070	-1,42	
283	FTIR	3,50	-0,050	-1,01	
284	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
285	FTIR	3,30	-0,250	-5,07	(***)
286	FTIR	3,58	0,030	0,61	
287	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
321	FTIR	3,52	-0,030	-0,61	
328	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
330	FTIR	3,54	-0,010	-0,20	
337	FTIR	3,55	0,000	0,00	

Anmerkung zur vorseitigen Tabelle:

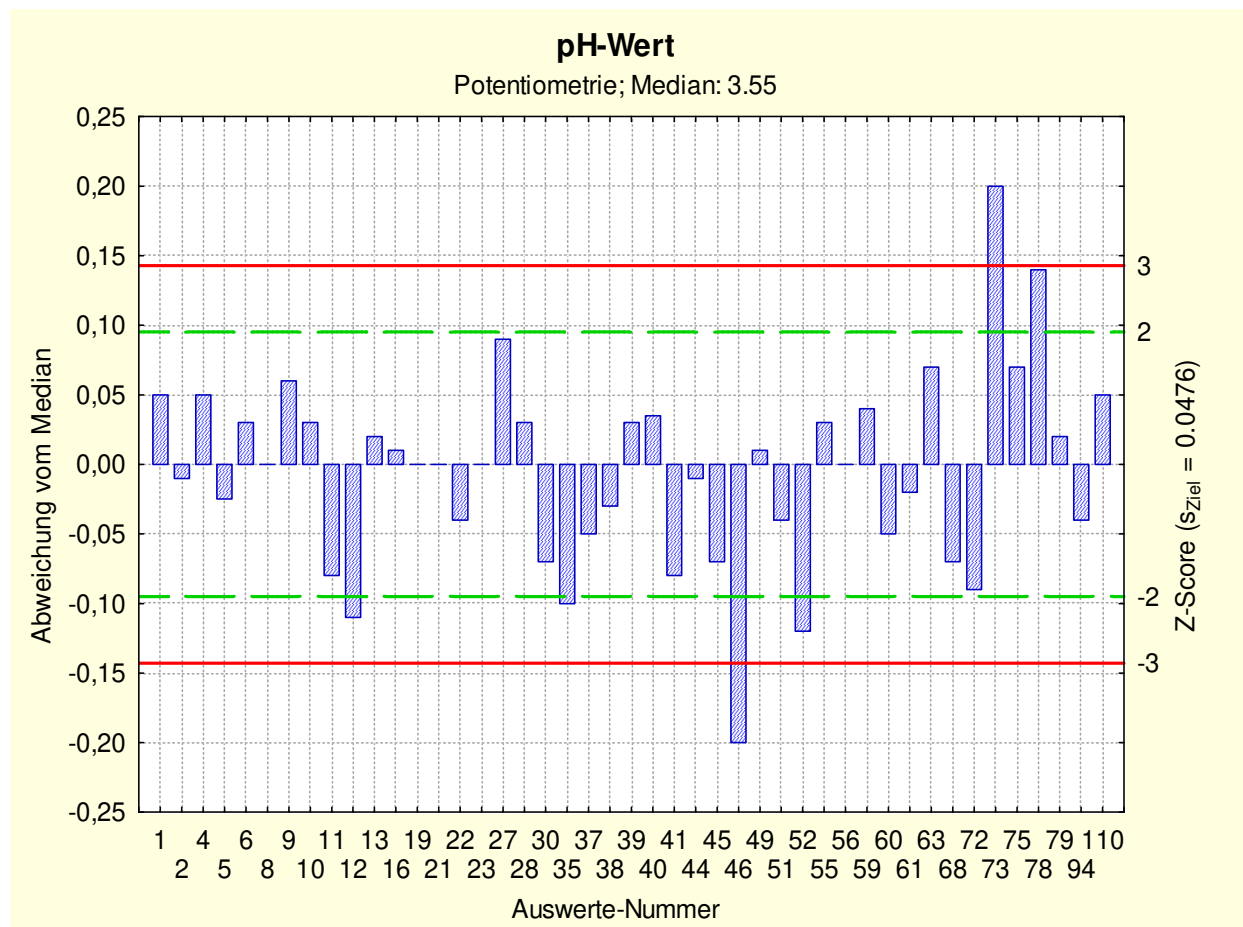
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der potentiometrischen Werte ab.

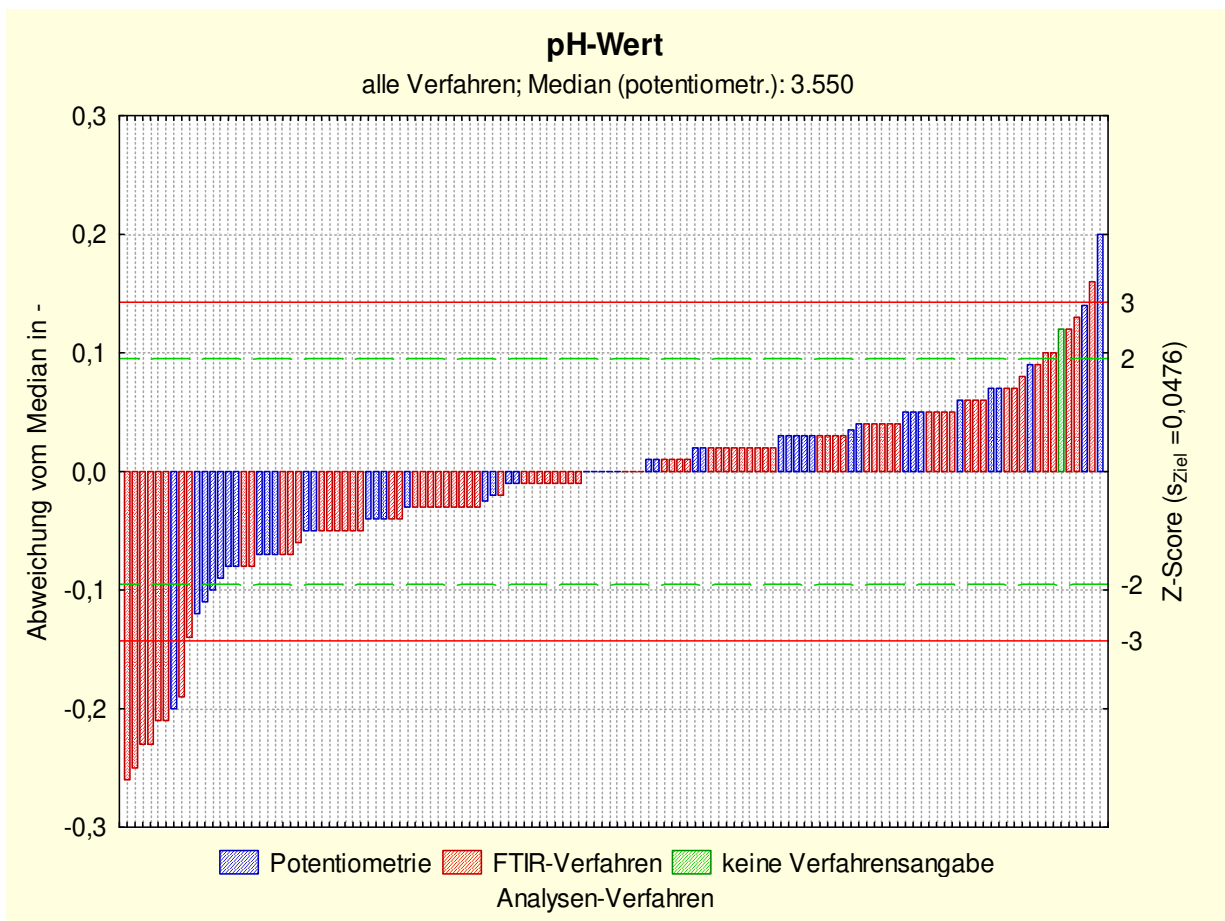
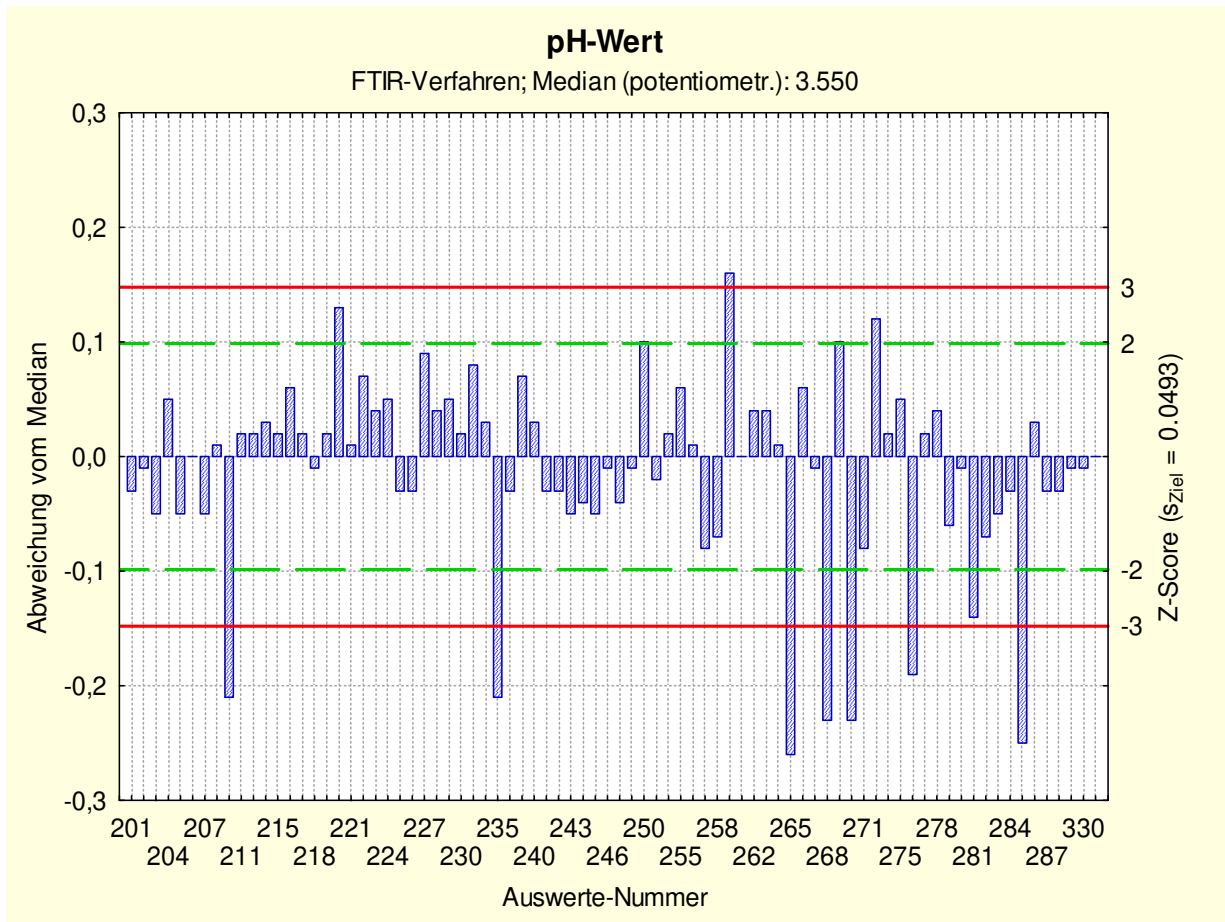
4.8.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	3,35
Mittelwert	3,545
Median	3,550
Maximalwert	3,75
Standardabweichung (s_L)	0,0707
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0105
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,48
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,43
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,22
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,21

4.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	45	3,544	0,064
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	3,548	0,060
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	3,670	
	alle Verfahren	126	3,547	0,062





4.9 Gesamtsäure [g/L]

4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	4,84	-0,120	-0,54	-1,12	
02	LwK 5.2.1	4,91	-0,050	-0,23	-0,47	
04	LwK 5.2.1	4,80	-0,160	-0,73	-1,49	
05	LwK 5.1	4,83	-0,130	-0,59	-1,21	
06	LwK 5.2.1	4,96	0,000	0,00	0,00	
08	LwK 5.2.1	4,97	0,010	0,05	0,09	
09	LwK 5.2.1	4,95	-0,010	-0,05	-0,09	
10	LwK 5.1	4,83	-0,130	-0,59	-1,21	
11	LwK 5.2.1	4,93	-0,030	-0,14	-0,28	
12	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
13	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
16	LwK 5.2.1	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
19	LwK 5.2.1	5,04	0,080	0,36	0,75	
21	LwK 5.1	5,20	0,240	1,09	2,24	
22	LwK 5.1	4,72	-0,240	-1,09	-2,24	
23	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
24	LwK 5.1	5,20	0,240	1,09	2,24	
26	LwK 5.1	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
27	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
28	LwK 5.1	4,80	-0,160	-0,73	-1,49	
30	LwK 5.2.1	4,95	-0,010	-0,05	-0,09	
34	LwK 5.2.1	4,84	-0,120	-0,54	-1,12	
37	LwK 5.1	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
38	LwK 5.1	4,99	0,030	0,14	0,28	
39	LwK 5.2.1	5,01	0,050	0,23	0,47	
40	LwK 5.1	4,93	-0,025	-0,11	-0,23	
41	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
42	LwK 5.1	4,86	-0,100	-0,45	-0,93	
45	LwK 5.2.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
46	LwK 5.2.1	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
49	LwK 5.1	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
51	LwK 5.2.1	5,39	0,430	1,95	4,01	
52	LwK 5.2.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
54	LwK 5.2.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
55	LwK 5.2.1	5,01	0,050	0,23	0,47	
56	LwK 5.1	4,91	-0,050	-0,23	-0,47	
59	LwK 5.2.1	4,94	-0,020	-0,09	-0,19	
60	LwK 5.2.1	5,20	0,240	1,09	2,24	
61	LwK 5.2.1	4,93	-0,030	-0,14	-0,28	
63	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
66	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
68	LwK 5.1	5,10	0,140	0,63	1,31	
72	LwK 5.1	5,33	0,370	1,68	3,45	
73	LwK 5.1	5,10	0,140	0,63	1,31	
75	LwK 5.2.2	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
78	LwK 5.1	4,93	-0,030	-0,14	-0,28	
79	LwK 5.2.2	4,90	-0,060	-0,27	-0,56	
94	LwK 5.2.1	5,00	0,040	0,18	0,37	
110	LwK 5.1	5,00	0,040	0,18	0,37	

4.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	25	4,969	0,121
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01; - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	22	4,958	0,077
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	4,900	0,000
	herkömmliche Verfahren	49	4,960	0,094
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	5,106	0,241

4.9.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,29	0,330	1,50	2,28	
202	LwK 5.3	5,22	0,260	1,18	1,79	
203	LwK 5.3	5,07	0,110	0,50	0,76	
204	LwK 5.3	4,76	-0,200	-0,91	-1,38	
205	LwK 5.3	4,87	-0,090	-0,41	-0,62	
206	LwK 5.3	5,19	0,230	1,04	1,59	
207	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
208	LwK 5.3	4,95	-0,010	-0,05	-0,07	
209	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
210	LwK 5.3	4,80	-0,160	-0,73	-1,10	
211	LwK 5.3	4,82	-0,140	-0,63	-0,97	
212	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
213	LwK 5.3	5,27	0,310	1,41	2,14	
215	LwK 5.3	5,40	0,440	2,00	3,03	
216	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
217	LwK 5.3	5,15	0,190	0,86	1,31	
218	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
219	LwK 5.3	5,21	0,250	1,13	1,72	
220	LwK 5.3	5,39	0,430	1,95	2,97	
221	LwK 5.3	5,12	0,160	0,73	1,10	
222	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
223	LwK 5.3	4,20	-0,760	-3,45	-5,24	(***)
224	LwK 5.3	5,20	0,240	1,09	1,66	
225	LwK 5.3	4,98	0,020	0,09	0,14	
226	LwK 5.3	5,25	0,290	1,32	2,00	
227	LwK 5.3	4,74	-0,220	-1,00	-1,52	
228	LwK 5.3	5,31	0,350	1,59	2,41	
229	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
230	LwK 5.3	5,15	0,190	0,86	1,31	
232	LwK 5.3	5,29	0,330	1,50	2,28	
234	LwK 5.3	5,18	0,220	1,00	1,52	
235	LwK 5.3	4,70	-0,260	-1,18	-1,79	
236	LwK 5.3	5,50	0,540	2,45	3,72	
237	LwK 5.3	5,28	0,320	1,45	2,21	
240	LwK 5.3	5,35	0,390	1,77	2,69	
241	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
242	LwK 5.3	4,84	-0,120	-0,54	-0,83	
243	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
244	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
245	LwK 5.3	4,98	0,020	0,09	0,14	
246	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
247	LwK 5.3	5,40	0,440	2,00	3,03	
248	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
249	LwK 5.3	5,27	0,310	1,41	2,14	
250	LwK 5.3	5,20	0,240	1,09	1,66	
251	LwK 5.3	5,39	0,430	1,95	2,97	
253	LwK 5.3	5,40	0,440	2,00	3,03	
254	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
255	LwK 5.3	5,25	0,290	1,32	2,00	
256	LwK 5.3	5,31	0,350	1,59	2,41	
257	LwK 5.3	5,54	0,580	2,63	4,00	
258	LwK 5.3	5,40	0,440	2,00	3,03	
259	LwK 5.3	4,80	-0,160	-0,73	-1,10	
260	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
261	LwK 5.3	5,01	0,050	0,23	0,34	
262	LwK 5.3	4,90	-0,060	-0,27	-0,41	
263	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
264	LwK 5.3	4,73	-0,230	-1,04	-1,59	
265	LwK 5.3	4,89	-0,070	-0,32	-0,48	
266	LwK 5.3	5,01	0,050	0,23	0,34	
267	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
268	LwK 5.3	4,73	-0,230	-1,04	-1,59	
269	LwK 5.3	5,05	0,090	0,41	0,62	
270	LwK 5.3	4,75	-0,210	-0,95	-1,45	
271	LwK 5.3	4,98	0,020	0,09	0,14	

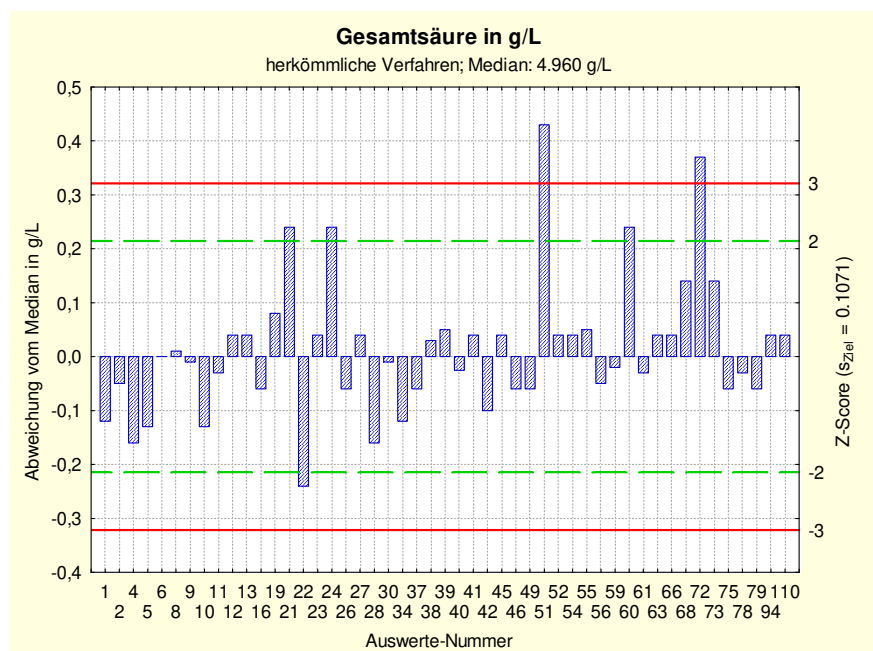
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

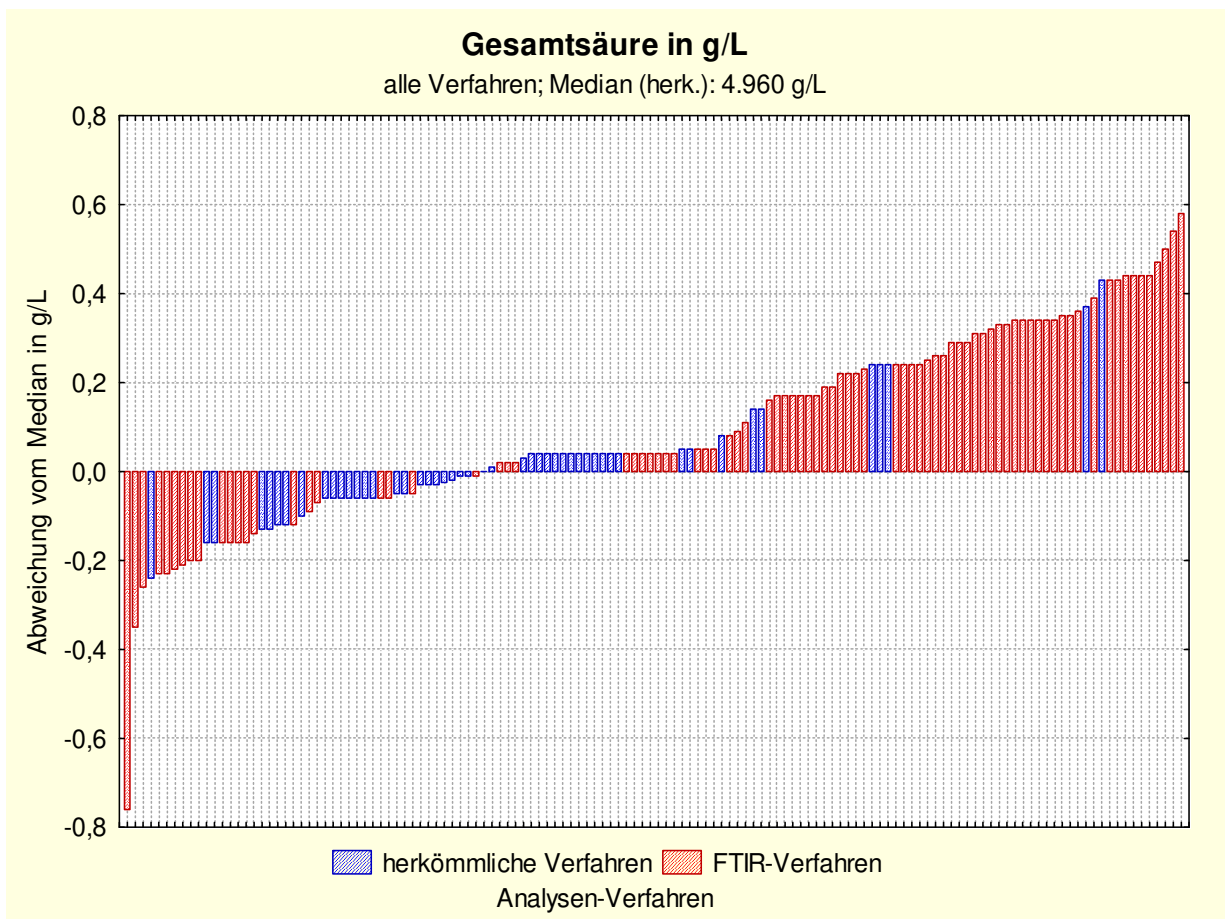
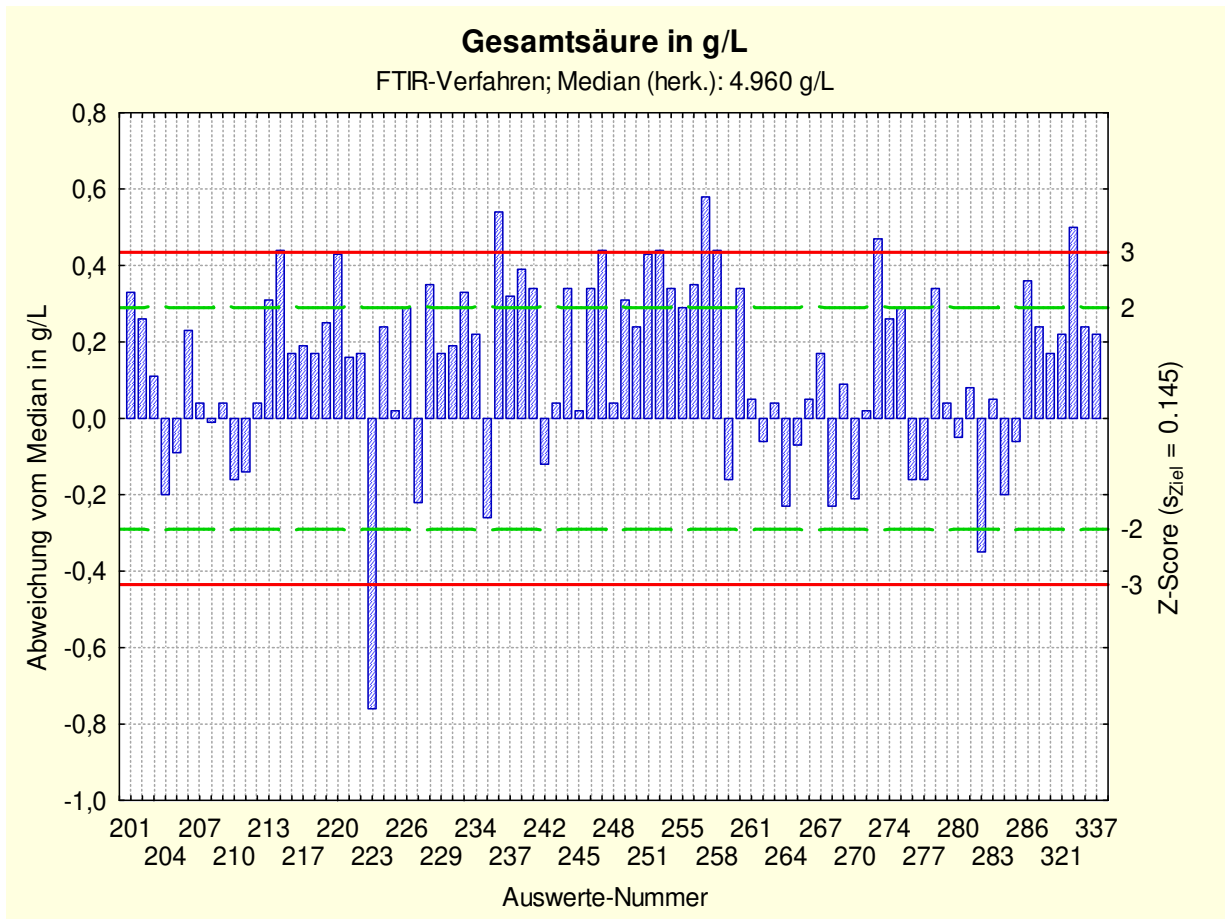
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 5.3	5,43	0,470	2,13	3,24	
274	LwK 5.3	5,22	0,260	1,18	1,79	
275	LwK 5.3	5,25	0,290	1,32	2,00	
276	LwK 5.3	4,80	-0,160	-0,73	-1,10	
277	LwK 5.3	4,80	-0,160	-0,73	-1,10	
278	LwK 5.3	5,30	0,340	1,54	2,34	
279	LwK 5.3	5,00	0,040	0,18	0,28	
280	LwK 5.3	4,91	-0,050	-0,23	-0,34	
281	LwK 5.3	5,04	0,080	0,36	0,55	
282	LwK 5.3	4,61	-0,350	-1,59	-2,41	
283	LwK 5.3	5,01	0,050	0,23	0,34	
284	LwK 5.3	4,76	-0,200	-0,91	-1,38	
285	LwK 5.3	4,90	-0,060	-0,27	-0,41	
286	LwK 5.3	5,32	0,360	1,63	2,48	
287	LwK 5.3	5,20	0,240	1,09	1,66	
312	LwK 5.3	5,13	0,170	0,77	1,17	
321	LwK 5.3	5,18	0,220	1,00	1,52	
328	LwK 5.3	5,46	0,500	2,27	3,45	
330	LwK 5.3	5,20	0,240	1,09	1,66	
337	LwK 5.3	5,18	0,220	1,00	1,52	

4.9.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	49
Minimalwert	4,72
Mittelwert	4,974
Median	4,960
Maximalwert	5,39
Standardabweichung (s _L)	0,127
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,220
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,145
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,58
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,18
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,87
Quotient (u _M /s _H)	0,08
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,17
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,12





4.10 Weinsäure [g/L]

4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsgrundlage sind die Werte aller herkömmlichen Verfahren bei einem $z_{Max} = |4,5|$

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,91	0,560	4,79	(**)
02	HPLC	2,05	-0,300	-2,57	
04	photometr.	2,26	-0,090	-0,77	
05	photometr.	2,34	-0,010	-0,09	
06	HPLC	2,09	-0,257	-2,20	
09	photometr., autom.	2,24	-0,110	-0,94	
10	photometr.	2,53	0,180	1,54	
13	photometr., autom.	2,74	0,390	3,34	
16	photometr., autom.	2,90	0,550	4,71	(**)
19	photometr., autom.	2,31	-0,040	-0,34	
22	HPLC	2,57	0,220	1,88	
23	HPLC	2,41	0,060	0,51	
27	HPLC	2,50	0,150	1,28	
30	photometr., autom.	2,47	0,120	1,03	
33	IC	2,18	-0,170	-1,45	
38	photometr., autom.	2,04	-0,310	-2,65	
39	IC	2,18	-0,170	-1,45	
40	photometr., autom.	2,46	0,105	0,90	
41	photometr., autom.	2,40	0,050	0,43	
44	photometr., autom.	2,55	0,200	1,71	
45	photometr., autom.	2,77	0,420	3,59	
49	photometr., autom.	2,20	-0,150	-1,28	
55	photometr., autom.	2,35	0,000	0,00	
56	photometr., autom.	2,77	0,420	3,59	
60	photometr., autom.	2,10	-0,250	-2,14	
61	HPLC	2,52	0,170	1,45	
68	photometr., autom.	1,25	-1,100	-9,41	(**)
78	photometr.	2,37	0,020	0,17	
97	HPLC	2,28	-0,070	-0,60	
102	photometr., autom.	2,27	-0,080	-0,68	
111	NMR	2,06	-0,293	-2,50	
112	NMR	1,96	-0,392	-3,36	
113	NMR	1,85	-0,500	-4,28	
114	NMR	1,97	-0,385	-3,29	
115	NMR	2,15	-0,200	-1,71	
116	NMR	2,34	-0,013	-0,11	

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

4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,09	-0,280	-2,38	-1,23	
202	FTIR	2,26	-0,110	-0,93	-0,48	
203	FTIR	2,15	-0,220	-1,87	-0,97	
204	FTIR	2,23	-0,140	-1,19	-0,62	
205	FTIR	2,36	-0,010	-0,08	-0,04	
207	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
208	FTIR	2,13	-0,240	-2,04	-1,06	
210	FTIR	2,70	0,330	2,80	1,45	
211	FTIR	2,28	-0,090	-0,76	-0,40	
212	FTIR	1,94	-0,430	-3,65	-1,89	
213	FTIR	2,45	0,080	0,68	0,35	
215	FTIR	2,00	-0,370	-3,14	-1,63	
216	FTIR	2,00	-0,370	-3,14	-1,63	
217	FTIR	2,35	-0,020	-0,17	-0,09	
218	FTIR	2,50	0,130	1,10	0,57	
219	FTIR	2,37	0,000	0,00	0,00	
220	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
221	FTIR	2,08	-0,290	-2,46	-1,28	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	FTIR	2,09	-0,280	-2,38	-1,23	
223	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
224	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
225	FTIR	2,37	0,000	0,00	0,00	
226	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
227	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
228	FTIR	2,47	0,100	0,85	0,44	
229	FTIR	2,24	-0,130	-1,10	-0,57	
230	FTIR	2,47	0,100	0,85	0,44	
232	FTIR	2,26	-0,110	-0,93	-0,48	
234	FTIR	2,46	0,090	0,76	0,40	
235	FTIR	0,00	-2,370	-20,13	-10,44	(*)
236	FTIR	1,90	-0,470	-3,99	-2,07	
237	FTIR	2,51	0,140	1,19	0,62	
240	FTIR	2,38	0,010	0,08	0,04	
241	FTIR	2,27	-0,100	-0,85	-0,44	
242	FTIR	2,19	-0,180	-1,53	-0,79	
243	FTIR	2,50	0,130	1,10	0,57	
244	FTIR	2,43	0,060	0,51	0,26	
245	FTIR	2,88	0,510	4,33	2,25	
246	FTIR	2,10	-0,270	-2,29	-1,19	
248	FTIR	2,20	-0,170	-1,44	-0,75	
249	FTIR	3,10	0,730	6,20	3,22	
250	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
251	FTIR	2,39	0,020	0,17	0,09	
253	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
255	FTIR	1,62	-0,750	-6,37	-3,30	
256	FTIR	2,82	0,450	3,82	1,98	
257	FTIR	2,53	0,160	1,36	0,70	
258	FTIR	2,20	-0,170	-1,44	-0,75	
259	FTIR	2,00	-0,370	-3,14	-1,63	
260	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
263	FTIR	1,50	-0,870	-7,39	-3,83	
264	FTIR	2,18	-0,190	-1,61	-0,84	
265	FTIR	2,67	0,300	2,55	1,32	
266	FTIR	1,92	-0,450	-3,82	-1,98	
267	FTIR	2,46	0,090	0,76	0,40	
268	FTIR	1,85	-0,520	-4,42	-2,29	
269	FTIR	2,30	-0,070	-0,59	-0,31	
270	FTIR	2,54	0,170	1,44	0,75	
271	FTIR	2,33	-0,040	-0,34	-0,18	
273	FTIR	1,72	-0,650	-5,52	-2,86	
274	FTIR	2,25	-0,120	-1,02	-0,53	
275	FTIR	2,48	0,110	0,93	0,48	
276	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
277	FTIR	3,64	1,270	10,79	5,59	(*)
278	FTIR	2,50	0,130	1,10	0,57	
280	FTIR	2,60	0,230	1,95	1,01	
281	FTIR	1,94	-0,430	-3,65	-1,89	
282	FTIR	1,76	-0,610	-5,18	-2,69	
283	FTIR	2,53	0,160	1,36	0,70	
284	FTIR	2,18	-0,190	-1,61	-0,84	
285	FTIR	2,80	0,430	3,65	1,89	
286	FTIR	2,35	-0,020	-0,17	-0,09	
287	FTIR	2,10	-0,270	-2,29	-1,19	
321	FTIR	2,65	0,280	2,38	1,23	
328	FTIR	2,26	-0,110	-0,93	-0,48	
330	FTIR	2,40	0,030	0,25	0,13	
337	FTIR	2,27	-0,100	-0,85	-0,44	

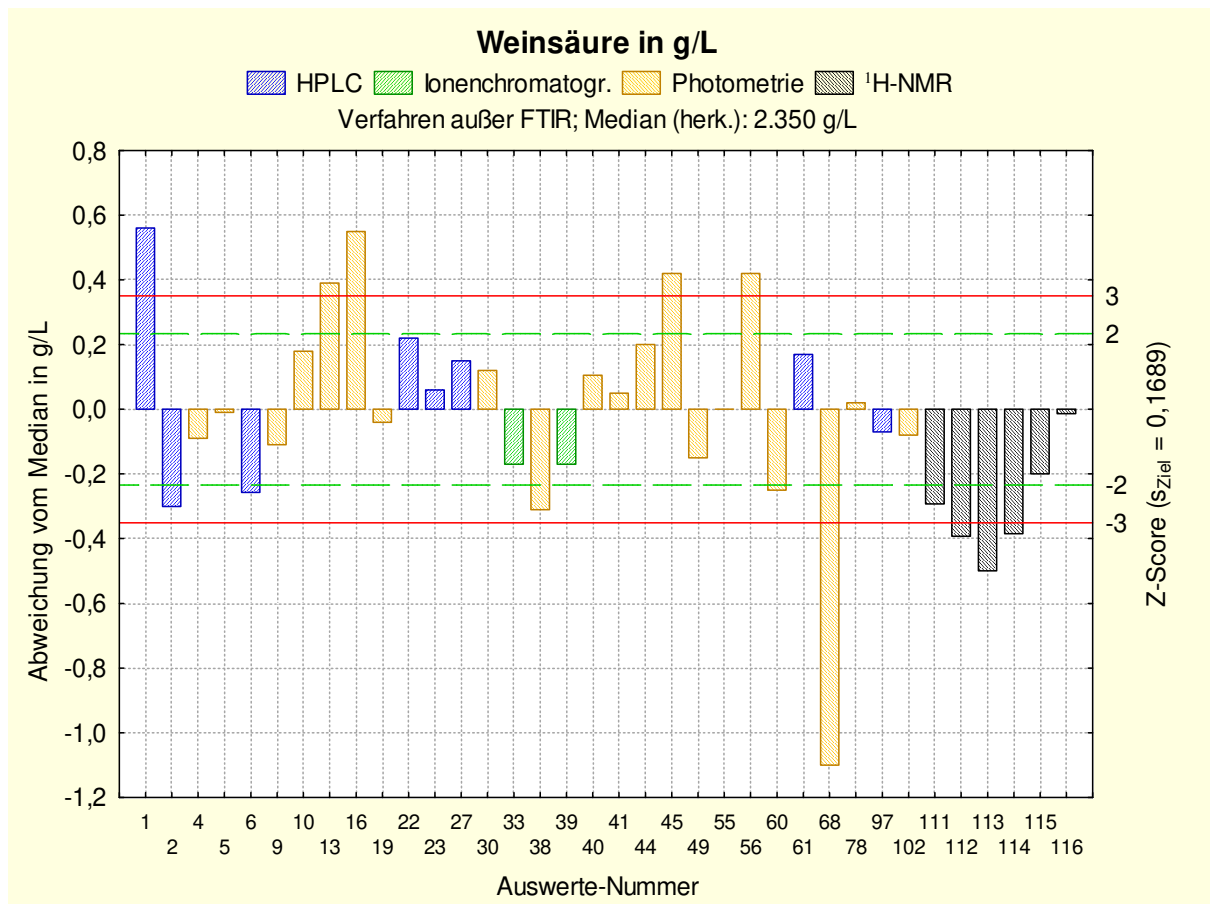
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

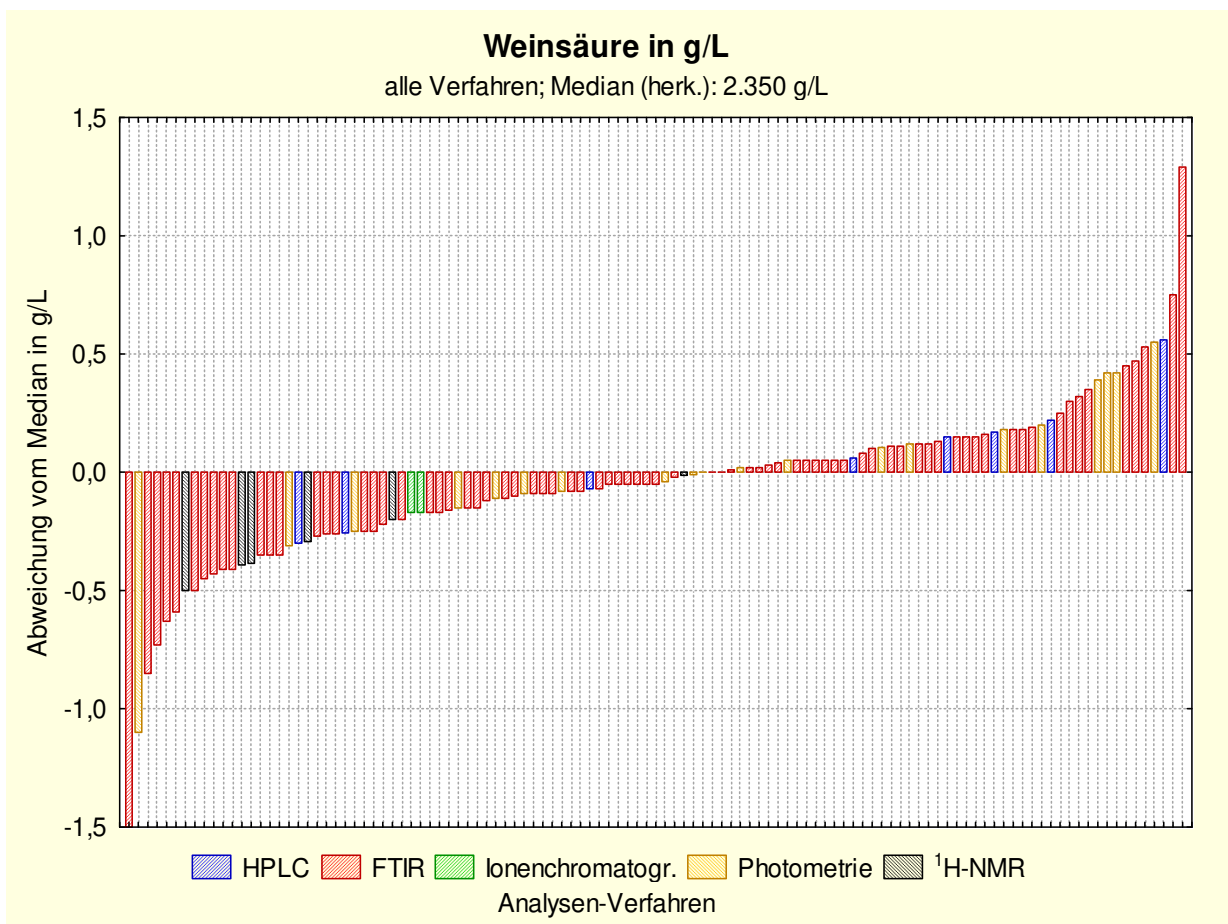
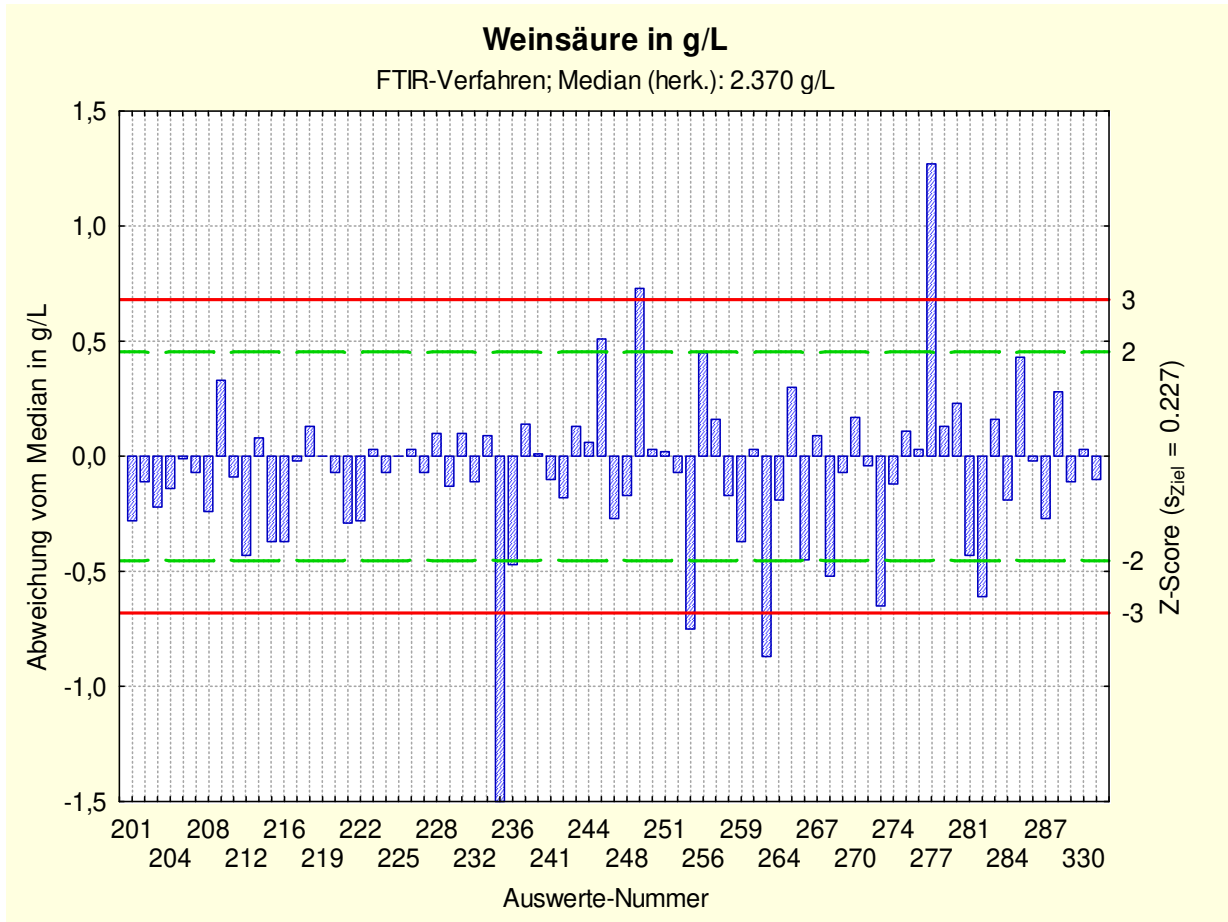
4.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC		HPLC + Photometrie	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten $Z_{Max} = 5,0$	ber. Daten $Z_{Max} = 4,5$
Gültige Werte	10	30	29	27
Minimalwert	2,05	1,25	2,04	2,04
Mittelwert	2,369	2,367	2,405	2,368
Median	2,345	2,360	2,370	2,350
Maximalwert	2,91	2,91	2,91	2,77
Standardabweichung (s_L)	0,265	0,319	0,244	0,208
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,084	0,058	0,045	0,040
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,117	0,117	0,118	0,117
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)				
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,227	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,27	2,72	2,07	1,78
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)				
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,91	1,41	1,07	0,92
Quotient (u_M/s_H)	0,72	0,50	0,38	0,34
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)				
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,16	0,26	0,20	0,18

4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	8	2,420	0,265
IC	Ionenchromatographie	2	2,180	0,000
photometr.	photometr. n. Rebelein	4	2,371	0,121
phot.autom.	photometr., automatisiert	16	2,404	0,318
	herkömmliche Verfahren	30	2,382	0,264
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	2,301	0,256
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,052	0,193





4.11 Flüchtige Säure [g/L]

4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,540	0,0500	1,62	1,75	
04	OIV SO2-korr.	0,518	0,0280	0,91	0,98	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,475	-0,0150	-0,49	-0,53	
06	OIV SO2-korr.	0,373	-0,1170	-3,79	-4,09	
08	OIV SO2-korr.	0,452	-0,0380	-1,23	-1,33	
09	OIV SO2-korr.	0,537	0,0470	1,52	1,65	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,550	0,0600	1,94	2,10	
11	OIV SO2-korr.	0,394	-0,0960	-3,11	-3,36	
12	Gerhardt SO2 ausg.	0,470	-0,0200	-0,65	-0,70	
22	Halbmikro SO2 unber.	0,520	0,0300	0,97	1,05	
26	Gerhardt SO2 korr.	0,488	-0,0020	-0,06	-0,07	
28	Halbmikro SO2 ausg.	0,521	0,0310	1,00	1,09	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,430	-0,0600	-1,94	-2,10	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,520	0,0300	0,97	1,05	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,471	-0,0190	-0,62	-0,67	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,490	0,0000	0,00	0,00	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,606	0,1160	3,76	4,06	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,520	0,0300	0,97	1,05	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,550	0,0600	1,94	2,10	
46	Halbmikro SO2 korr.	0,490	0,0000	0,00	0,00	
55	Rentschler mod. korr.	0,492	0,0020	0,06	0,07	
56	Büchi SO2 korr.	0,554	0,0636	2,06	2,23	
59	Wädenswil SO2 korr.	0,400	-0,0900	-2,92	-3,15	
61	OIV SO2-korr.	0,370	-0,1200	-3,89	-4,20	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,570	0,0800	2,59	2,80	
65	Wädenswil SO2 korr.	0,531	0,0410	1,33	1,44	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,490	0,0000	0,00	0,00	
72	Wädenswil SO2 unber.	0,550	0,0600	1,94	2,10	
78	Halbmikro SO2 korr.	0,500	0,0100	0,32	0,35	
79	Halbmikro SO2 unber.	0,520	0,0300	0,97	1,05	
80	Wädenswil SO2 korr.	0,480	-0,0100	-0,32	-0,35	
110	Gerhardt SO2 unber.	0,560	0,0700	2,27	2,45	

4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
202	FTIR	0,590	0,1000	3,24	1,12	
203	FTIR	0,600	0,1100	3,56	1,23	
204	FTIR	0,570	0,0800	2,59	0,90	
205	FTIR	0,490	0,0000	0,00	0,00	
207	FTIR	0,480	-0,0100	-0,32	-0,11	
208	FTIR	0,470	-0,0200	-0,65	-0,22	
210	FTIR	0,740	0,2500	8,10	2,81	
211	FTIR	0,416	-0,0740	-2,40	-0,83	
212	FTIR	0,420	-0,0700	-2,27	-0,79	
213	FTIR	0,480	-0,0100	-0,32	-0,11	
215	FTIR	0,540	0,0500	1,62	0,56	
216	FTIR	0,420	-0,0700	-2,27	-0,79	
217	FTIR	0,320	-0,1700	-5,51	-1,91	
218	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
219	FTIR	0,510	0,0200	0,65	0,22	
220	FTIR	0,730	0,2400	7,78	2,69	
222	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
224	FTIR	0,550	0,0600	1,94	0,67	
225	FTIR	0,460	-0,0300	-0,97	-0,34	
226	FTIR	0,510	0,0200	0,65	0,22	
227	FTIR	0,530	0,0400	1,30	0,45	
228	FTIR	0,670	0,1800	5,83	2,02	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

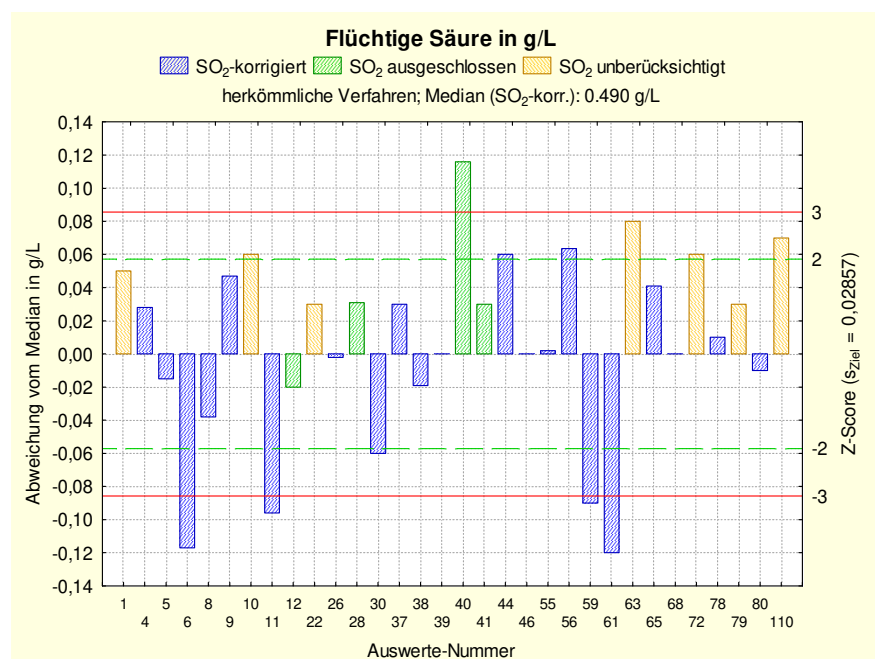
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	0,590	0,1000	3,24	1,12	
230	FTIR	0,562	0,0720	2,33	0,81	
232	FTIR	0,630	0,1400	4,54	1,57	
234	FTIR	0,450	-0,0400	-1,30	-0,45	
235	FTIR	0,620	0,1300	4,21	1,46	
236	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
237	FTIR	0,650	0,1600	5,18	1,80	
240	FTIR	0,630	0,1400	4,54	1,57	
241	FTIR	0,510	0,0200	0,65	0,22	
242	FTIR	0,610	0,1200	3,89	1,35	
243	FTIR	0,490	0,0000	0,00	0,00	
244	FTIR	0,650	0,1600	5,18	1,80	
245	FTIR	0,590	0,1000	3,24	1,12	
246	FTIR	0,710	0,2200	7,13	2,47	
248	FTIR	0,610	0,1200	3,89	1,35	
249	FTIR	0,470	-0,0200	-0,65	-0,22	
250	FTIR	0,540	0,0500	1,62	0,56	
251	FTIR	0,550	0,0600	1,94	0,67	
253	FTIR	0,560	0,0700	2,27	0,79	
254	FTIR	0,580	0,0900	2,92	1,01	
255	FTIR	0,510	0,0200	0,65	0,22	
256	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
257	FTIR	0,360	-0,1300	-4,21	-1,46	
259	FTIR	0,540	0,0500	1,62	0,56	
260	FTIR	0,410	-0,0800	-2,59	-0,90	
262	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
263	FTIR	0,470	-0,0200	-0,65	-0,22	
264	FTIR	0,640	0,1500	4,86	1,68	
265	FTIR	0,690	0,2000	6,48	2,24	
266	FTIR	0,610	0,1200	3,89	1,35	
267	FTIR	0,530	0,0400	1,30	0,45	
268	FTIR	0,860	0,3700	11,99	4,15	
269	FTIR	0,380	-0,1100	-3,56	-1,23	
270	FTIR	0,470	-0,0200	-0,65	-0,22	
271	FTIR	0,490	0,0000	0,00	0,00	
273	FTIR	0,460	-0,0300	-0,97	-0,34	
274	FTIR	0,610	0,1200	3,89	1,35	
275	FTIR	0,510	0,0200	0,65	0,22	
276	FTIR	0,570	0,0800	2,59	0,90	
277	FTIR	0,410	-0,0800	-2,59	-0,90	
278	FTIR	0,570	0,0800	2,59	0,90	
279	FTIR	0,550	0,0600	1,94	0,67	
280	FTIR	0,450	-0,0400	-1,30	-0,45	
281	FTIR	0,820	0,3300	10,69	3,70	
282	FTIR	0,900	0,4100	13,29	4,60	
283	FTIR	0,520	0,0300	0,97	0,34	
284	FTIR	0,580	0,0900	2,92	1,01	
285	FTIR	0,600	0,1100	3,56	1,23	
286	FTIR	0,480	-0,0100	-0,32	-0,11	
287	FTIR	0,530	0,0400	1,30	0,45	
328	FTIR	0,500	0,0100	0,32	0,11	
330	FTIR	0,570	0,0800	2,59	0,90	
337	FTIR	0,590	0,1000	3,24	1,12	

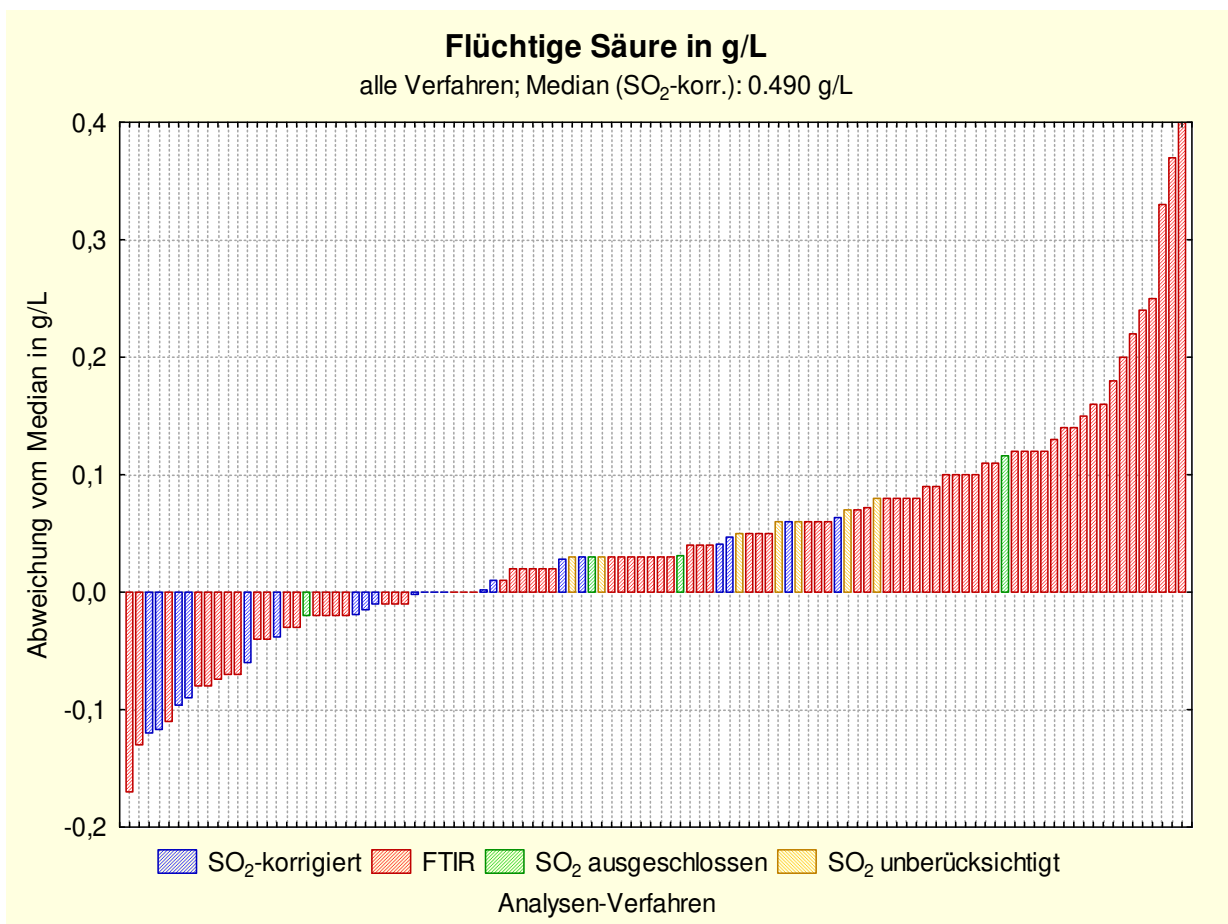
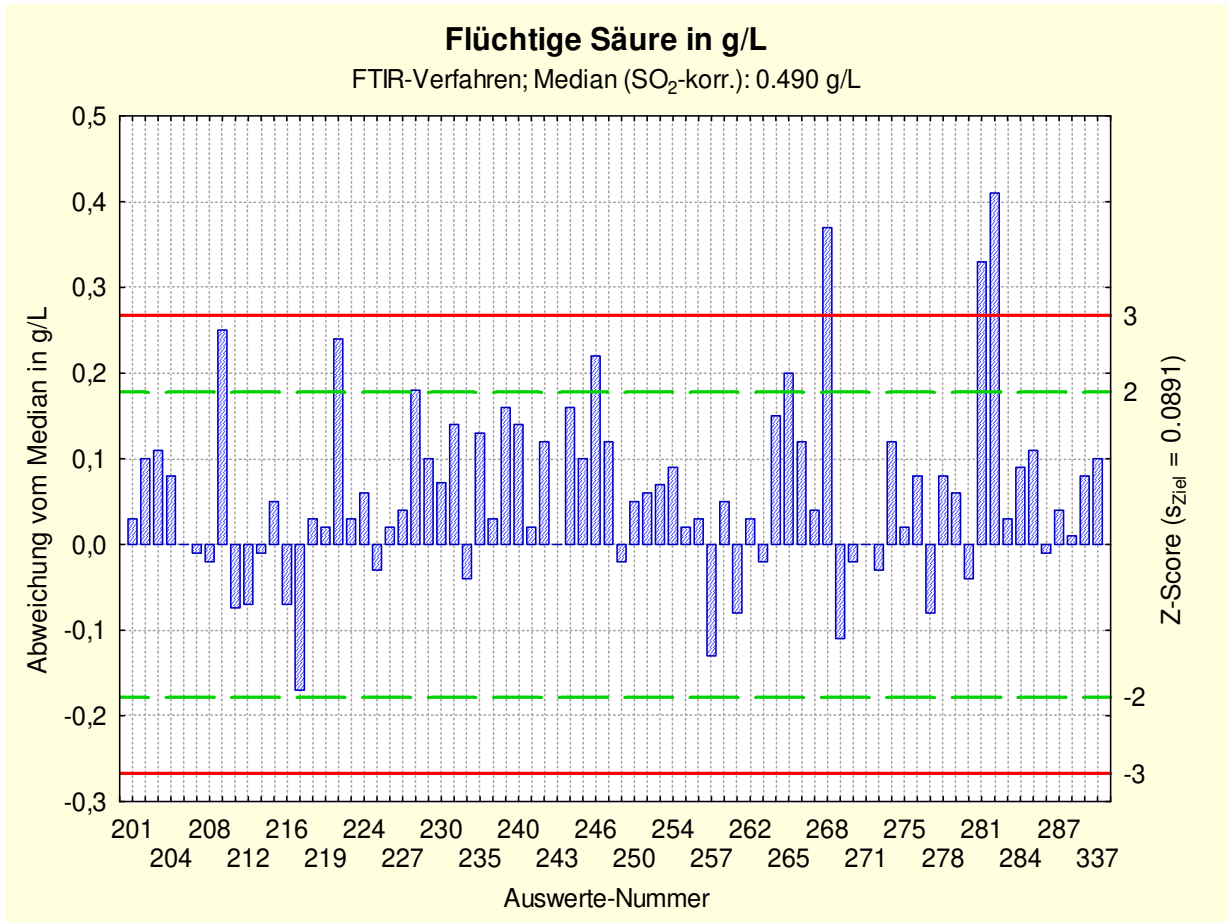
4.11.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur oder SO ₂ -Ausschluss	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,370
Mittelwert	0,4764
Median	0,4900
Maximalwert	0,554
Standardabweichung (s _L)	0,055
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,031
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.}) ^{*)}	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,78
Quotient (s _L /s _{exp herk.}) ^{*)}	1,93
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,62
Quotient (u _M /s _H)	0,39
Quotient (u _M /s _{exp herk.}) ^{*)}	0,42
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,13

4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	5	0,5400	0,0241
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	1	0,5210	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,5033	0,0173
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5500	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,4703	0,0749
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5600	
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	3	0,5320	0,0780
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	7	0,4830	0,0357
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	6	0,4407	0,0835
Rentschler mod korr..	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,4920	
Büchi SO2 korr.	Destillationsapparat Büchi, SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,5536	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	21	0,4785	0,0579
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	0,5426	0,0873





4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

4.12.1 Herkömmliche und Laborergebnisse

Bewertungsbasis: alle herkömmlichen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,414	0,010	0,38	
02	HPLC	0,383	-0,021	-0,80	
05	enzymat. autom.	0,408	0,004	0,15	
06	HPLC	0,259	-0,145	-5,54	(**)
10	enzymat. autom.	0,330	-0,074	-2,83	
13	enzymat. autom.	0,420	0,016	0,61	
16	enzymat. autom.	0,300	-0,104	-3,97	
19	enzymat. autom.	0,400	-0,004	-0,15	
23	HPLC	0,500	0,096	3,66	
26	enzymat. autom.	0,400	-0,004	-0,15	
27	enzymat. autom.	0,469	0,065	2,49	
30	enzymat. autom.	0,420	0,016	0,61	
38	enzymat. autom.	0,380	-0,024	-0,92	
41	enzymat. autom.	0,420	0,016	0,61	
44	enzymat. autom.	0,340	-0,064	-2,44	
45	enzymat. autom.	0,470	0,066	2,52	
46	enzymat. autom.	0,380	-0,024	-0,92	
49	enzymat. autom.	0,350	-0,054	-2,06	
52	enzymat. autom.	0,430	0,026	0,99	
54	enzymat. autom.	0,410	0,006	0,23	
55	enzymat. autom.	0,423	0,019	0,73	
61	enzymat. Hand	0,341	-0,063	-2,41	
68	enzymat. autom.	0,370	-0,034	-1,30	
78	enzymat. autom.	0,420	0,016	0,61	
102	enzymat. autom.	0,4	-0,004	-0,15	
111	NMR	0,455	0,051	1,96	
112	NMR	0,478	0,074	2,84	
113	NMR	0,476	0,072	2,75	
114	NMR	0,443	0,039	1,49	
115	NMR	0,392	-0,012	-0,46	
116	NMR	0,455	0,051	1,96	
117	NMR	0,459	0,055	2,08	
221	FTIR	0,505	0,101	3,86	
223	FTIR	0,515	0,111	4,24	
241	FTIR	0,480	0,076	2,90	
258	FTIR	0,620	0,216	8,25	(*)
259	FTIR	0,470	0,066	2,52	
321	FTIR	0,435	0,031	1,18	

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

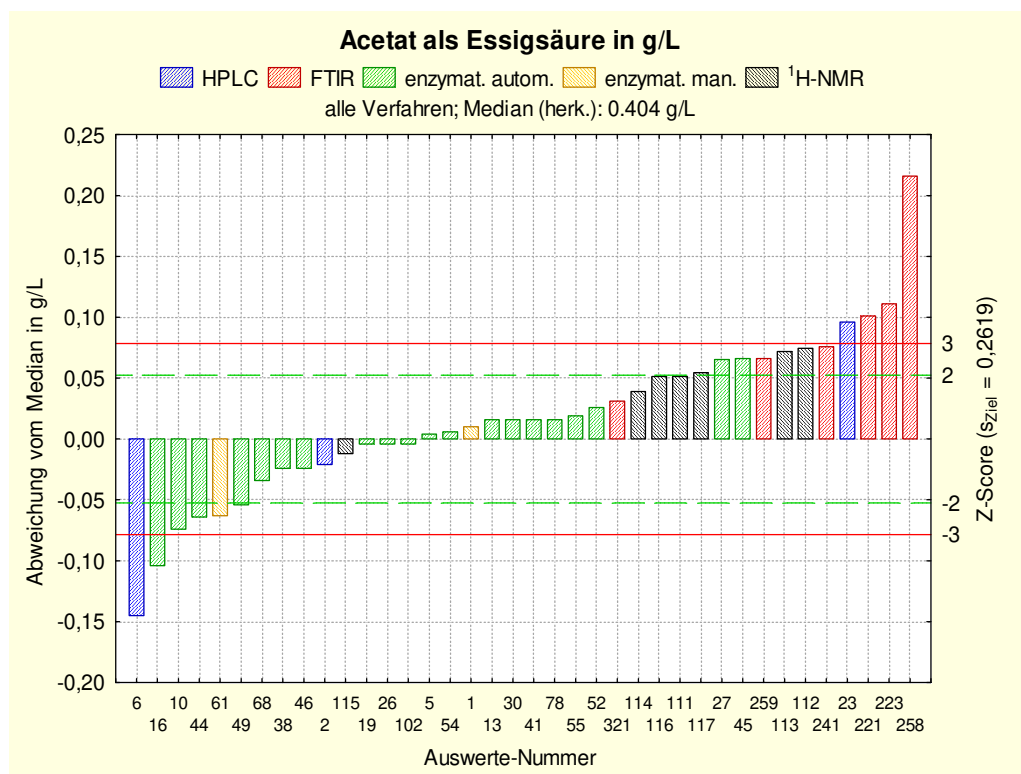
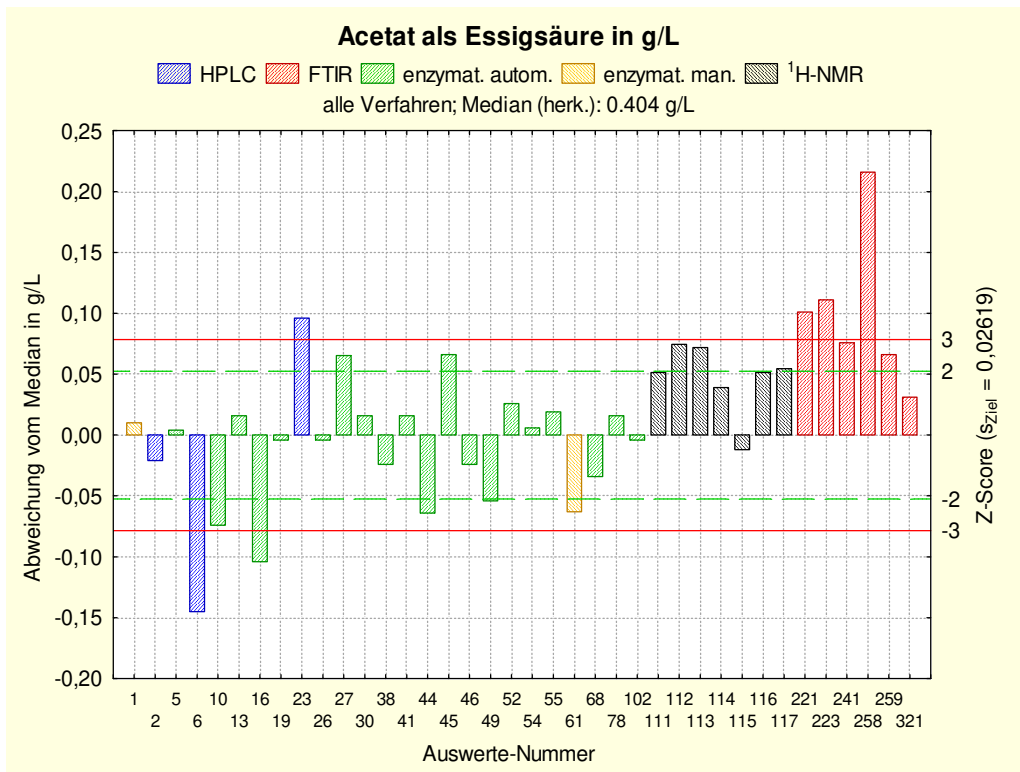
(**) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

4.12.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L] Bewertungsbasis: herkömmliche Verfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	25	24
Minimalwert	0,259	0,300
Mittelwert	0,393	0,399
Median	0,400	0,404
Maximalwert	0,500	0,500
Standardabweichung (s_L)	0,053	0,046
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,026	0,026
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)		
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,06	1,77
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,41	0,36
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)		

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,3807	0,1367
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	20	0,3986	0,0422
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,3775	0,0585
	alle herkömmlichen Verfahren	25	0,3964	0,0483
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	7	0,4559	0,0212
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,4983	0,0528



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	0,390				
02	HPLC	<= 0				
06	HPLC	0,005				
22	HPLC	0,030				
23	HPLC	< 0,10				
39	HPLC	<0,2				
61	enzymat. Hand	0,122				
97	HPLC	<NG				
111	NMR	<0,2				
112	NMR	<0,2				
113	NMR	<0,2				
114	NMR	<0,2				
115	NMR	<0,09				
116	NMR	<0,2				

Anmerkung:

Wegen der geringen, überwiegend unter der Bestimmungsgrenze liegenden Anzahl der Laborergebnisse erfolgte keine Auswertung für diesen Parameter

4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,388	0,268	28,69	12,79	(*)
02	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
03	enz.(L-), autom.	< 0,25				
04	enz.(L-), autom.	0,200	0,080	8,57	3,82	
05	enz.(L-), autom.	0,128	0,008	0,86	0,38	
08	enz.(L-) Hand	0,108	-0,012	-1,28	-0,57	
09	enz.(L-), autom.	0,186	0,066	7,07	3,15	
10	enz.(L-), autom.	0,110	-0,010	-1,07	-0,48	
11	enz.(L-), autom.	0,170	0,050	5,35	2,39	
13	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
16	enz.(L-), autom.	0,100	-0,020	-2,14	-0,95	
19	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
27	enz.(L-), autom.	0,100	-0,020	-2,14	-0,95	
30	enz.(L-), autom.	0,109	-0,011	-1,18	-0,53	
38	enz.(L-), autom.	0,070	-0,050	-5,35	-2,39	
40	enz.(L-), autom.	0,100	-0,020	-2,14	-0,95	
41	enz.(L-), autom.	0,190	0,070	7,49	3,34	
42	enz.(L-), autom.	0,130	0,010	1,07	0,48	
44	enz.(L-), autom.	0,110	-0,010	-1,07	-0,48	
45	enz.(L-), autom.	0,110	-0,010	-1,07	-0,48	
46	enz.(L-), autom.	0,150	0,030	3,21	1,43	
49	enz.(L-), autom.	0,020	-0,100	-10,71	-4,77	
52	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
54	enz.(L-), autom.	<= 0				
55	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
56	enz.(L-), autom.	0,110	-0,010	-1,07	-0,48	
61	enz.(L-) Hand	0,103	-0,017	-1,80	-0,80	
63	enz.(L-) Hand	0,260	0,140	14,99	6,68	(*)
68	enz.(L-), autom.	0,120	0,000	0,00	0,00	
78	enz.(L-) Hand	0,120	0,000	0,00	0,00	
102	enz.(L-), autom.	0,150	0,030	3,21	1,43	
109	enz.(L-), autom.	0,160	0,040	4,28	1,91	

(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und werden nicht berücksichtigt.

4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,410				
202	FTIR	<= 0				
203	FTIR	0,230				
204	FTIR	<= 0				
205	FTIR	0,150				
207	FTIR	0,100				
208	FTIR	0,430				
209	FTIR	<= 0				
210	FTIR	0,170				
211	FTIR	<= 0				
212	FTIR	0,180				
213	FTIR	0,060				
215	FTIR	<= 0				
216	FTIR	0,210				
217	FTIR	0,040				
218	FTIR	0,230				
219	FTIR	0,240				
220	FTIR	0,200				
221	FTIR	0,190				
222	FTIR	0,300				
223	FTIR	0,653				
224	FTIR	0,100				
225	FTIR	<= 0				
226	FTIR	<= 0				
227	FTIR	-0,100				
228	FTIR	-0,070				
229	FTIR	<= 0				
230	FTIR	<= 0				
232	FTIR	0,150				
234	FTIR	0,350				
236	FTIR	<= 0				
237	FTIR	0,170				
240	FTIR	0,130				
241	FTIR	0,110				
242	FTIR	0,160				
243	FTIR	0,200				
244	FTIR	-0,010				
245	FTIR	0,180				
246	FTIR	0,100				
248	FTIR	0,800				
249	FTIR	0,020				
250	FTIR	<= 0				
251	FTIR	<= 0				
253	FTIR	0,100				
254	FTIR	<= 0				
255	FTIR	-0,080				
256	FTIR	0,170				
257	FTIR	0,010				
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	<= 0				
260	FTIR	<= 0				
263	FTIR	0,010				
264	FTIR	0,990				
265	FTIR	0,410				
266	FTIR	-0,130				
267	FTIR	0,060				
268	FTIR	1,010				
269	FTIR	0,150				
270	FTIR	0,670				
271	FTIR	0,210				
273	FTIR	0,220				
274	FTIR	-0,720				
275	FTIR	<= 0				
276	FTIR	<= 0				
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	<= 0				

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	0,200				
281	FTIR	<= 0				
282	FTIR	<= 0				
284	FTIR	-0,040				
285	FTIR	0,400				
286	FTIR	0,180				
287	FTIR	<= 0				
321	FTIR	<= 0				
328	FTIR	-0,060				
330	FTIR	<= 0				
337	FTIR	<= 0				

Anmerkung:

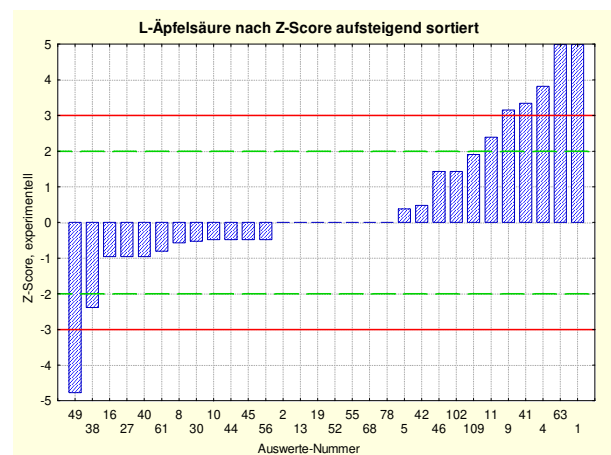
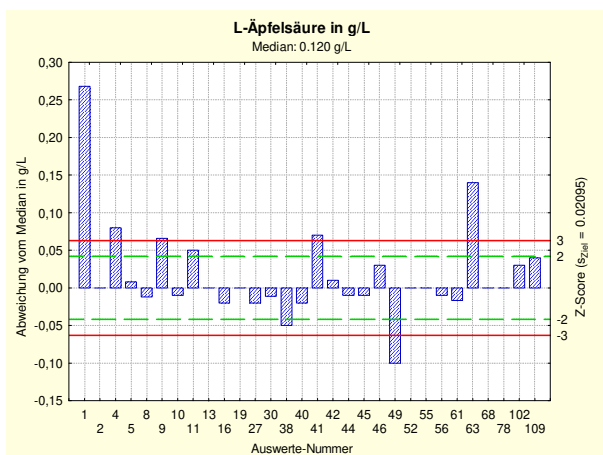
Die Messwerte liegen unterhalb der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Daher erfolgt keine Auswertung.

4.13.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in [g/L] für: L-Äpfelsäure	alle Daten
Gültige Werte	28
Minimalwert	0,02
Mittelwert	0,123
Median	0,120
Maximalwert	0,20
Standardabweichung (s _L)	0,037
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,009
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,021
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	3,91
Quotient (s _L /s _{exp})	1,74
Quotient (s _L /s _{FTIR})	
Quotient (u _M /s _H)	0,74
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,33
Quotient (u _M /s _{FTIR})	

4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	25	0,1246	0,0310
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,1878	0,1360
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	30	0,1284	0,0369



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	1,87	0,248	2,91	
02	HPLC	1,93	0,310	3,64	
04	enzymat. autom.	1,59	-0,030	-0,35	
05	enzymat. autom.	1,63	0,010	0,12	
06	HPLC	1,96	0,340	3,99	
08	enzymat. Hand	1,70	0,076	0,89	
09	enzymat. autom.	1,63	0,010	0,12	
11	enzymat. autom.	1,67	0,045	0,53	
19	enzymat. autom.	1,54	-0,080	-0,94	
22	HPLC	1,02	-0,600	-7,04	(**)
23	HPLC	1,54	-0,080	-0,94	
39	HPLC	1,62	0,000	0,00	
61	enzymat. Hand	1,54	-0,078	-0,92	
63	enzymat. Hand	1,46	-0,160	-1,88	
68	enzymat. autom.	1,53	-0,090	-1,06	
97	HPLC	1,48	-0,140	-1,64	
111	NMR	1,44	-0,179	-2,10	
112	NMR	1,55	-0,067	-0,79	
113	NMR	1,55	-0,071	-0,83	
114	NMR	1,49	-0,127	-1,49	
115	NMR	1,63	0,010	0,12	
116	NMR	1,50	-0,118	-1,39	

(**) 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	1,53	0,190	2,62	2,46	
02	enz.(L-) autom.	1,30	-0,040	-0,55	-0,52	
03	enz.(L-) autom.	1,33	-0,007	-0,10	-0,09	
04	enz.(L-) autom.	1,28	-0,060	-0,83	-0,78	
05	enz.(L-) autom.	1,31	-0,030	-0,41	-0,39	
08	enz.(L-) Hand	1,34	0,000	0,00	0,00	
09	enz.(L-) autom.	1,35	0,010	0,14	0,13	
10	enz.(L-) autom.	1,43	0,090	1,24	1,16	
11	enz.(L-) autom.	1,34	0,000	0,00	0,00	
13	enz.(L-) autom.	1,48	0,140	1,93	1,81	
16	enz.(L-) autom.	1,50	0,160	2,21	2,07	
19	enz.(L-) autom.	1,24	-0,100	-1,38	-1,29	
27	enz.(L-) autom.	1,40	0,060	0,83	0,78	
30	enz.(L-) autom.	1,41	0,065	0,90	0,84	
38	enz.(L-) autom.	1,30	-0,040	-0,55	-0,52	
40	enz.(L-) autom.	1,26	-0,080	-1,10	-1,03	
41	enz.(L-) autom.	1,28	-0,060	-0,83	-0,78	
42	enz.(L-) autom.	1,50	0,160	2,21	2,07	
44	enz.(L-) autom.	1,40	0,060	0,83	0,78	
45	enz.(L-) autom.	1,29	-0,050	-0,69	-0,65	
46	enz.(L-) autom.	1,18	-0,160	-2,21	-2,07	
49	enz.(L-) autom.	1,38	0,040	0,55	0,52	
54	enz.(L-) autom.	1,40	0,060	0,83	0,78	
55	enz.(L-) autom.	1,21	-0,130	-1,79	-1,68	
56	enz.(L-) autom.	1,40	0,060	0,83	0,78	
61	enz.(L-) Hand	1,21	-0,126	-1,74	-1,63	
63	enz.(L-) Hand	1,16	-0,180	-2,48	-2,33	
68	enz.(L-) autom.	1,23	-0,110	-1,52	-1,42	
78	enz.(L-) Hand	1,36	0,020	0,28	0,26	
102	enz.(L-) autom.	1,55	0,210	2,90	2,71	
109	enz.(L-) autom.	1,27	-0,074	-1,02	-0,96	

4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,67	0,065	0,77	0,31	
202	FTIR	1,64	0,036	0,43	0,17	
203	FTIR	1,65	0,045	0,53	0,22	
204	FTIR	1,67	0,065	0,77	0,31	
205	FTIR	1,82	0,215	2,54	1,03	
207	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
208	FTIR	1,56	-0,045	-0,53	-0,22	
209	FTIR	1,70	0,095	1,12	0,45	
210	FTIR	1,29	-0,315	-3,73	-1,51	
211	FTIR	1,62	0,010	0,12	0,05	
212	FTIR	1,61	0,005	0,06	0,02	
213	FTIR	1,44	-0,165	-1,95	-0,79	
215	FTIR	1,80	0,195	2,31	0,93	
216	FTIR	1,35	-0,255	-3,02	-1,22	
217	FTIR	1,42	-0,185	-2,19	-0,89	
218	FTIR	1,31	-0,295	-3,49	-1,41	
219	FTIR	1,54	-0,065	-0,77	-0,31	
220	FTIR	1,10	-0,505	-5,97	-2,42	
221	FTIR	1,82	0,215	2,54	1,03	
222	FTIR	1,31	-0,295	-3,49	-1,41	
223	FTIR	1,54	-0,067	-0,79	-0,32	
224	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
225	FTIR	1,51	-0,095	-1,12	-0,45	
226	FTIR	1,63	0,025	0,30	0,12	
227	FTIR	1,60	-0,005	-0,06	-0,02	
228	FTIR	1,41	-0,195	-2,31	-0,93	
229	FTIR	1,76	0,155	1,83	0,74	
230	FTIR	1,73	0,125	1,48	0,60	
232	FTIR	1,55	-0,055	-0,65	-0,26	
234	FTIR	1,77	0,165	1,95	0,79	
236	FTIR	1,30	-0,305	-3,61	-1,46	
237	FTIR	1,00	-0,605	-7,16	-2,89	
240	FTIR	1,46	-0,145	-1,71	-0,69	
241	FTIR	1,51	-0,095	-1,12	-0,45	
242	FTIR	1,68	0,075	0,89	0,36	
243	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
244	FTIR	1,70	0,095	1,12	0,45	
245	FTIR	1,49	-0,115	-1,36	-0,55	
246	FTIR	1,18	-0,425	-5,03	-2,03	
248	FTIR	1,60	-0,005	-0,06	-0,02	
249	FTIR	1,13	-0,475	-5,62	-2,27	
250	FTIR	1,60	-0,005	-0,06	-0,02	
251	FTIR	1,56	-0,045	-0,53	-0,22	
253	FTIR	1,40	-0,205	-2,42	-0,98	
254	FTIR	1,20	-0,405	-4,79	-1,94	
255	FTIR	1,60	-0,005	-0,06	-0,02	
256	FTIR	1,59	-0,015	-0,18	-0,07	
257	FTIR	1,16	-0,445	-5,26	-2,13	
258	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
259	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
260	FTIR	1,20	-0,405	-4,79	-1,94	
263	FTIR	1,40	-0,205	-2,42	-0,98	
264	FTIR	1,85	0,245	2,90	1,17	
265	FTIR	1,09	-0,515	-6,09	-2,46	
266	FTIR	1,92	0,315	3,73	1,51	
267	FTIR	1,41	-0,195	-2,31	-0,93	
268	FTIR	0,94	-0,665	-7,86	-3,18	
269	FTIR	0,97	-0,635	-7,51	-3,04	
270	FTIR	1,50	-0,105	-1,24	-0,50	
271	FTIR	1,48	-0,125	-1,48	-0,60	
273	FTIR	1,06	-0,545	-6,45	-2,61	
274	FTIR	1,32	-0,285	-3,37	-1,36	
275	FTIR	1,11	-0,495	-5,85	-2,37	
276	FTIR	1,00	-0,605	-7,16	-2,89	
277	FTIR	1,35	-0,255	-3,02	-1,22	
278	FTIR	1,90	0,295	3,49	1,41	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

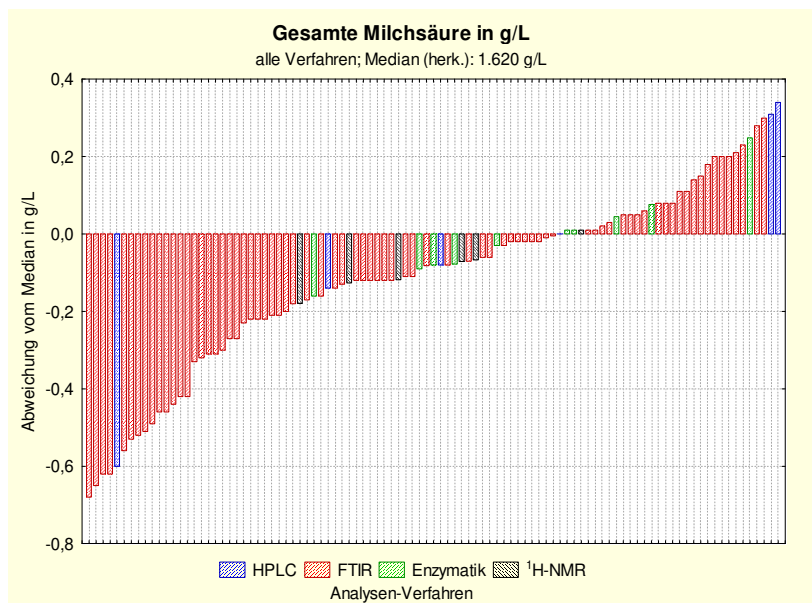
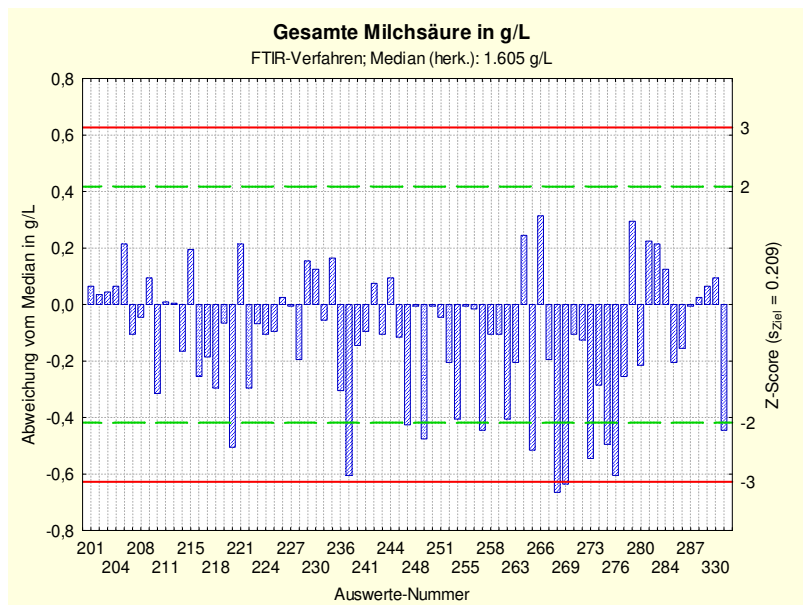
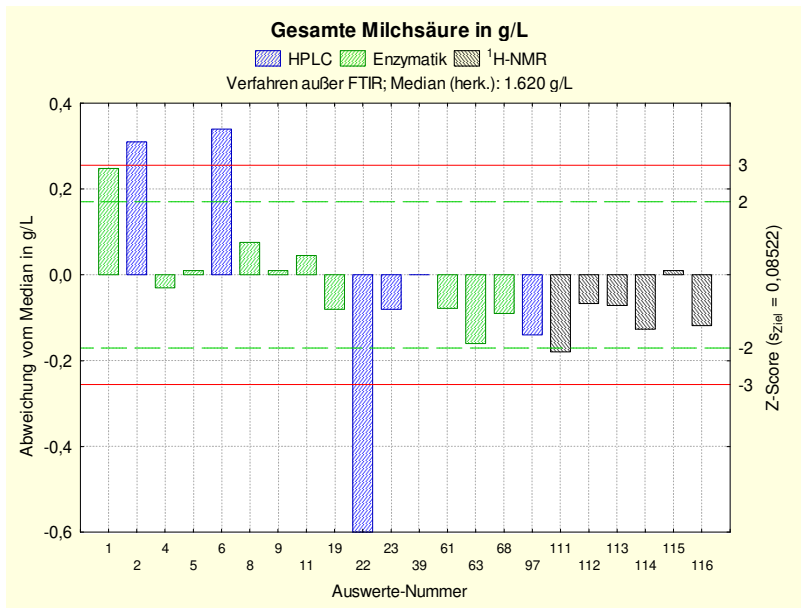
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	1,39	-0,215	-2,54	-1,03	
281	FTIR	1,83	0,225	2,66	1,08	
282	FTIR	1,82	0,215	2,54	1,03	
284	FTIR	1,73	0,125	1,48	0,60	
285	FTIR	1,40	-0,205	-2,42	-0,98	
286	FTIR	1,45	-0,155	-1,83	-0,74	
287	FTIR	1,60	-0,005	-0,06	-0,02	
321	FTIR	1,63	0,025	0,30	0,12	
328	FTIR	1,67	0,065	0,77	0,31	
330	FTIR	1,70	0,095	1,12	0,45	
337	FTIR	1,16	-0,445	-5,26	-2,13	

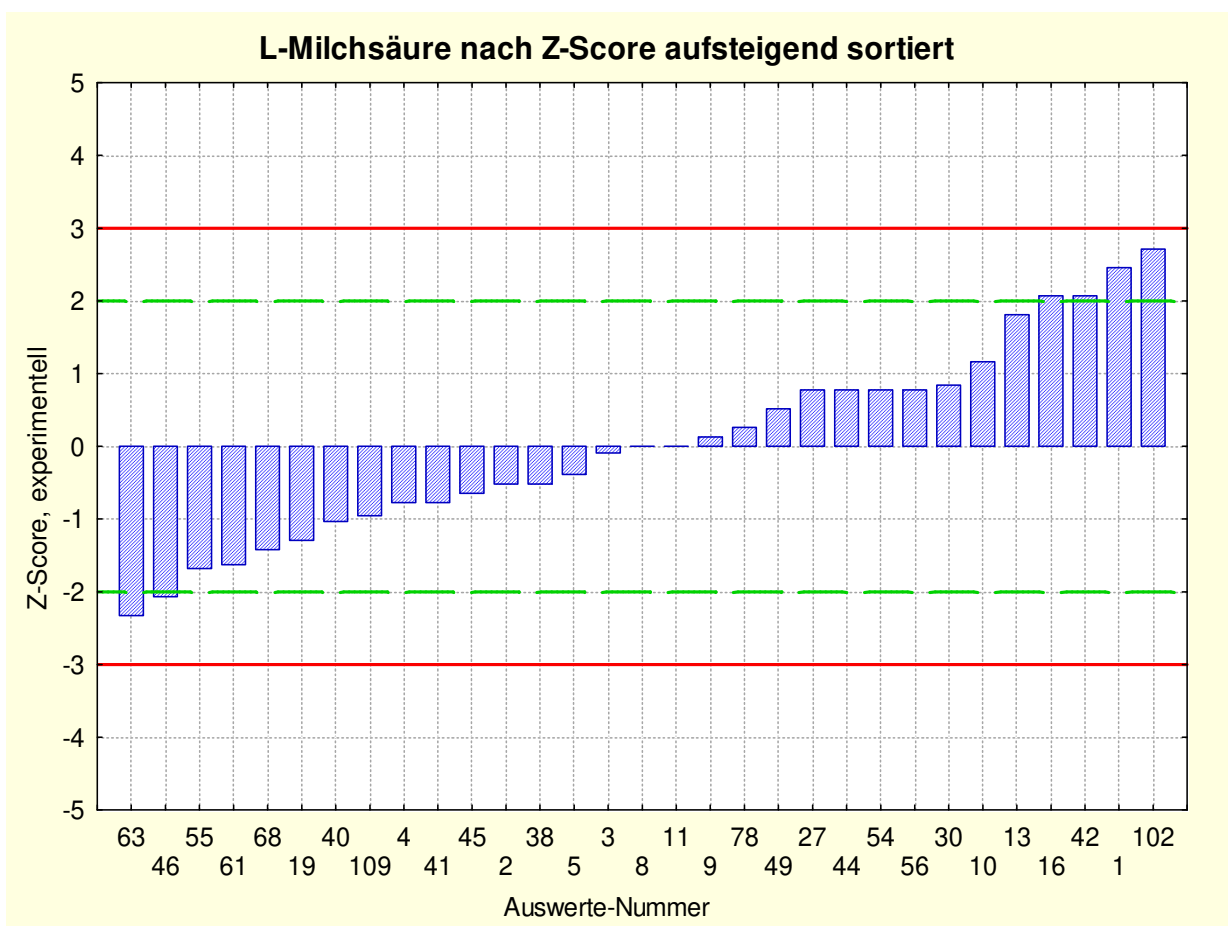
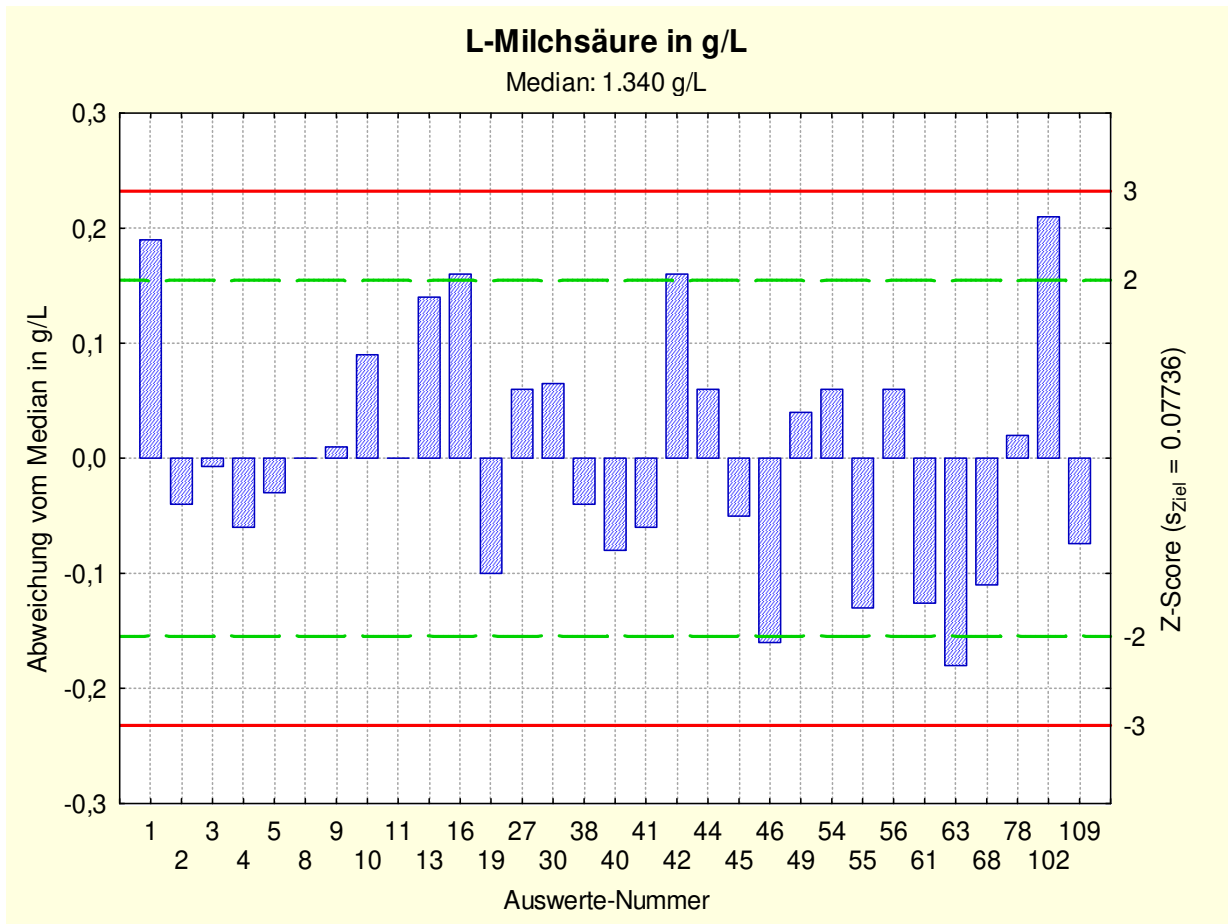
4.14.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in [g/L] für: nur herkömmliche Verfahren	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	16	15	31
Minimalwert	1,02	1,46	1,16
Mittelwert	1,606	1,645	1,343
Median	1,605	1,620	1,340
Maximalwert	1,96	1,96	1,55
Standardabweichung (s_L)	0,218	0,157	0,103
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,054	0,041	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,085	0,085	0,073
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})			0,077
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\text{Ü FTIR}}$)	0,209	0,209	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,58	1,84	1,42
Quotient (s_L/s_{exp})			1,33
Quotient ($s_L/s_{\text{Ü FTIR}}$)	1,04	0,75	
Quotient (u_M/s_H)	0,64	0,48	0,26
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)			0,24
Quotient ($u_M/s_{\text{Ü FTIR}}$)	0,26	0,20	

4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	1,593	0,388
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	1,597	0,061
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	1,642	0,204
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	16	1,619	0,169
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	1,493	0,248
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,527	0,070
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	26	1,345	0,104
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	1,321	0,163
	alle Verfahren L-Milchsäure	31	1,341	0,111





4.15 Reduktone [mg/L]

4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	4,0	-11,00	-6,89	(*)
10	Glyoxal/potentiometr.	6,0	-9,00	-5,64	(*)
12	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-8,00	-5,01	(*)
17	Propionaldehyd/Stärke	22,0	7,00	4,38	
18	Glyoxal/Stärke	18,0	3,00	1,88	
19	Glyoxal/potentiometr.	20,0	5,00	3,13	
21	Glyoxal/Stärke	20,0	5,00	3,13	
22	Glyoxal/potentiometr.	25,0	10,00	6,26	(*)
23	Glyoxal/Stärke	20,0	5,00	3,13	
24	Glyoxal/Stärke	23,0	8,00	5,01	(*)
26	Glyoxal/potentiometr.	8,0	-7,00	-4,38	
27	Glyoxal/potentiometr.	14,0	-1,00	-0,63	
30	Glyoxal/Stärke	15,0	0,00	0,00	
34	Glyoxal/Stärke	13,0	-2,00	-1,25	
36	Glyoxal/Stärke	14,0	-1,00	-0,63	
37	Glyoxal/potentiometr.	21,9	6,90	4,32	
38	Glyoxal/Stärke	5,0	-10,00	-6,26	(*)
39	Glyoxal/potentiometr.	9,3	-5,70	-3,57	
40	Glyoxal/Stärke	11,7	-3,33	-2,09	
41	Glyoxal/Stärke	17,0	2,00	1,25	
42	Glyoxal/Stärke	19,0	4,00	2,51	
49	Glyoxal/Stärke	14,0	-1,00	-0,63	
51	Propionaldehyd/Stärke	20,0	5,00	3,13	
55	Glyoxal/MTT	8,0	-7,00	-4,38	
59	Glyoxal/potentiometr.	17,0	2,00	1,25	
60	Glyoxal/Stärke	13,0	-2,00	-1,25	
63	Glyoxal/Stärke	16,0	1,00	0,63	
64	Glyoxal/Stärke	16,0	1,00	0,63	
65	Glyoxal/potentiometr.	8,0	-7,00	-4,38	
66	Glyoxal/Stärke	24,0	9,00	5,64	(*)
67	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-6,00	-3,76	
68	Acetaldehyd/potent.	15,0	0,00	0,00	
70	Glyoxal/potentiometr.	15,0	0,00	0,00	
72	Glyoxal/Stärke	13,5	-1,50	-0,94	
73	Glyoxal/Stärke	12,0	-3,00	-1,88	
75	Glyoxal/Stärke	20,0	5,00	3,13	
76	Glyoxal/potentiometr.	16,0	1,00	0,63	
78	Acetaldehyd/Stärke	25,0	10,00	6,26	(*)
83	Glyoxal/potentiometr.	16,0	1,00	0,63	
84	Glyoxal/potentiometr.	15,0	0,00	0,00	
86	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-5,00	-3,13	
96	Glyoxal/potentiometr.	13,0	-2,00	-1,25	
108	Glyoxal/potentiometr.	12	-3,00	-1,88	
110	Glyoxal/Stärke	15,0	0,00	0,00	

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

Anmerkung:

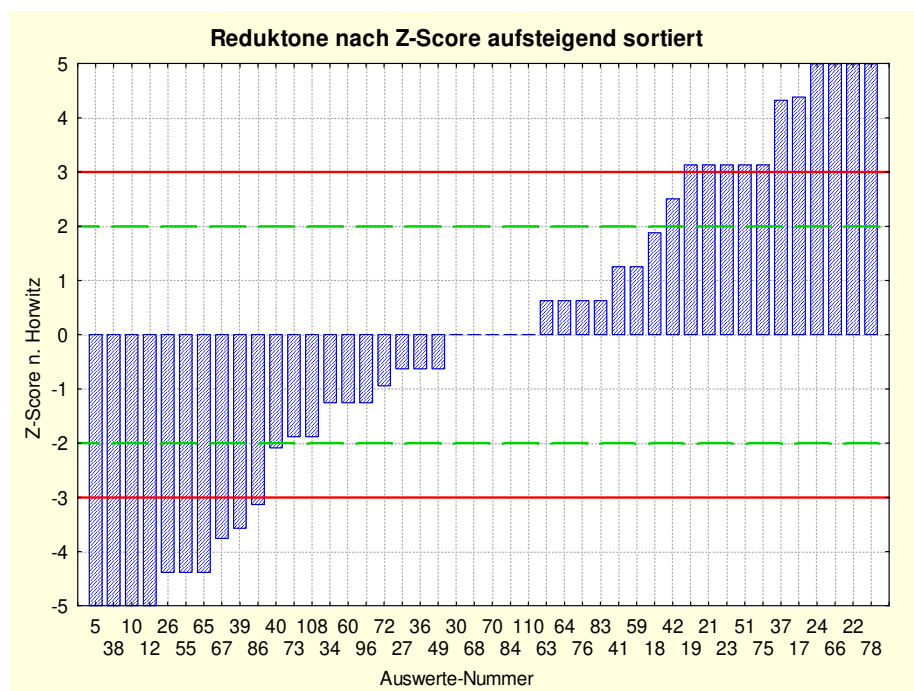
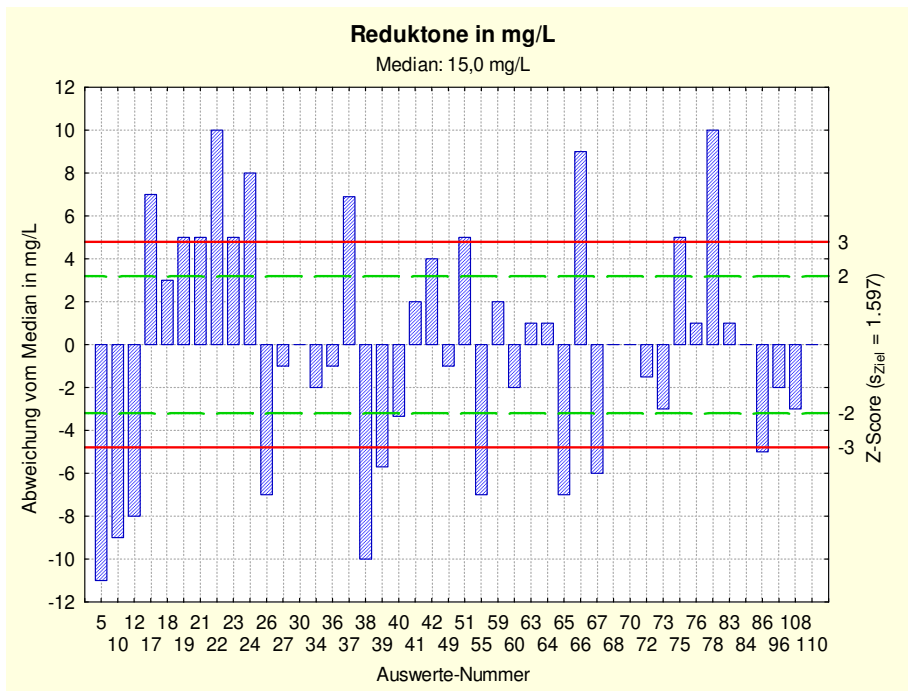
Da der Quotient s_L/s_H über 2,0 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Bewertung der Laborleistung dar und werden deshalb in grauer Schriftfarbe dargestellt.

4.15.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	25,00	
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	9,50	8,82
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	2	21,00	1,60
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	20	16,07	4,05
Glyoxal/potent.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	18	13,26	5,61
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	8,00	
	alle Verfahren	44	14,90	5,81

4.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	8,0
Mittelwert	14,90
Median	15,00
Maximalwert	22,0
Standardabweichung (s _L)	3,946
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,658
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,597
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,47
Quotient (s _L /s _{exp})	
Quotient (u _M /s _H)	0,41
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	



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	36,0	0,35	0,11	
04	LwK 6.3	40,0	4,35	1,31	
05	LwK 6.2	35,6	-0,05	-0,02	
06	LwK 6.2	43,8	8,15	2,45	
08	LwK 6.2	32,2	-3,45	-1,04	
09	LwK 6.2	37,6	1,95	0,59	
11	LwK 6.2	39,3	3,65	1,10	
13	LwK 6.3	26,0	-9,65	-2,90	
28	LwK 6.2	36,2	0,55	0,17	
41	LwK 6.3	31,0	-4,65	-1,40	
44	LwK 6.3	27,0	-8,65	-2,60	
45	LwK 6.3	35,0	-0,65	-0,20	
46	LwK 6.3	22,0	-13,65	-4,10	
52	LwK 6.3	26,0	-9,65	-2,90	
54	LwK 6.4	36,0	0,35	0,11	
55	LwK 6.4	35,3	-0,35	-0,11	
56	LwK 6.4	35,1	-0,54	-0,16	
60	LwK 6.3	32,0	-3,65	-1,10	
61	LwK 6.2	41,4	5,75	1,73	
94	LwK 6.3	35,7	0,05	0,02	
97	LwK 6.2	38,9	3,25	0,98	
105	LwK 6.2	37,0	1,35	0,41	
202	LwK 6.5	49,6	13,95	4,19	
205	LwK 6.5	30,0	-5,65	-1,70	
206	LwK 6.5	49,0	13,35	4,01	
208	LwK 6.5	36,2	0,55	0,17	
209	LwK 6.5	36,0	0,35	0,11	
210	LwK 6.5	36,0	0,35	0,11	
211	LwK 6.5	39,3	3,64	1,09	
213	LwK 6.5	27,0	-8,65	-2,60	
219	LwK 6.5	36,0	0,35	0,11	
220	LwK 6.5	41,0	5,35	1,61	
225	LwK 6.5	42,0	6,35	1,91	
237	LwK 6.5	31,0	-4,65	-1,40	
243	LwK 6.5	39,0	3,35	1,01	
248	LwK 6.5	34,0	-1,65	-0,50	
250	LwK 6.5	35,0	-0,65	-0,20	
251	LwK 6.5	37,0	1,35	0,41	
257	LwK 6.5	46,2	10,55	3,17	
261	LwK 6.5	49,7	14,03	4,21	
262	LwK 6.5	37,5	1,85	0,56	
263	LwK 6.5	45,0	9,35	2,81	
264	LwK 6.5	50,0	14,35	4,31	
265	LwK 6.5	31,0	-4,65	-1,40	
277	LwK 6.5	40,0	4,35	1,31	
278	LwK 6.5	39,0	3,35	1,01	
279	LwK 6.5	36,0	0,35	0,11	
280	LwK 6.5	34,0	-1,65	-0,50	
287	LwK 6.5	33,0	-2,65	-0,80	
328	LwK 6.5	38,5	2,89	0,87	
330	LwK 6.5	24,0	-11,65	-3,50	
337	LwK 6.5	31,0	-4,65	-1,40	

4.16.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
10	Redox incl.	38,0	-2,00	-0,54	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	1,00	0,27	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	16,00	4,36	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	5,00	1,36	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
30	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	3,00	0,82	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	38,8	-1,25	-0,34	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	5,00	1,36	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	0,00	0,00	
59	Redox incl.	46,0	6,00	1,63	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	7,00	1,91	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	2,00	0,54	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	8,00	2,18	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	35,1	-4,90	-1,33	
73	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	
76	Redox incl.	39,0	-1,00	-0,27	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	7,00	1,91	
79	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	
83	Redox incl.	44,0	4,00	1,09	
84	Redox incl.	36,0	-4,00	-1,09	
86	Redox incl.	37,0	-3,00	-0,82	
110	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	

4.16.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
12	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	3,50	1,31	0,95	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-1,50	-0,56	-0,41	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	27,5	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-0,50	-0,19	-0,14	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-3,50	-1,31	-0,95	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	25,6	-1,90	-0,71	-0,52	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	6,50	2,43	1,77	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-3,50	-1,31	-0,95	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	10,50	3,93	2,86	
71	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	13,50	5,05	3,68	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-3,50	-1,31	-0,95	
96	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,50	0,19	0,14	
108	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	14,50	5,43	3,95	

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

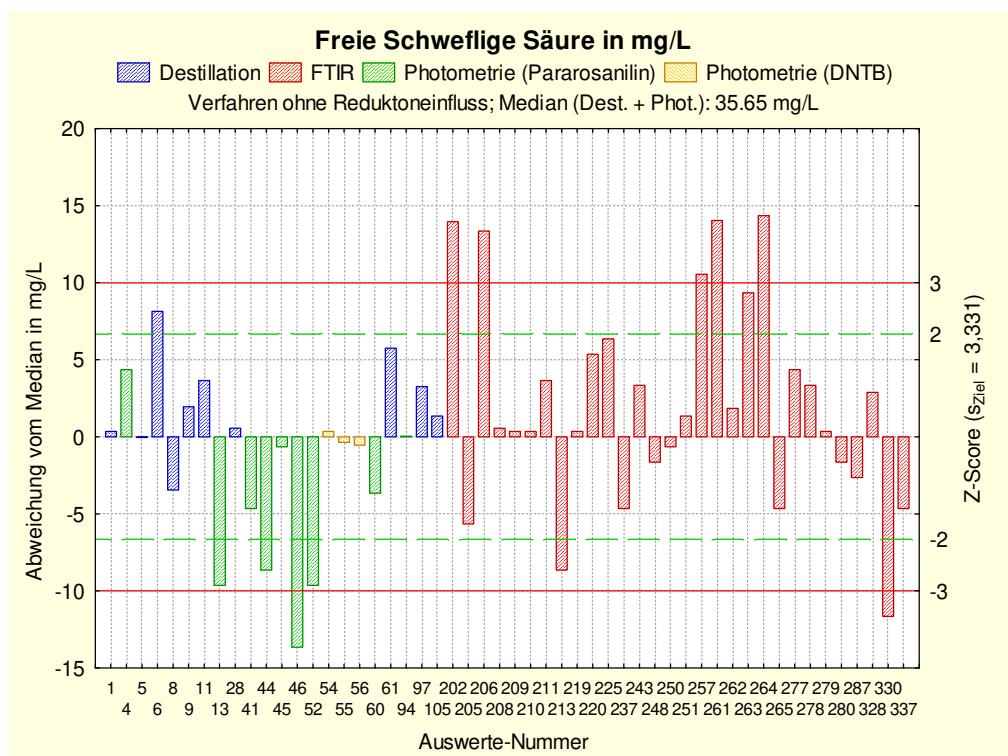
4.16.4 Deskriptive Ergebnisse

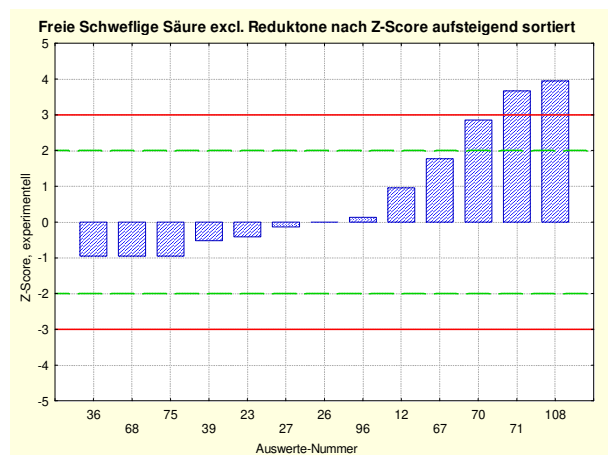
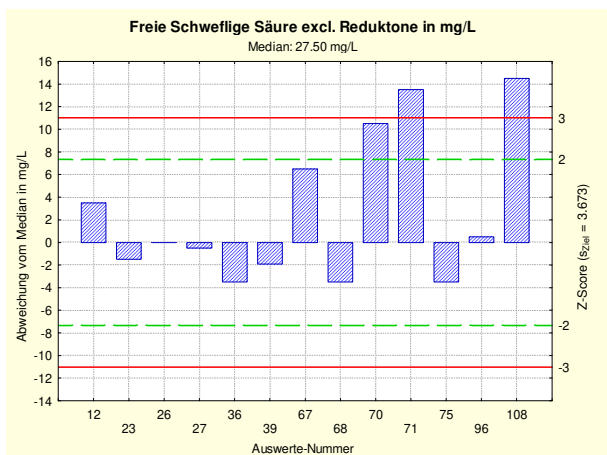
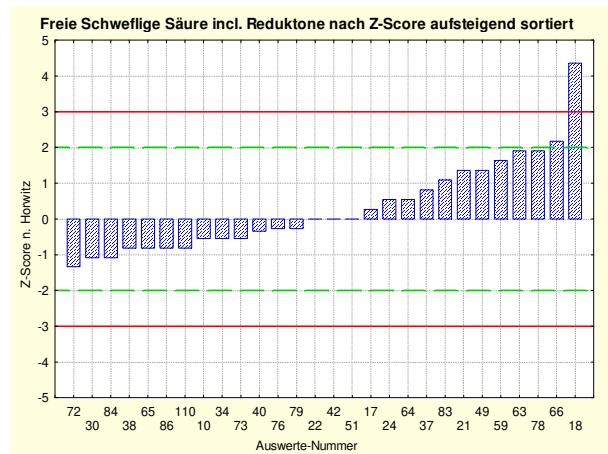
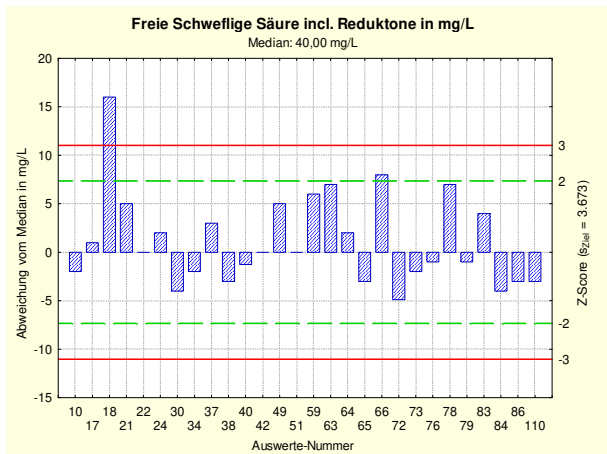
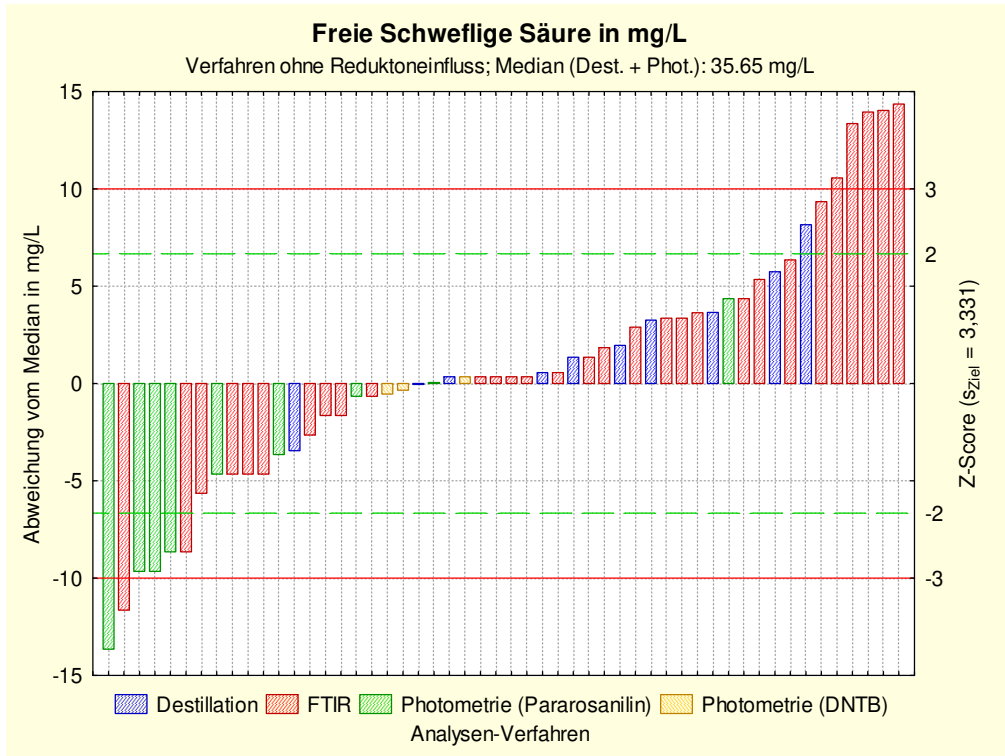
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie alle Daten	jodometrisch incl. Reduktone alle Daten	jodometrisch excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	22	28	13
Minimalwert	22,0	35,1	24,0
Mittelwert	34,51	41,14	30,16
Median	35,65	40,00	27,50
Maximalwert	43,8	56,0	42,0
Standardabweichung (s _L)	5,410	4,751	6,508
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,153	0,898	1,805
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	3,331	3,673	2,672
- n. Horwitz incl. Reduktone ⁷ (s _H incl. Red.)			3,673
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,62	1,29	2,44
Quotient (s _L /s _{exp})			1,77
Quotient (u _M /s _H)	0,35	0,24	0,68
Quotient (u _M / s _{exp} herk.)			0,49

s_H incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone

4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox incl.	Jodometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und der Redoxelektrode incl. Reduktone	6	39,81	4,34
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - ohne Abzug der Reduktone	22	41,04	4,51
	jodometrische Verfahren inclusive Reduktone	28	40,79	4,41
LwK 6.1 (excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	13	29,81	6,70
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	37,70	3,14
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	9	30,52	6,53
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	35,44	0,47
	Destillations- und photometrische Verfahren	22	34,74	5,41
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	30	37,62	6,74





4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

4.17.1 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	118,6	6,10	0,69	1,14	
04	LwK 7.7	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
05	LwK 7.3	112,5	0,00	0,00	0,00	
06	LwK 7.3	115,2	2,70	0,31	0,50	
08	LwK 7.3	106,8	-5,70	-0,64	-1,06	
09	LwK 7.3	110,6	-1,90	-0,21	-0,35	
10	LwK 7.4.2	118,0	5,50	0,62	1,03	
11	LwK 7.3	120,5	8,00	0,90	1,49	
12	LwK 7.3	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
13	LwK 7.4.1	115,0	2,50	0,28	0,47	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	7,50	0,85	1,40	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
21	LwK 7.4.2	118,0	5,50	0,62	1,03	
22	LwK 7.3	118,0	5,50	0,62	1,03	
23	LwK 7.4.2m	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	20,50	2,32	3,83	
26	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	-3,50	-0,40	-0,65	
28	LwK 7.3	114,5	2,00	0,23	0,37	
30	LwK 7.4.1	107,0	-5,50	-0,62	-1,03	
33	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	7,50	0,85	1,40	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	7,50	0,85	1,40	
37	LwK 7.4.1	99,0	-13,50	-1,53	-2,52	
38	LwK 7.7	103,0	-9,50	-1,07	-1,77	
39	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
40	LwK 7.4.1	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
41	LwK 7.6	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
42	LwK 7.4.2	113,0	0,50	0,06	0,09	
44	LwK 7.4.1	116,0	3,50	0,40	0,65	
45	LwK 7.7	117,0	4,50	0,51	0,84	
46	LwK 7.7	91,0	-21,50	-2,43	-4,01	
49	LwK 7.4.2	113,0	0,50	0,06	0,09	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	123,0	10,50	1,19	1,96	
52	LwK 7.7	101,0	-11,50	-1,30	-2,15	
54	LwK 7.7	107,0	-5,50	-0,62	-1,03	
55	LwK 7.7	111,8	-0,70	-0,08	-0,13	
56	LwK 7.4.2	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	124,0	11,50	1,30	2,15	
60	LwK 7.3	98,0	-14,50	-1,64	-2,71	
61	LwK 7.3	114,9	2,40	0,27	0,45	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	16,50	1,87	3,08	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	125,0	12,50	1,41	2,33	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	0,50	0,06	0,09	
66	LwK 7.4.2	127,0	14,50	1,64	2,71	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	-0,50	-0,06	-0,09	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	12,50	1,41	2,33	
71	LwK 7.6	115,0	2,50	0,28	0,47	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,2	-10,30	-1,16	-1,92	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	120,0	7,50	0,85	1,40	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	13,50	1,53	2,52	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	2,50	0,28	0,47	
78	LwK 7.4.1	109,0	-3,50	-0,40	-0,65	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	123,0	10,50	1,19	1,96	
83	Redox incl.	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	2,50	0,28	0,47	
90	LwK 7.4.2	122,0	9,50	1,07	1,77	
94	LwK 7.6	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
95	LwK 7.4.2	113,5	1,00	0,11	0,19	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	-6,50	-0,74	-1,21	
97	LwK 7.3	109,5	-3,00	-0,34	-0,56	

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
98	LwK 7.4.2	100,0	-12,50	-1,41	-2,33	
99	LwK 7.4.2	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,0	3,50	0,40	0,65	
105	LwK 7.3	113,8	1,30	0,15	0,24	
110	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	11,50	1,30	2,15	
202	LwK 7.8	104,3	-8,20	-0,93	-1,53	
205	LwK 7.8	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
206	LwK 7.8	114,0	1,50	0,17	0,28	
207	LwK 7.8	81,0	-31,50	-3,56	-5,88	(***)
208	LwK 7.8	112,1	-0,40	-0,05	-0,07	
209	LwK 7.8	101,0	-11,50	-1,30	-2,15	
210	LwK 7.8	120,0	7,50	0,85	1,40	
211	LwK 7.8	123,0	10,49	1,19	1,96	
213	LwK 7.8	121,0	8,50	0,96	1,59	
219	LwK 7.8	110,0	-2,50	-0,28	-0,47	
220	LwK 7.8	115,0	2,50	0,28	0,47	
225	LwK 7.8	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
237	LwK 7.8	130,0	17,50	1,98	3,27	
243	LwK 7.8	91,0	-21,50	-2,43	-4,01	
248	LwK 7.8	111,0	-1,50	-0,17	-0,28	
250	LwK 7.8	103,0	-9,50	-1,07	-1,77	
251	LwK 7.8	108,0	-4,50	-0,51	-0,84	
257	LwK 7.8	113,0	0,50	0,06	0,09	
261	LwK 7.8	108,6	-3,95	-0,45	-0,74	
262	LwK 7.8	119,5	7,00	0,79	1,31	
263	LwK 7.8	118,0	5,50	0,62	1,03	
264	LwK 7.8	109,0	-3,50	-0,40	-0,65	
265	LwK 7.8	97,0	-15,50	-1,75	-2,89	
277	LwK 7.8	113,0	0,50	0,06	0,09	
278	LwK 7.8	125,0	12,50	1,41	2,33	
279	LwK 7.8	115,0	2,50	0,28	0,47	
280	LwK 7.8	105,0	-7,50	-0,85	-1,40	
287	LwK 7.8	100,0	-12,50	-1,41	-2,33	
328	LwK 7.8	93,5	-18,96	-2,14	-3,54	
330	LwK 7.8	84,0	-28,50	-3,22	-5,32	(***)
337	LwK 7.8	130,0	17,50	1,98	3,27	

(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der maßgeblichen Werte 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
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	-8,00	-0,86	-1,49	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	13,00	1,39	2,43	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	123,0	3,00	0,32	0,56	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	124,0	4,00	0,43	0,75	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	9,00	0,96	1,68	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	125,0	5,00	0,54	0,93	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	-7,00	-0,75	-1,31	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	5,00	0,54	0,93	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,2	-17,80	-1,91	-3,32	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	120,0	0,00	0,00	0,00	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	6,00	0,64	1,12	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	-5,00	-0,54	-0,93	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	123,0	3,00	0,32	0,56	
83	Redox incl.	105,0	-15,00	-1,61	-2,80	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	-5,00	-0,54	-0,93	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,0	-4,00	-0,43	-0,75	
110	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	4,00	0,43	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
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	-8,50	-1,01	-1,59	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	-12,50	-1,48	-2,33	
24	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	3,50	0,41	0,65	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	2,50	0,30	0,47	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	0,50	0,06	0,09	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	13,50	1,60	2,52	
51	LwK 7.5.2(excl. Red.)	103,0	-3,50	-0,41	-0,65	
59	LwK 7.5.2(excl. Red.)	107,0	0,50	0,06	0,09	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	113,0	6,50	0,77	1,21	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	109,0	2,50	0,30	0,47	
65	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-1,50	-0,18	-0,28	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	106,0	-0,50	-0,06	-0,09	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	5,50	0,65	1,03	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	3,50	0,41	0,65	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	88,7	-17,80	-2,11	-3,32	
73	LwK 7.5.3(excl. Red.)	108,0	1,50	0,18	0,28	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	-0,50	-0,06	-0,09	
76	LwK 7.5.1(excl. Red.)	99,0	-7,50	-0,89	-1,40	
83	Redox excl.	89,0	-17,50	-2,07	-3,27	
84	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	-6,50	-0,77	-1,21	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	-0,50	-0,06	-0,09	
110	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	2,50	0,30	0,47	

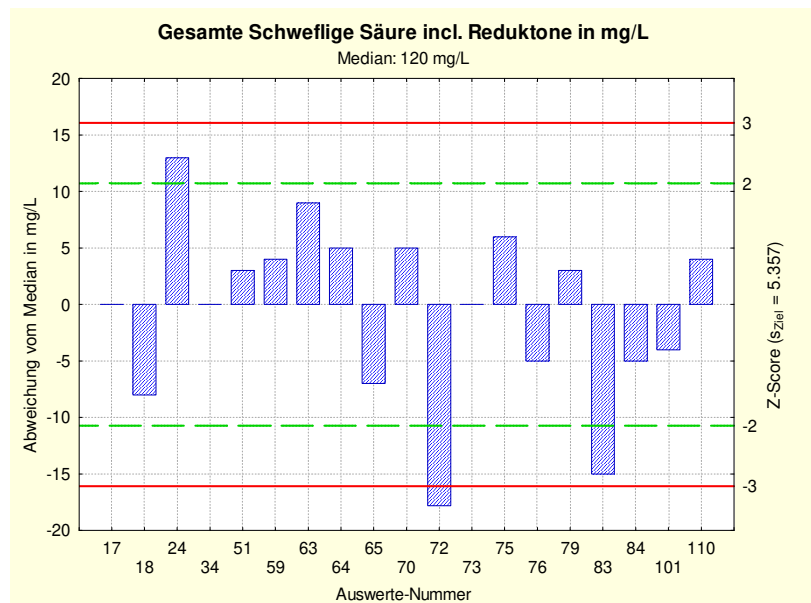
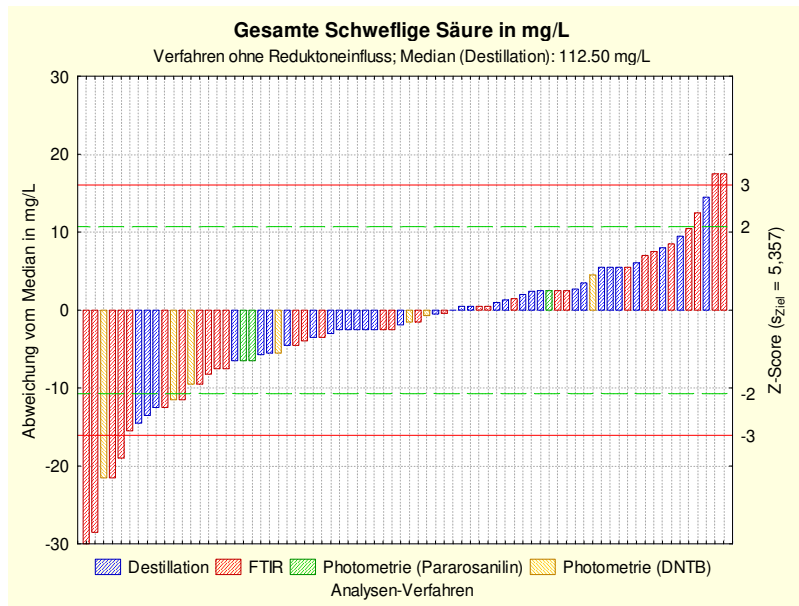
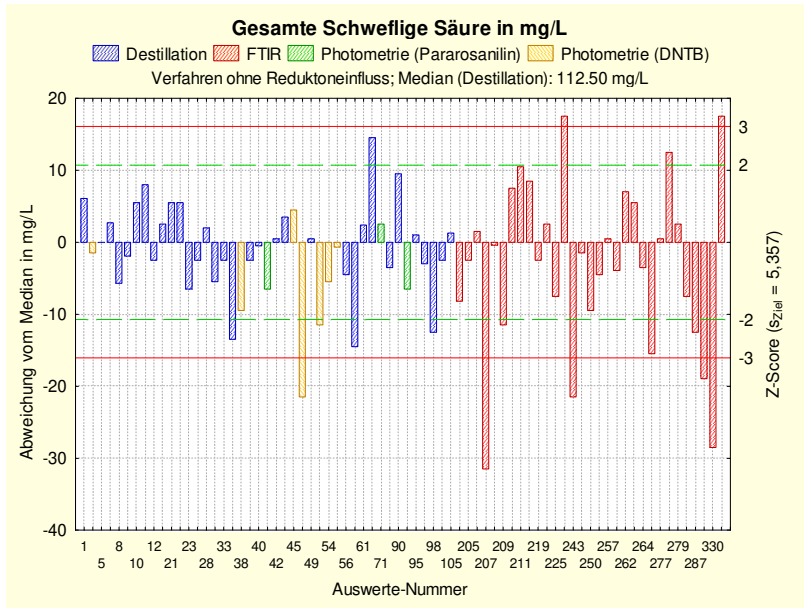
Blau markierte Verfahrensangaben: wurden unter Ausschluss der Reduktone mitgeteilt. Übrige Werte nachberechnet.

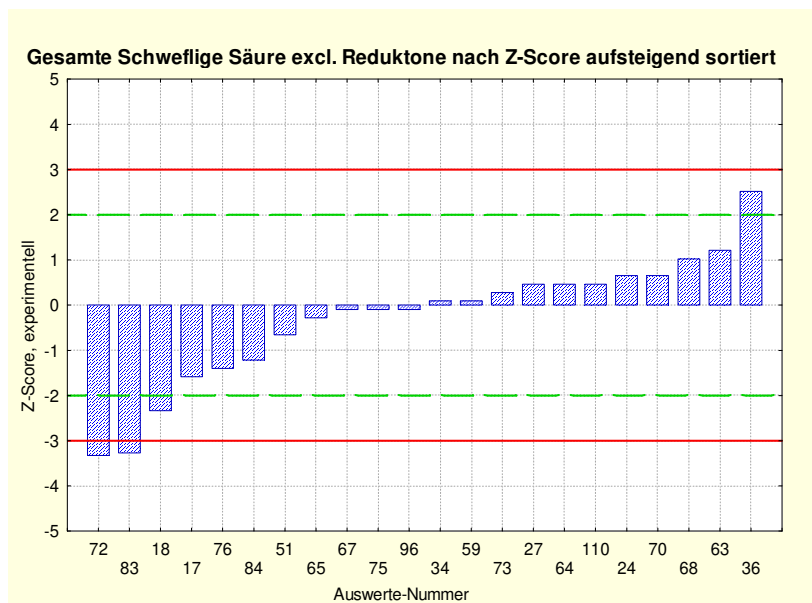
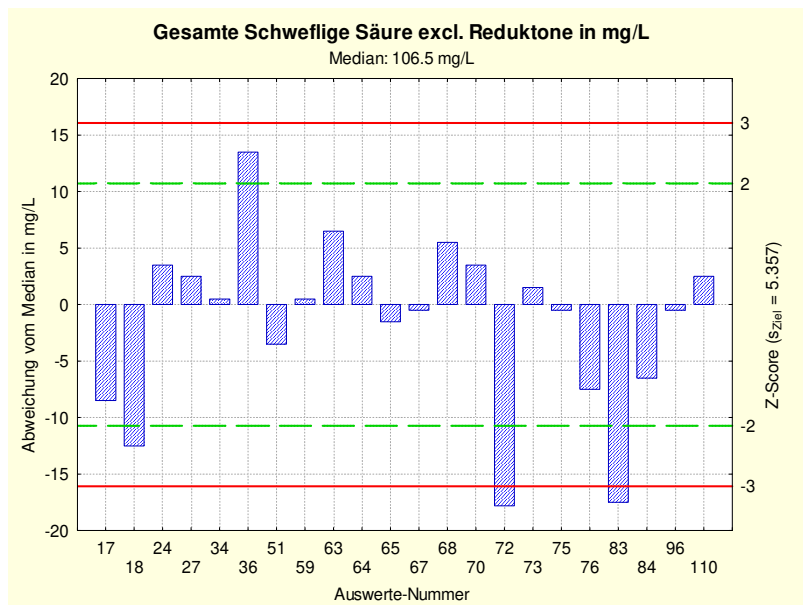
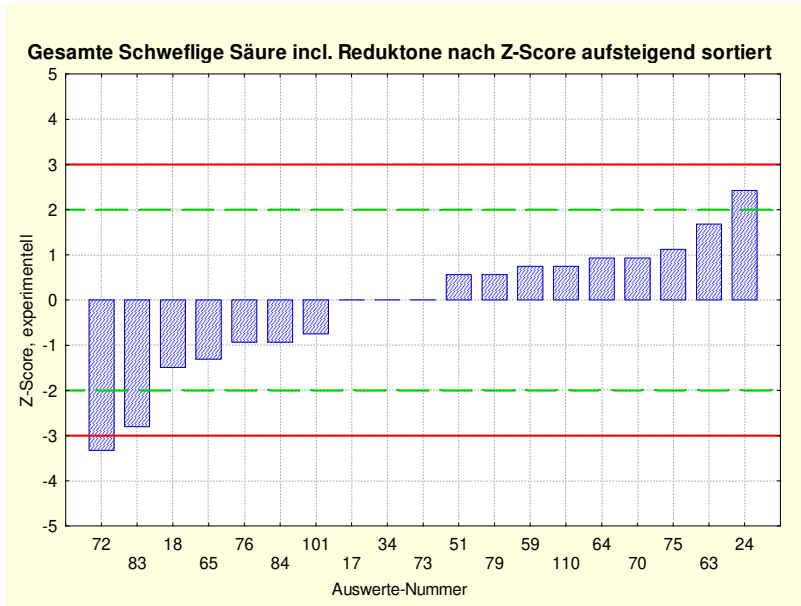
4.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]; jeweils alle Daten	Destillation	jodometrisch incl. Reduktone	jodometrisch excl. Reduktone
Gültige Werte	33	19	22
Minimalwert	98,0	102,2	88,7
Mittelwert	112,10	119,48	104,94
Median	112,50	120,00	106,50
Maximalwert	127,0	133,0	120,0
Standardabweichung (s_L)	6,266	7,824	7,599
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,091	1,795	1,620
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	8,842	9,340	8,440
Zielstandardabweichung experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,71	0,84	0,90
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,17	1,46	1,42
Quotient (u_M/s_H)	0,12	0,19	0,19
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,20	0,34	0,30

4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	13	113,10	5,15
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	109,70	7,02
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	113,22	6,28
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	106,00	
	alle Destillationsverfahren	33	112,33	5,51
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	13	119,55	8,32
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	2	123,50	0,80
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein ohne Reduktionabzug der	3	122,67	2,85
Redox incl.	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter mV-Modus und Redoxelektrode mit Reduktonen	1	105,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktionabzug	19	119,93	7,40
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktionabzug	4	111,54	6,39
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	106,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktionabzug	5	110,55	6,48
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	3	108,95	5,79
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	106,14	9,33
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	31	109,91	11,47





5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT20P03

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	0,99406	-0,000250	-1,89	
02	LwK 8.1	0,99420	-0,000110	-0,83	
03	LwK 8.4	0,99429	-0,000020	-0,15	
04	LwK 8.4	0,99429	-0,000020	-0,15	
05	LwK 8.4	0,99433	0,000020	0,15	
06	LwK 8.4	0,99439	0,000080	0,61	
09	LwK 8.4	0,99429	-0,000020	-0,15	
10	LwK 8.4	0,99433	0,000020	0,15	
11	LwK 8.4	0,99439	0,000080	0,61	
13	LwK 8.4	0,99425	-0,000060	-0,45	
16	LwK 8.4	0,99450	0,000190	1,44	
18	LwK 8.4	0,99420	-0,000110	-0,83	
19	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
21	LwK 8.4	0,99434	0,000030	0,23	
22	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
23	LwK 8.4	0,99445	0,000140	1,06	
24	LwK 8.4	0,99424	-0,000070	-0,53	
26	LwK 8.4	0,99436	0,000050	0,38	
27	LwK 8.4	0,99420	-0,000110	-0,83	
28	LwK 8.4	0,99434	0,000030	0,23	
30	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
32	LwK 8.1	0,99440	0,000090	0,68	
34	LwK 8.4	0,99428	-0,000030	-0,23	
36	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
37	LwK 8.3	0,99407	-0,000240	-1,82	
38	LwK 8.4	0,99435	0,000040	0,30	
39	LwK 8.4	0,99426	-0,000050	-0,38	
40	LwK 8.4	0,99424	-0,000070	-0,53	
41	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
42	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
43	LwK 8.4	0,99428	-0,000030	-0,23	
44	LwK 8.4	0,99425	-0,000060	-0,45	
45	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
46	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
47	LwK 8.4	0,99450	0,000190	1,44	
49	LwK 8.4	0,99434	0,000030	0,23	
50	LwK 8.4	0,99450	0,000190	1,44	
51	LwK 8.4	0,99431	0,000000	0,00	
52	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
55	LwK 8.4	0,99428	-0,000030	-0,23	
57	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
59	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
60	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
61	LwK 8.4	0,99426	-0,000045	-0,34	
63	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
64	LwK 8.4	0,99450	0,000190	1,44	
66	LwK 8.4	0,99440	0,000090	0,68	
68	LwK 8.4	0,99437	0,000060	0,45	
72	LwK 8.4	0,98531	-0,008999	-68,18	(**)
73	LwK 8.4	0,99510	0,000790	5,98	(**)
78	LwK 8.4	0,99442	0,000110	0,83	
79	LwK 8.2	0,99460	0,000290	2,20	
80	LwK 8.4	0,99450	0,000190	1,44	
81	LwK 8.4	0,99431	0,000000	0,00	
82	LwK 8.4	0,99424	-0,000070	-0,53	
86	LwK 8.4	0,99430	-0,000010	-0,08	
91	LwK 8.4	0,99428	-0,000030	-0,23	

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

5.1.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
202	FTIR	0,99425	-0,000060	-0,32	
203	FTIR	0,99467	0,000360	1,89	
204	FTIR	0,99480	0,000490	2,58	
205	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
206	FTIR	0,99431	0,000000	0,00	
207	FTIR	0,99410	-0,000210	-1,11	
208	FTIR	0,99500	0,000690	3,63	
209	FTIR	0,99446	0,000150	0,79	
210	FTIR	0,99427	-0,000040	-0,21	
211	FTIR	0,99458	0,000270	1,42	
212	FTIR	0,99410	-0,000210	-1,11	
213	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
215	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
216	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
217	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
218	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
219	FTIR	0,99411	-0,000200	-1,05	
220	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
221	FTIR	0,99415	-0,000160	-0,84	
222	FTIR	0,99470	0,000385	2,03	
223	FTIR	0,99381	-0,000500	-2,63	
224	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
225	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
226	FTIR	0,99428	-0,000030	-0,16	
227	FTIR	0,99390	-0,000410	-2,16	
228	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
229	FTIR	0,99480	0,000490	2,58	
230	FTIR	0,99415	-0,000160	-0,84	
232	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
234	FTIR	0,99443	0,000120	0,63	
235	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
236	FTIR	0,99427	-0,000040	-0,21	
237	FTIR	0,99471	0,000400	2,11	
240	FTIR	0,99438	0,000070	0,37	
241	FTIR	0,99453	0,000220	1,16	
242	FTIR	0,99443	0,000120	0,63	
243	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
244	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
245	FTIR	0,99420	-0,000110	-0,58	
246	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
247	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
248	FTIR	0,99480	0,000490	2,58	
249	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
250	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
251	FTIR	0,99429	-0,000020	-0,11	
253	FTIR	0,99460	0,000290	1,53	
255	FTIR	0,99422	-0,000090	-0,47	
256	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
257	FTIR	0,99400	-0,000310	-1,63	
258	FTIR	0,99471	0,000400	2,11	
259	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
260	FTIR	0,99460	0,000290	1,53	
261	FTIR	0,99420	-0,000110	-0,58	
262	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
263	FTIR	0,99500	0,000690	3,63	
264	FTIR	0,99410	-0,000210	-1,11	
265	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
266	FTIR	0,99444	0,000130	0,68	
267	FTIR	0,99430	-0,000010	-0,05	
268	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
269	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
270	FTIR	0,99433	0,000020	0,11	
271	FTIR	0,99459	0,000280	1,47	
273	FTIR	0,99490	0,000590	3,11	
274	FTIR	0,99496	0,000650	3,42	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	0,99410	-0,000210	-1,11	
276	FTIR	0,99470	0,000390	2,05	
277	FTIR	0,99490	0,000590	3,11	
278	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
279	FTIR	0,99510	0,000790	4,16	
280	FTIR	0,99451	0,000200	1,05	
281	FTIR	0,99490	0,000590	3,11	
282	FTIR	0,99560	0,001290	6,79	(***)
283	FTIR	0,99500	0,000690	3,63	
284	FTIR	0,99460	0,000290	1,53	
285	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
286	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
287	FTIR	0,99450	0,000190	1,00	
321	FTIR	0,99455	0,000240	1,26	
328	FTIR	0,99403	-0,000280	-1,47	
330	FTIR	0,99440	0,000090	0,47	
337	FTIR	0,99468	0,000370	1,95	

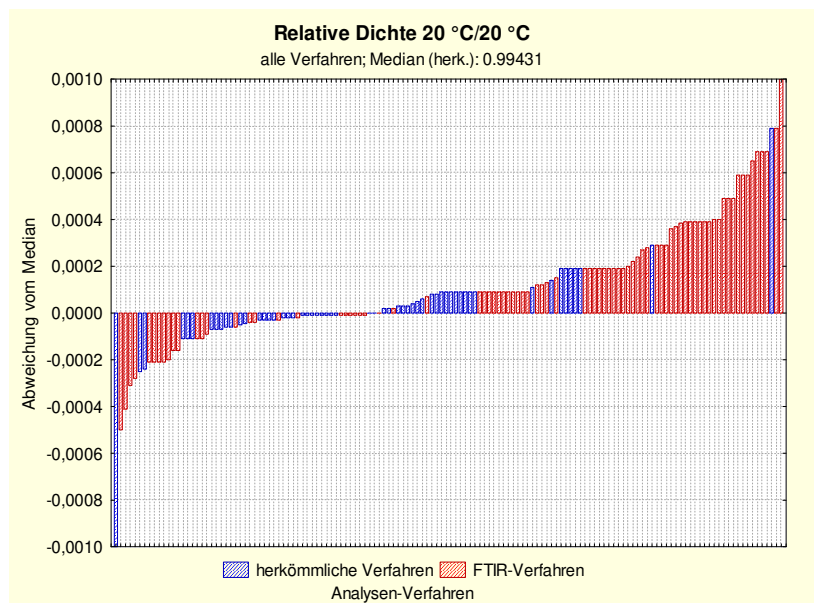
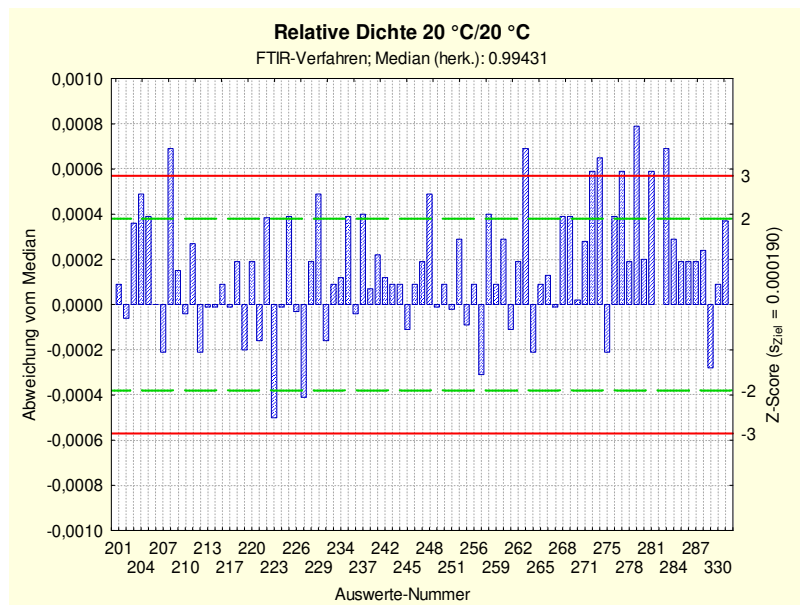
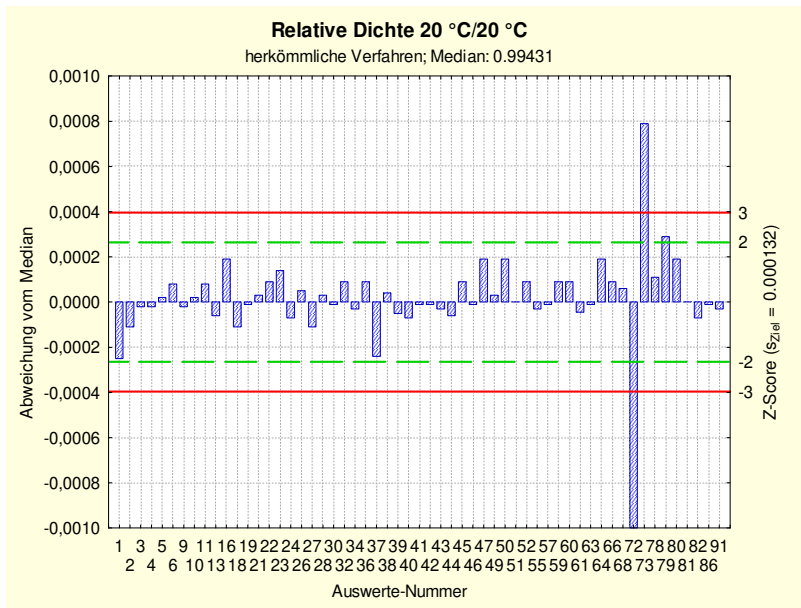
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

5.1.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	57	55
Minimalwert	0,98531	0,99406
Mittelwert	0,994186	0,994331
Median	0,994310	0,994310
Maximalwert	0,99510	0,99460
Standardabweichung (s_L)	0,001205	0,000101
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000160	0,000014
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 ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	9,13	0,76
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	6,34	0,53
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	1,21	0,10
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,84	0,07

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	3	0,99422	0,000194
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99460	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	0,99407	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	52	0,99433	0,000084
	herkömmliche Verfahren	57	0,99433	0,000095
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	0,99447	0,000272



5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Laborergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.4	87,61	0,500	0,20	0,93	
02	LwK 2.4	87,50	0,390	0,16	0,73	
03	LwK 2.9	88,50	1,390	0,55	2,60	
04	LwK 2.1	87,53	0,417	0,17	0,78	
05	LwK 2.4	87,38	0,270	0,11	0,50	
06	LwK 2.9	86,98	-0,130	-0,05	-0,24	
09	LwK 2.1	87,42	0,310	0,12	0,58	
10	LwK 2.1	87,30	0,190	0,08	0,36	
11	LwK 2.4	86,34	-0,770	-0,31	-1,44	
13	LwK 2.1	86,70	-0,410	-0,16	-0,77	
16	LwK 2.9	86,60	-0,510	-0,20	-0,95	
18	LwK 2.9	88,70	1,590	0,63	2,97	
19	LwK 2.1	87,62	0,510	0,20	0,95	
21	LwK 2.9	87,80	0,690	0,27	1,29	
22	LwK 2.7	86,79	-0,320	-0,13	-0,60	
23	LwK 2.9	87,60	0,490	0,19	0,92	
24	LwK 2.5	87,60	0,490	0,19	0,92	
26	LwK 2.1	87,10	-0,010	-0,00	-0,02	
27	LwK 2.4	87,20	0,090	0,04	0,17	
28	LwK 2.5	87,30	0,190	0,08	0,36	
30	LwK 2.1	87,11	0,000	0,00	0,00	
32	LwK 2.4	87,20	0,090	0,04	0,17	
33	LwK 2.9	87,90	0,790	0,31	1,48	
35	LwK 2.9	87,10	-0,010	-0,00	-0,02	
37	LwK 2.2	88,30	1,190	0,47	2,22	
38	LwK 2.9	87,60	0,490	0,19	0,92	
39	LwK 2.9	87,90	0,790	0,31	1,48	
40	LwK 2.4	87,35	0,240	0,10	0,45	
41	LwK 2.9	87,55	0,440	0,17	0,82	
42	LwK 2.4	86,60	-0,510	-0,20	-0,95	
43	LwK 2.9	87,46	0,350	0,14	0,65	
44	LwK 2.1	88,10	0,990	0,39	1,85	
45	LwK 2.9	89,20	2,090	0,83	3,91	
46	LwK 2.9	90,70	3,590	1,43	6,71	(***)
47	LwK 2.4	86,40	-0,710	-0,28	-1,33	
49	LwK 2.9	87,65	0,540	0,21	1,01	
50	LwK 2.9	85,70	-1,410	-0,56	-2,64	
51	LwK 2.9	87,86	0,750	0,30	1,40	
52	LwK 2.9	88,40	1,290	0,51	2,41	
54	LwK 2.1	86,97	-0,140	-0,06	-0,26	
55	LwK 2.9	87,00	-0,110	-0,04	-0,21	
57	LwK 2.9	89,10	1,990	0,79	3,72	
59	LwK 2.1	86,50	-0,610	-0,24	-1,14	
60	LwK 2.9	87,40	0,290	0,12	0,54	
61	LwK 2.1	87,27	0,160	0,06	0,30	
63	LwK 2.5	86,55	-0,560	-0,22	-1,05	
64	LwK 2.9	88,10	0,990	0,39	1,85	
66	LwK 2.1	86,90	-0,210	-0,08	-0,39	
68	LwK 2.5	86,92	-0,190	-0,08	-0,36	
70	LwK 2.3	85,00	-2,110	-0,84	-3,94	
72	LwK 2.4	86,66	-0,451	-0,18	-0,84	
73	LwK 2.9	86,10	-1,010	-0,40	-1,89	
75	LwK 2.4	86,21	-0,900	-0,36	-1,68	
78	LwK 2.1	84,80	-2,310	-0,92	-4,32	
79	LwK 2.2	88,40	1,290	0,51	2,41	
81	LwK 2.9	87,83	0,720	0,29	1,35	
82	LwK 2.9	87,85	0,744	0,30	1,39	
91	LwK 2.9	87,37	0,260	0,10	0,49	
96	LwK 2.9	88,20	1,090	0,43	2,04	
99	LwK 2.9	87,96	0,850	0,34	1,59	

Die rot markierten Werte wurde mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet.
 (***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

Fortsetzung: herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
101	LwK 2.9	87,55	0,440	0,17	0,82	
103	LwK 2.9	87,80	0,690	0,27	1,29	
104	LwK 2.4	85,49	-1,620	-0,64	-3,03	
109	LwK 2.9	88,70	1,590	0,63	2,97	
111	NMR	84,99	-2,118	-0,84	-3,96	
112	NMR	82,26	-4,852	-1,93	-9,07	
113	NMR	85,31	-1,800	-0,72	-3,36	
114	NMR	85,72	-1,395	-0,55	-2,61	
116	NMR	84,76	-2,354	-0,94	-4,40	
117	NMR	85,90	-1,210	-0,48	-2,26	

5.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	87,20	0,090	0,04	0,10	
202	LwK 2.8	89,01	1,900	0,76	2,14	
203	LwK 2.8	87,08	-0,030	-0,01	-0,03	
204	LwK 2.8	87,61	0,496	0,20	0,56	
205	LwK 2.8	88,07	0,960	0,38	1,08	
206	LwK 2.8	88,57	1,460	0,58	1,65	
207	LwK 2.8	87,40	0,290	0,12	0,33	
208	LwK 2.8	88,59	1,480	0,59	1,67	
209	LwK 2.8	88,02	0,910	0,36	1,03	
210	LwK 2.8	87,81	0,700	0,28	0,79	
211	LwK 2.8	87,07	-0,040	-0,02	-0,05	
212	LwK 2.8	87,20	0,090	0,04	0,10	
213	LwK 2.8	89,14	2,030	0,81	2,29	
215	LwK 2.8	88,30	1,190	0,47	1,34	
216	LwK 2.8	87,80	0,690	0,27	0,78	
217	LwK 2.8	88,26	1,150	0,46	1,30	
218	LwK 2.8	88,50	1,390	0,55	1,57	
219	LwK 2.8	88,10	0,990	0,39	1,12	
220	LwK 2.8	87,00	-0,110	-0,04	-0,12	
221	LwK 2.8	87,45	0,340	0,14	0,38	
222	LwK 2.8	85,20	-1,910	-0,76	-2,16	
224	LwK 2.8	86,70	-0,410	-0,16	-0,46	
225	LwK 2.8	86,99	-0,120	-0,05	-0,14	
226	LwK 2.8	87,80	0,690	0,27	0,78	
227	LwK 2.8	87,40	0,290	0,12	0,33	
228	LwK 2.8	87,46	0,350	0,14	0,40	
229	LwK 2.8	86,90	-0,210	-0,08	-0,24	
230	LwK 2.8	85,92	-1,190	-0,47	-1,34	
232	LwK 2.8	86,90	-0,210	-0,08	-0,24	
234	LwK 2.8	88,65	1,540	0,61	1,74	
235	LwK 2.8	86,60	-0,510	-0,20	-0,58	
236	LwK 2.8	87,30	0,190	0,08	0,21	
237	LwK 2.8	86,50	-0,610	-0,24	-0,69	
240	LwK 2.8	87,30	0,190	0,08	0,21	
241	LwK 2.8	87,49	0,380	0,15	0,43	
242	LwK 2.8	86,84	-0,270	-0,11	-0,30	
243	LwK 2.8	87,10	-0,010	-0,00	-0,01	
244	LwK 2.8	87,40	0,290	0,12	0,33	
245	LwK 2.8	86,90	-0,210	-0,08	-0,24	
246	LwK 2.8	86,80	-0,310	-0,12	-0,35	
247	LwK 2.8	86,72	-0,390	-0,16	-0,44	
248	LwK 2.8	87,90	0,790	0,31	0,89	
249	LwK 2.8	87,41	0,300	0,12	0,34	
250	LwK 2.8	88,30	1,190	0,47	1,34	
251	LwK 2.8	88,75	1,640	0,65	1,85	
253	LwK 2.8	88,60	1,490	0,59	1,68	
254	LwK 2.8	86,70	-0,410	-0,16	-0,46	
255	LwK 2.8	87,60	0,490	0,19	0,55	
256	LwK 2.8	87,90	0,790	0,31	0,89	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

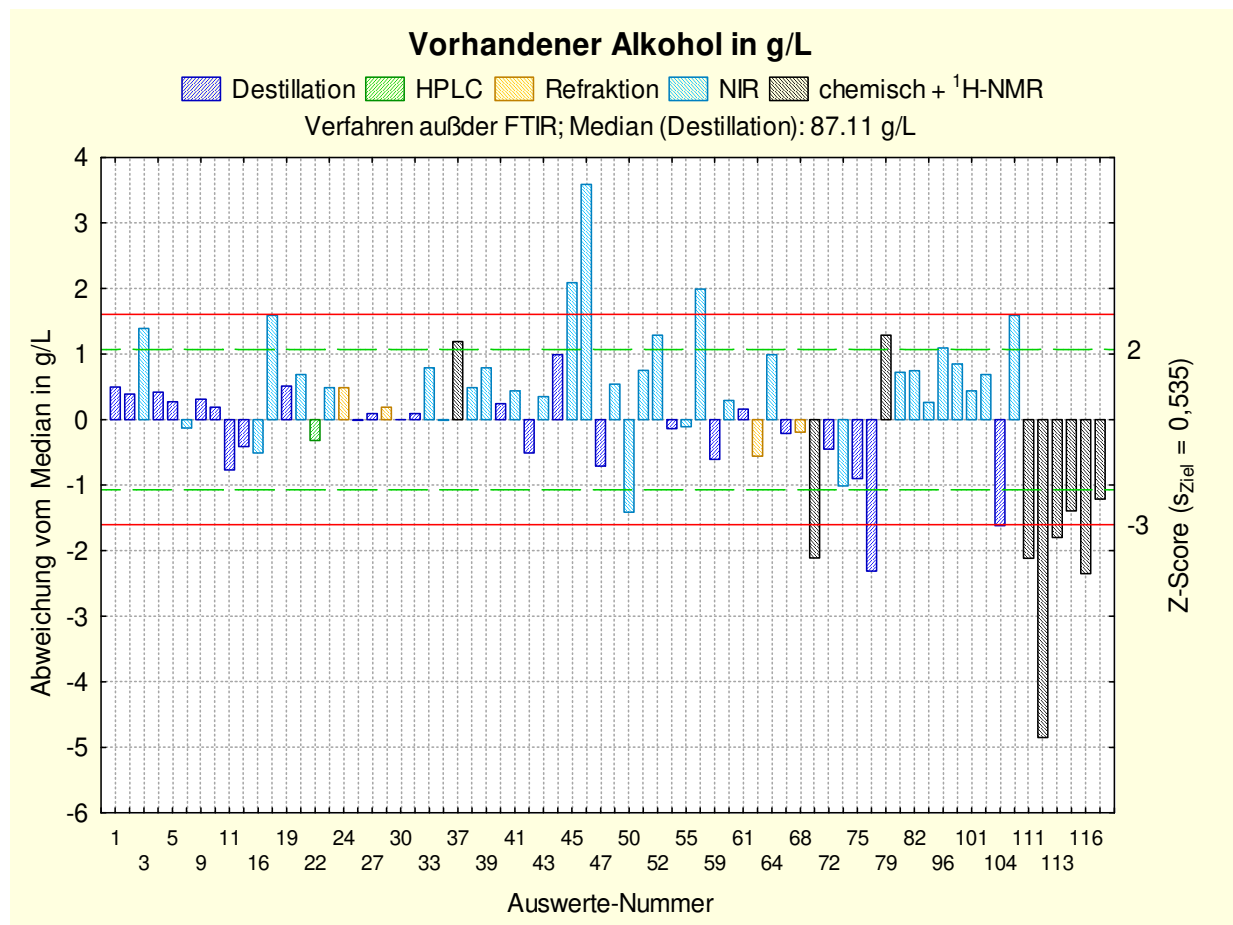
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
257	LwK 2.8	88,60	1,490	0,59	1,68	
258	LwK 2.8	88,34	1,230	0,49	1,39	
259	LwK 2.8	85,40	-1,710	-0,68	-1,93	
260	LwK 2.8	88,30	1,190	0,47	1,34	
261	LwK 2.8	87,80	0,690	0,27	0,78	
262	LwK 2.8	87,80	0,690	0,27	0,78	
263	LwK 2.8	86,50	-0,610	-0,24	-0,69	
264	LwK 2.8	89,04	1,930	0,77	2,18	
265	LwK 2.8	87,60	0,490	0,19	0,55	
266	LwK 2.8	86,34	-0,770	-0,31	-0,87	
267	LwK 2.8	88,20	1,090	0,43	1,23	
268	LwK 2.8	87,94	0,830	0,33	0,94	
269	LwK 2.8	88,26	1,150	0,46	1,30	
270	LwK 2.8	88,00	0,890	0,35	1,00	
271	LwK 2.8	87,03	-0,080	-0,03	-0,09	
273	LwK 2.8	87,30	0,190	0,08	0,21	
274	LwK 2.8	87,77	0,660	0,26	0,74	
275	LwK 2.8	88,58	1,472	0,59	1,66	
276	LwK 2.8	87,30	0,190	0,08	0,21	
277	LwK 2.8	88,16	1,050	0,42	1,19	
278	LwK 2.8	86,80	-0,310	-0,12	-0,35	
279	LwK 2.8	87,74	0,630	0,25	0,71	
280	LwK 2.8	85,20	-1,910	-0,76	-2,16	
281	LwK 2.8	86,83	-0,280	-0,11	-0,32	
282	LwK 2.8	86,91	-0,204	-0,08	-0,23	
283	LwK 2.8	84,65	-2,460	-0,98	-2,78	
284	LwK 2.8	85,48	-1,630	-0,65	-1,84	
285	LwK 2.8	88,70	1,590	0,63	1,79	
286	LwK 2.8	88,77	1,660	0,66	1,87	
287	LwK 2.8	88,20	1,090	0,43	1,23	
312	LwK 2.8	87,50	0,390	0,16	0,44	
321	LwK 2.8	86,60	-0,510	-0,20	-0,58	
328	LwK 2.8	87,97	0,860	0,34	0,97	
330	LwK 2.8	87,00	-0,110	-0,04	-0,12	
337	LwK 2.8	86,28	-0,830	-0,33	-0,94	

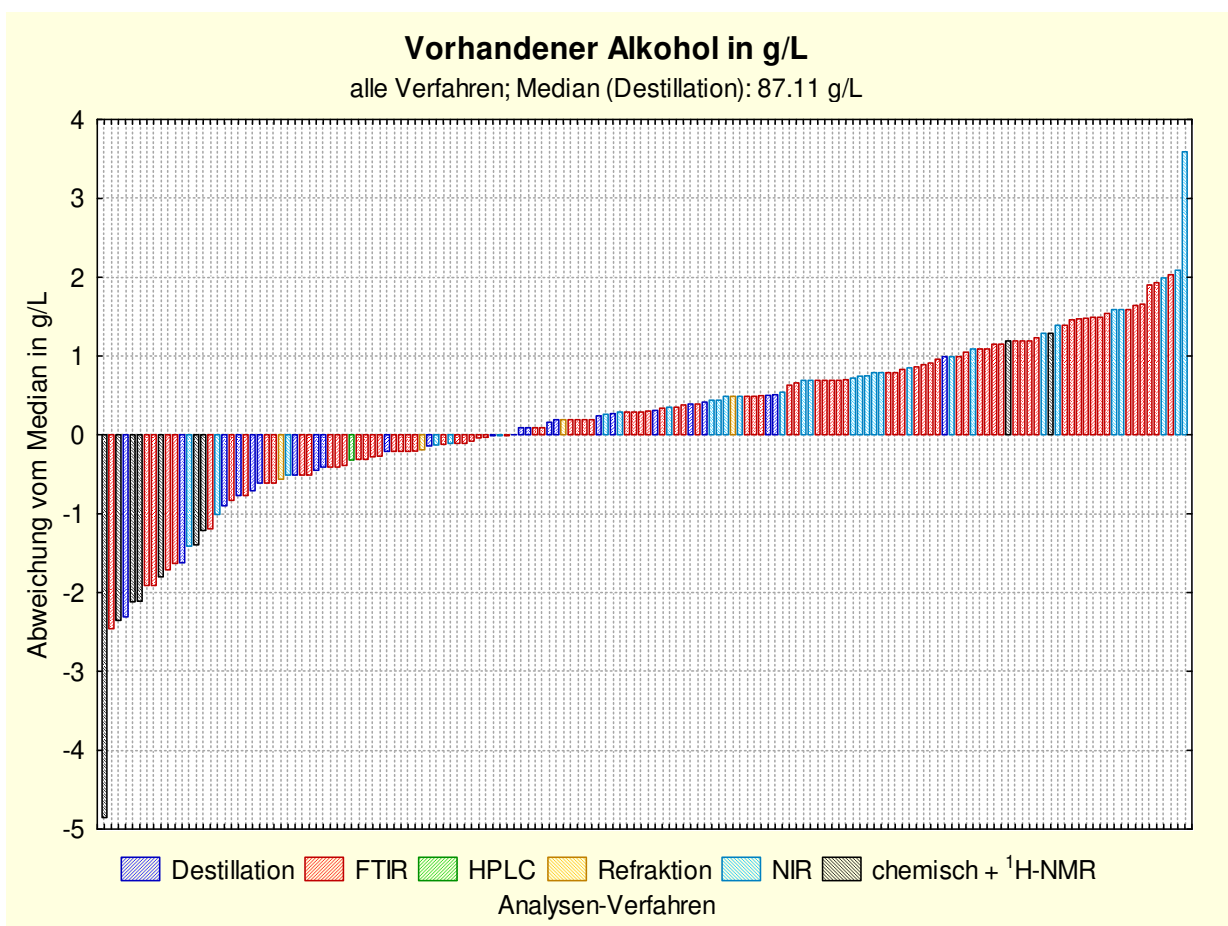
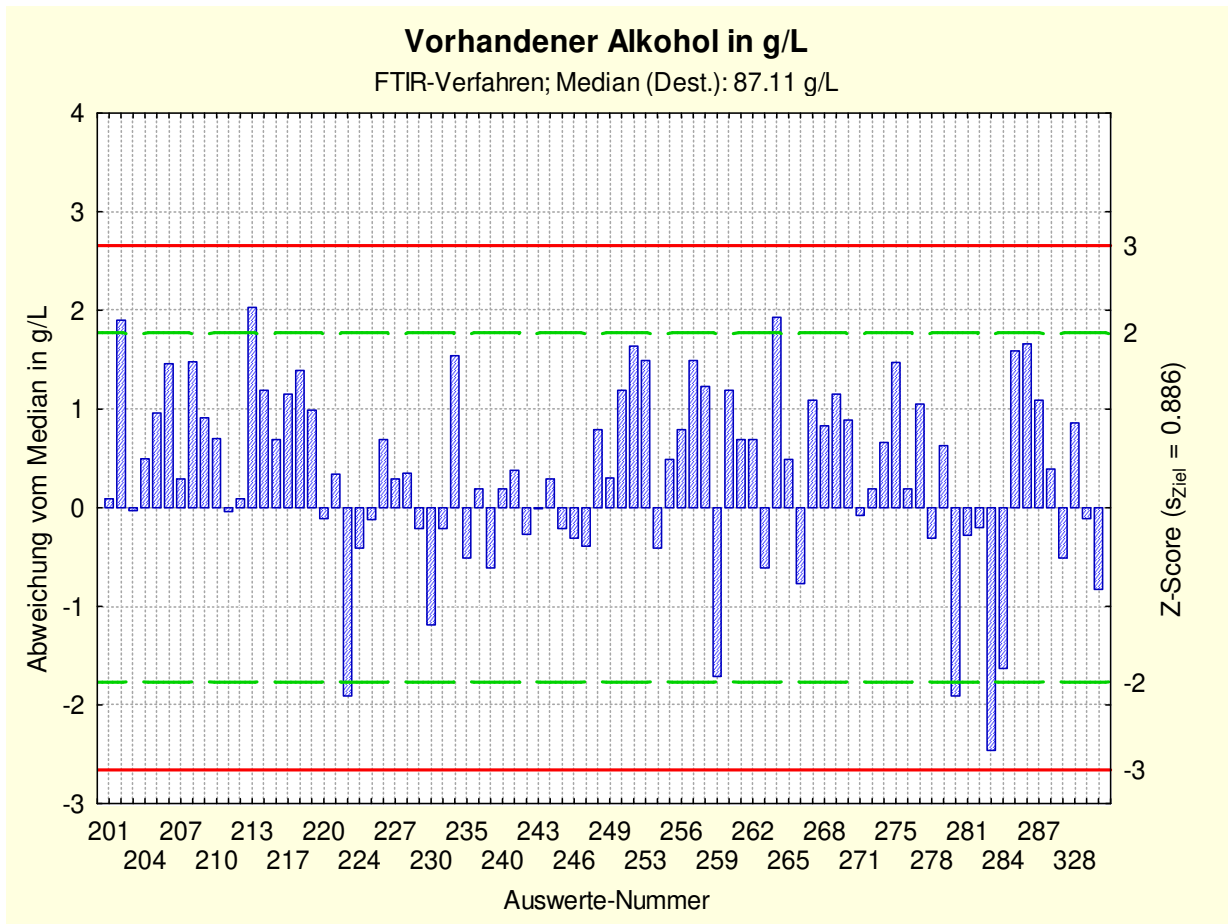
5.2.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	25
Minimalwert	84,80
Mittelwert	86,930
Median	87,110
Maximalwert	88,10
Standardabweichung (s_L)	0,714
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,143
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,516
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,28
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,34
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,81
Quotient (u_M/s_H)	0,06
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,27
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	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	13	87,129	0,496
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	12 25	86,860 87,000	0,658 0,582
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	88,350	0,080
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	85,000	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	4	87,093	0,517
LwK 2.7	HPLC z.B. nach Heidger	1	86,790	
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	87,521	0,875
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	31	87,790	0,728
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	85,072	0,876





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	22,0	-1,40	-1,70	-2,36	
02	LwK 3.3	22,9	-0,50	-0,61	-0,84	
03	LwK 3.3	23,8	0,40	0,49	0,67	
04	LwK 3.3	23,7	0,30	0,36	0,51	
05	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
06	LwK 3.3	23,4	0,04	0,05	0,07	
09	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
10	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.1	23,2	-0,20	-0,24	-0,34	
13	LwK 3.3	23,0	-0,40	-0,49	-0,67	
16	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
18	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
19	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 3.3	23,6	0,20	0,24	0,34	
22	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.3	23,8	0,40	0,49	0,67	
24	LwK 3.3	23,3	-0,10	-0,12	-0,17	
26	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 3.3	23,1	-0,30	-0,36	-0,51	
28	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
30	LwK 3.2	23,3	-0,10	-0,12	-0,17	
32	LwK 3.3	23,6	0,20	0,24	0,34	
37	LwK 3.3	23,2	-0,20	-0,24	-0,34	
38	LwK 3.3	23,8	0,40	0,49	0,67	
39	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
40	LwK 3.3	23,1	-0,30	-0,36	-0,51	
41	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
42	LwK 3.3	23,1	-0,30	-0,36	-0,51	
43	LwK 3.2	23,4	0,00	0,00	0,00	
44	LwK 3.3	23,6	0,20	0,24	0,34	
45	LwK 3.3	24,3	0,90	1,09	1,52	
46	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
47	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
49	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	23,7	0,30	0,36	0,51	
52	LwK 3.3	22,9	-0,50	-0,61	-0,84	
54	LwK 3.2	23,3	-0,10	-0,12	-0,17	
55	LwK 3.3	23,1	-0,30	-0,36	-0,51	
57	LwK 3.3	24,1	0,70	0,85	1,18	
59	LwK 3.2	23,2	-0,20	-0,24	-0,34	
60	LwK 3.3	23,5	0,10	0,12	0,17	
61	LwK 3.2	23,2	-0,20	-0,24	-0,34	
63	FTIR (gemessen)	23,0	-0,40	-0,49	-0,67	
66	LwK 3.2	23,3	-0,10	-0,12	-0,17	
73	LwK 3.3	24,9	1,50	1,82	2,53	
78	LwK 3.2	22,8	-0,60	-0,73	-1,01	
79	LwK 3.3	24,5	1,10	1,34	1,85	
81	LwK 3.3	23,8	0,40	0,49	0,67	
82	LwK 3.3	23,6	0,20	0,24	0,34	
91	LwK 3.3	23,4	0,00	0,00	0,00	
109	LwK 3.3	24,5	1,10	1,34	1,85	

Rote Verfahrensangabe: FTIR-Werte sollen nicht als Ergebnisse herkömmlicher Verfahren angegeben werden.

5.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	23,8	0,42	0,51	0,71	
202	FTIR (gemessen)	23,7	0,30	0,36	0,51	
203	FTIR (gemessen)	24,4	1,01	1,23	1,70	
205	FTIR (gemessen)	24,1	0,67	0,81	1,13	
208	FTIR (gemessen)	26,0	2,60	3,16	4,38	
209	FTIR-Basis	24,2	0,80	0,97	1,35	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
210	k. A.	23,5	0,06	0,07	0,10	
211	FTIR (gemessen)	24,6	1,15	1,40	1,94	
217	FTIR (gemessen)	24,4	0,98	1,19	1,65	
218	FTIR (gemessen)	24,2	0,80	0,97	1,35	
219	FTIR (gemessen)	24,2	0,80	0,97	1,35	
220	FTIR (gemessen)	24,7	1,30	1,58	2,19	
221	FTIR (gemessen)	23,5	0,10	0,12	0,17	
222	FTIR (gemessen)	24,3	0,90	1,09	1,52	
224	FTIR (gemessen)	24,7	1,30	1,58	2,19	
227	FTIR (gemessen)	24,5	1,10	1,34	1,85	
228	FTIR (gemessen)	24,4	0,95	1,15	1,60	
232	k. A.	24,3	0,90	1,09	1,52	
236	LwK 3.3 (herk.)	23,5	0,10	0,12	0,17	
237	FTIR (gemessen)	24,5	1,12	1,36	1,89	
250	FTIR (gemessen)	24,8	1,40	1,70	2,36	
251	FTIR (gemessen)	24,1	0,65	0,79	1,09	
253	FTIR (gemessen)	24,5	1,10	1,34	1,85	
257	herk./FTIR	23,9	0,50	0,61	0,84	
258	FTIR-Basis	24,8	1,40	1,70	2,36	
259	FTIR-Basis	22,6	-0,80	-0,97	-1,35	
261	FTIR (gemessen)	24,4	1,00	1,21	1,68	
262	k. A.	23,5	0,10	0,12	0,17	
263	FTIR (gemessen)	25,0	1,60	1,94	2,69	
266	FTIR (gemessen)	24,5	1,10	1,34	1,85	
267	FTIR (gemessen)	23,1	-0,35	-0,42	-0,59	
269	k. A.	22,2	-1,23	-1,49	-2,07	
270	k. A.	23,5	0,10	0,12	0,17	
271	k. A.	23,9	0,50	0,61	0,84	
273	FTIR (gemessen)	25,3	1,90	2,31	3,20	
276	FTIR (gemessen)	23,8	0,40	0,49	0,67	
277	FTIR (gemessen)	24,2	0,80	0,97	1,35	
278	FTIR (gemessen)	24,6	1,20	1,46	2,02	
279	FTIR (gemessen)	22,9	-0,50	-0,61	-0,84	
280	FTIR (gemessen)	24,1	0,70	0,85	1,18	
281	FTIR (gemessen)	27,1	3,70	4,49	6,23	(***)
282	FTIR-Basis	26,5	3,10	3,76	5,22	(***)
283	FTIR (gemessen)	23,4	0,02	0,02	0,03	
284	FTIR-Basis	23,2	-0,20	-0,24	-0,34	
285	k. A.	23,8	0,40	0,49	0,67	
286	FTIR (gemessen)	23,8	0,43	0,52	0,72	
321	FTIR (gemessen)	23,8	0,35	0,42	0,59	
328	FTIR (gemessen)	24,2	0,78	0,95	1,31	
337	FTIR (gemessen)	23,5	0,12	0,15	0,20	

Rote Verfahrensangabe:herkömmlicheWerte sollen nicht als Ergebnisse des FTIR-Verfahrens angegeben werden.
 (***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

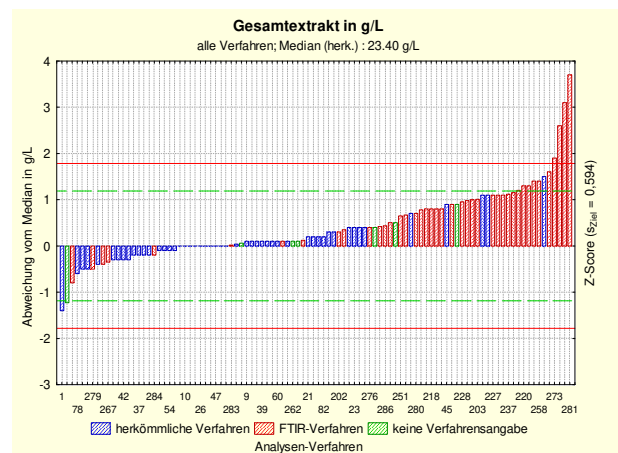
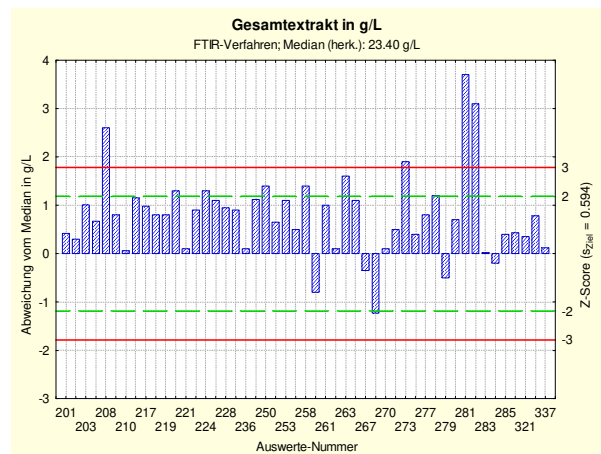
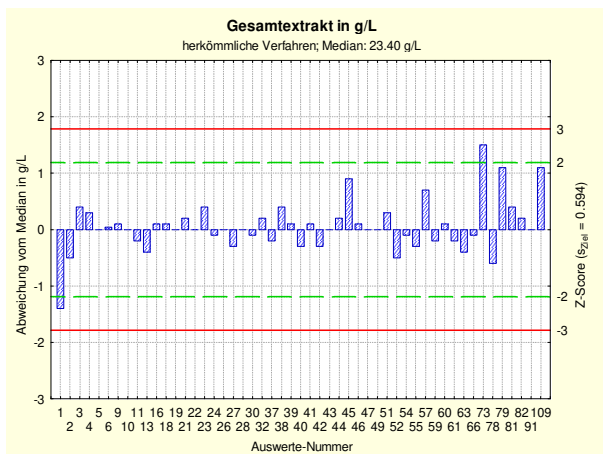
5.3.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	50
Minimalwert	22,0
Mittelwert	23,46
Median	23,40
Maximalwert	24,9
Standardabweichung (s _L)	0,460
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,065
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,824
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.) ¹⁾	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR}) ¹⁾	(0,565)
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,56
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)	0,77
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(0,81)
Quotient (u _M /s _H)	0,08
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,11
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,12)

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	1	23,200	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	7	23,254	0,118
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren ohne fehlerhafte Auswahl	43	23,485	0,298
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	36	24,218	0,591
herk./FTIR	Berechnung nach Tabarie auf Basis Dichte nach LwK 8.1 bis 8.4 + FTIR-Alkohol	1	23,900	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	5	24,245	1,688
k. A.	keine Verfahrensangabe	7	23,615	0,508



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	6,99	0,345	1,22	1,55	
02	LwK 4.5	6,42	-0,225	-0,80	-1,01	
05	LwK 4.5	6,54	-0,105	-0,37	-0,47	
06	LwK 4.5	6,63	-0,015	-0,05	-0,07	
10	LwK 4.1	6,40	-0,245	-0,87	-1,10	
11	LwK 4.7	6,51	-0,135	-0,48	-0,61	
13	LwK 4.5	6,70	0,055	0,19	0,25	
16	LwK 4.5	6,68	0,034	0,12	0,15	
19	LwK 4.5	6,55	-0,095	-0,34	-0,43	
21	LwK 4.7	6,40	-0,245	-0,87	-1,10	
22	LwK 4.7	6,68	0,035	0,12	0,16	
23	LwK 4.7	6,30	-0,345	-1,22	-1,55	
24	LwK 4.4	6,90	0,255	0,90	1,15	
26	LwK 4.5	6,75	0,105	0,37	0,47	
27	LwK 4.7	6,70	0,055	0,19	0,25	
28	LwK 4.4	7,00	0,355	1,26	1,60	
30	LwK 4.5	6,78	0,135	0,48	0,61	
32	LwK 4.4	6,30	-0,345	-1,22	-1,55	
35	LwK 4.5	6,60	-0,045	-0,16	-0,20	
37	LwK 4.3	5,80	-0,845	-2,99	-3,80	
38	LwK 4.5	7,27	0,625	2,21	2,81	
39	LwK 4.7	6,54	-0,105	-0,37	-0,47	
40	LwK 4.5	6,80	0,155	0,55	0,70	
41	LwK 4.5	6,75	0,105	0,37	0,47	
42	LwK 4.5	6,73	0,086	0,30	0,39	
43	LwK 4.4	6,40	-0,245	-0,87	-1,10	
44	LwK 4.5	6,60	-0,045	-0,16	-0,20	
45	LwK 4.5	6,70	0,055	0,19	0,25	
46	LwK 4.5	6,60	-0,045	-0,16	-0,20	
47	LwK 4.5	6,50	-0,145	-0,51	-0,65	
49	LwK 4.5	7,04	0,395	1,40	1,78	
51	LwK 4.5	6,62	-0,025	-0,09	-0,11	
52	LwK 4.5	6,70	0,055	0,19	0,25	
54	LwK 4.5	6,50	-0,145	-0,51	-0,65	
55	LwK 4.5	6,66	0,015	0,05	0,07	
57	LwK 4.4	7,00	0,355	1,26	1,60	
59	LwK 4.4	7,50	0,855	3,02	3,85	
60	LwK 4.7	6,60	-0,045	-0,16	-0,20	
61	LwK 4.5	6,50	-0,145	-0,51	-0,65	
63	LwK 4.4	6,60	-0,045	-0,16	-0,20	
66	LwK 4.4	6,70	0,055	0,19	0,25	
68	LwK 4.5	6,77	0,125	0,44	0,56	
72	LwK 4.4	8,35	1,705	6,03	7,67	(***)
73	LwK 4.4	7,80	1,155	4,09	5,20	(***)
75	LwK 4.4	7,50	0,855	3,02	3,85	
78	LwK 4.5	6,46	-0,185	-0,65	-0,83	
79	LwK 4.3	7,50	0,855	3,02	3,85	
99	LwK 4.7	7,11	0,469	1,66	2,11	
109	LwK 4.4	7,30	0,655	2,32	2,95	
111	NMR	6,31	-0,335	-1,18	-1,51	
112	NMR	6,57	-0,071	-0,25	-0,32	
113	NMR	6,13	-0,515	-1,82	-2,32	
114	NMR	6,20	-0,443	-1,57	-1,99	
115	NMR	6,66	0,015	0,05	0,07	
116	NMR	6,34	-0,308	-1,09	-1,39	

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

5.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	6,53	-0,115	-0,41	-0,20	
202	LwK 4.8	7,03	0,385	1,36	0,66	
203	LwK 4.8	7,45	0,805	2,85	1,38	
204	LwK 4.8	7,26	0,615	2,18	1,05	
205	LwK 4.8	6,07	-0,575	-2,03	-0,98	
206	LwK 4.8	6,87	0,225	0,80	0,39	
207	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
208	LwK 4.8	6,87	0,225	0,80	0,39	
209	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
210	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
211	LwK 4.8	6,08	-0,565	-2,00	-0,97	
212	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
213	LwK 4.8	6,46	-0,185	-0,65	-0,32	
215	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
216	LwK 4.8	6,08	-0,565	-2,00	-0,97	
217	LwK 4.8	5,87	-0,775	-2,74	-1,33	
218	LwK 4.8	6,00	-0,645	-2,28	-1,10	
219	LwK 4.8	6,00	-0,645	-2,28	-1,10	
220	LwK 4.8	8,80	2,155	7,62	3,69	
221	LwK 4.8	6,43	-0,215	-0,76	-0,37	
223	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
224	LwK 4.8	7,00	0,355	1,26	0,61	
225	LwK 4.8	7,51	0,865	3,06	1,48	
226	LwK 4.8	6,85	0,205	0,73	0,35	
227	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
228	LwK 4.8	7,20	0,555	1,96	0,95	
229	LwK 4.8	6,43	-0,215	-0,76	-0,37	
230	LwK 4.8	6,31	-0,335	-1,19	-0,57	
232	LwK 4.8	5,66	-0,985	-3,48	-1,69	
234	LwK 4.8	6,69	0,045	0,16	0,08	
235	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
236	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
237	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
240	LwK 4.8	6,35	-0,295	-1,04	-0,51	
241	LwK 4.8	7,24	0,595	2,10	1,02	
242	LwK 4.8	7,05	0,405	1,43	0,69	
243	LwK 4.8	7,20	0,555	1,96	0,95	
244	LwK 4.8	6,51	-0,135	-0,48	-0,23	
245	LwK 4.8	3,74	-2,905	-10,28	-4,97	
246	LwK 4.8	7,00	0,355	1,26	0,61	
247	LwK 4.8	6,21	-0,435	-1,54	-0,74	
248	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
249	LwK 4.8	6,04	-0,605	-2,14	-1,04	
250	LwK 4.8	5,70	-0,945	-3,34	-1,62	
251	LwK 4.8	6,57	-0,075	-0,27	-0,13	
253	LwK 4.8	7,40	0,755	2,67	1,29	
254	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
255	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
256	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
257	LwK 4.8	7,00	0,355	1,26	0,61	
258	LwK 4.8	7,10	0,455	1,61	0,78	
259	LwK 4.8	6,70	0,055	0,19	0,09	
260	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
261	LwK 4.8	5,83	-0,815	-2,88	-1,40	
262	LwK 4.8	5,10	-1,545	-5,47	-2,65	
263	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
264	LwK 4.8	7,68	1,035	3,66	1,77	
265	LwK 4.8	6,09	-0,555	-1,96	-0,95	
266	LwK 4.8	6,57	-0,075	-0,27	-0,13	
267	LwK 4.8	6,38	-0,265	-0,94	-0,45	
268	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
269	LwK 4.8	4,74	-1,905	-6,74	-3,26	
270	LwK 4.8	7,00	0,355	1,26	0,61	
271	LwK 4.8	6,51	-0,135	-0,48	-0,23	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 4.8	7,19	0,545	1,93	0,93	
274	LwK 4.8	5,93	-0,715	-2,53	-1,22	
275	LwK 4.8	6,48	-0,165	-0,58	-0,28	
276	LwK 4.8	6,70	0,055	0,19	0,09	
277	LwK 4.8	7,24	0,595	2,10	1,02	
278	LwK 4.8	7,30	0,655	2,32	1,12	
279	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
280	LwK 4.8	8,18	1,535	5,43	2,63	
281	LwK 4.8	6,96	0,315	1,11	0,54	
283	LwK 4.8	5,66	-0,985	-3,48	-1,69	
284	LwK 4.8	5,37	-1,275	-4,51	-2,18	
285	LwK 4.8	6,50	-0,145	-0,51	-0,25	
286	LwK 4.8	6,50	-0,145	-0,51	-0,25	
287	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
321	LwK 4.8	6,03	-0,615	-2,18	-1,05	
328	LwK 4.8	7,41	0,765	2,71	1,31	
330	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
337	LwK 4.8	5,90	-0,745	-2,64	-1,28	

5.4.3 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker (S)

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	6,53	-0,115	-0,41	-0,20	
202	LwK 4.8	7,03	0,385	1,36	0,66	
203	LwK 4.8	7,45	0,805	2,85	1,38	
204	LwK 4.8	7,26	0,615	2,18	1,05	
205	LwK 4.8	6,08	-0,565	-2,00	-0,97	
207	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
208	LwK 4.8	6,87	0,225	0,80	0,39	
209	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
210	LwK 4.8	6,20	-0,445	-1,57	-0,76	
211	LwK 4.8	6,08	-0,565	-2,00	-0,97	
212	LwK 4.8	6,64	-0,005	-0,02	-0,01	
213	LwK 4.8	7,72	1,075	3,80	1,84	
215	LwK 4.8	6,70	0,055	0,19	0,09	
216	LwK 4.8	6,08	-0,565	-2,00	-0,97	
217	LwK 4.8	5,09	-1,555	-5,50	-2,66	
218	LwK 4.8	6,65	0,005	0,02	0,01	
219	LwK 4.8	5,80	-0,845	-2,99	-1,45	
220	LwK 4.8	8,80	2,155	7,62	3,69	
221	LwK 4.8	6,43	-0,215	-0,76	-0,37	
222	LwK 4.8	7,90	1,255	4,44	2,15	
223	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
224	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
225	LwK 4.8	7,42	0,775	2,74	1,33	
226	LwK 4.8	6,85	0,205	0,73	0,35	
227	LwK 4.8	7,70	1,055	3,73	1,81	
228	LwK 4.8	6,99	0,345	1,22	0,59	
229	LwK 4.8	6,54	-0,105	-0,37	-0,18	
230	LwK 4.8	6,41	-0,235	-0,83	-0,40	
232	LwK 4.8	5,66	-0,985	-3,48	-1,69	
234	LwK 4.8	7,47	0,825	2,92	1,41	
235	LwK 4.8	5,40	-1,245	-4,40	-2,13	
236	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
237	LwK 4.8	8,25	1,605	5,68	2,75	
240	LwK 4.8	6,35	-0,295	-1,04	-0,51	
241	LwK 4.8	7,15	0,505	1,79	0,86	
242	LwK 4.8	7,05	0,405	1,43	0,69	
243	LwK 4.8	7,70	1,055	3,73	1,81	
244	LwK 4.8	7,34	0,695	2,46	1,19	
245	LwK 4.8	6,22	-0,425	-1,50	-0,73	
246	LwK 4.8	7,00	0,355	1,26	0,61	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker (S)

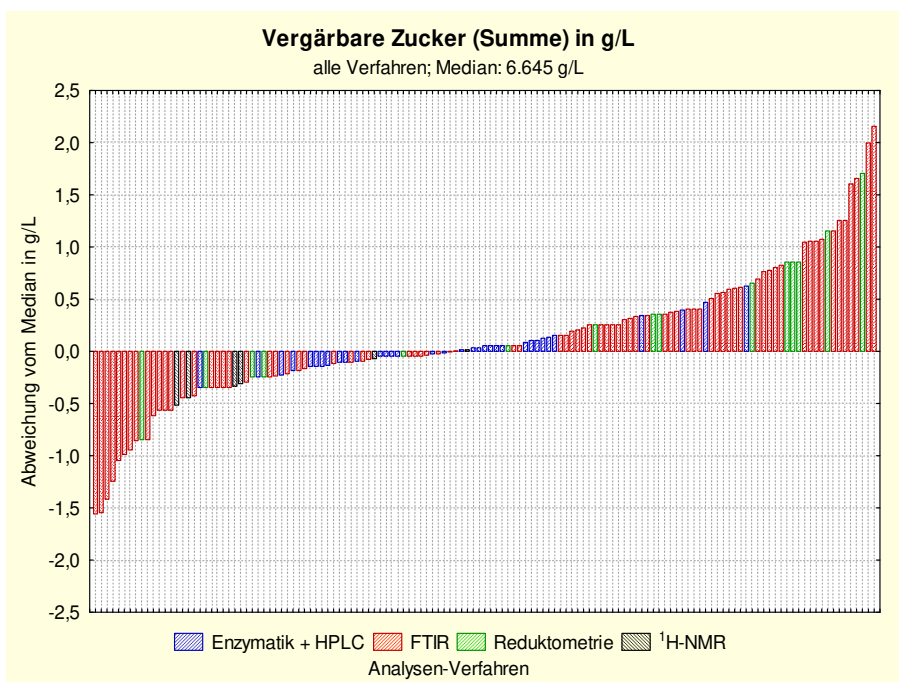
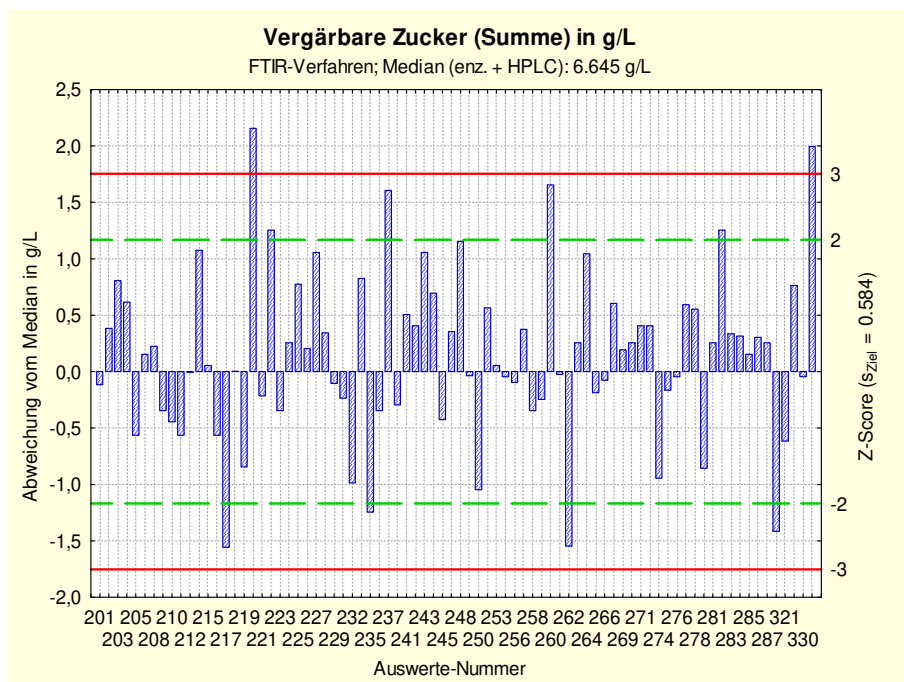
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
248	LwK 4.8	7,80	1,155	4,09	1,98	
249	LwK 4.8	6,61	-0,035	-0,12	-0,06	
250	LwK 4.8	5,60	-1,045	-3,70	-1,79	
251	LwK 4.8	7,21	0,565	2,00	0,97	
253	LwK 4.8	6,70	0,055	0,19	0,09	
255	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
256	LwK 4.8	6,55	-0,095	-0,34	-0,16	
257	LwK 4.8	7,02	0,375	1,33	0,64	
258	LwK 4.8	6,30	-0,345	-1,22	-0,59	
259	LwK 4.8	6,40	-0,245	-0,87	-0,42	
260	LwK 4.8	8,30	1,655	5,85	2,83	
261	LwK 4.8	6,62	-0,025	-0,09	-0,04	
262	LwK 4.8	5,10	-1,545	-5,47	-2,65	
263	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
264	LwK 4.8	7,69	1,045	3,70	1,79	
265	LwK 4.8	6,46	-0,185	-0,65	-0,32	
266	LwK 4.8	6,57	-0,075	-0,27	-0,13	
267	LwK 4.8	7,25	0,605	2,14	1,04	
269	LwK 4.8	6,84	0,195	0,69	0,33	
270	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
271	LwK 4.8	7,05	0,405	1,43	0,69	
273	LwK 4.8	7,05	0,405	1,43	0,69	
274	LwK 4.8	5,70	-0,945	-3,34	-1,62	
275	LwK 4.8	6,48	-0,165	-0,58	-0,28	
276	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
277	LwK 4.8	7,24	0,595	2,10	1,02	
278	LwK 4.8	7,20	0,555	1,96	0,95	
280	LwK 4.8	5,79	-0,855	-3,02	-1,46	
281	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
282	LwK 4.8	7,90	1,255	4,44	2,15	
283	LwK 4.8	6,98	0,335	1,19	0,57	
284	LwK 4.8	6,96	0,315	1,11	0,54	
285	LwK 4.8	6,80	0,155	0,55	0,27	
286	LwK 4.8	6,95	0,305	1,08	0,52	
287	LwK 4.8	6,90	0,255	0,90	0,44	
312	LwK 4.8	5,23	-1,415	-5,01	-2,42	
321	LwK 4.8	6,03	-0,615	-2,18	-1,05	
328	LwK 4.8	7,41	0,765	2,71	1,31	
330	LwK 4.8	6,60	-0,045	-0,16	-0,08	
337	LwK 4.8	8,64	1,995	7,06	3,42	

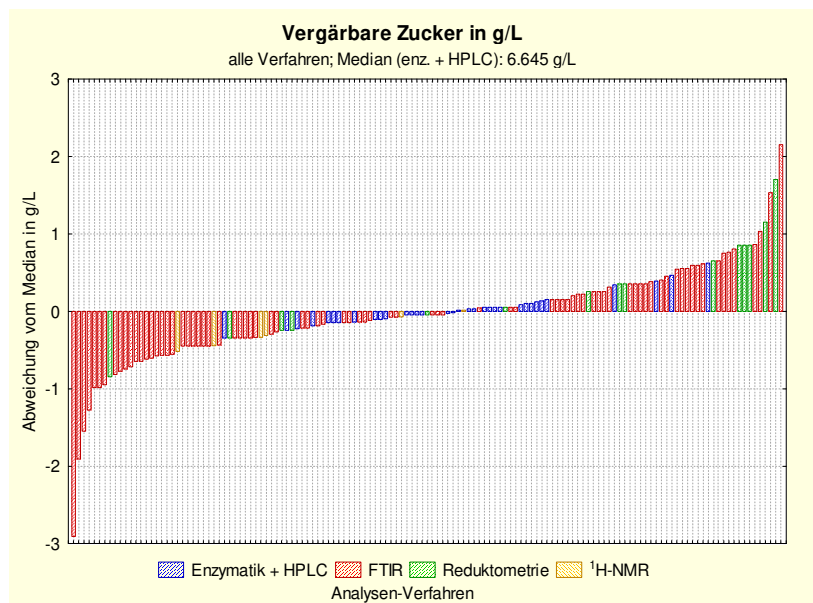
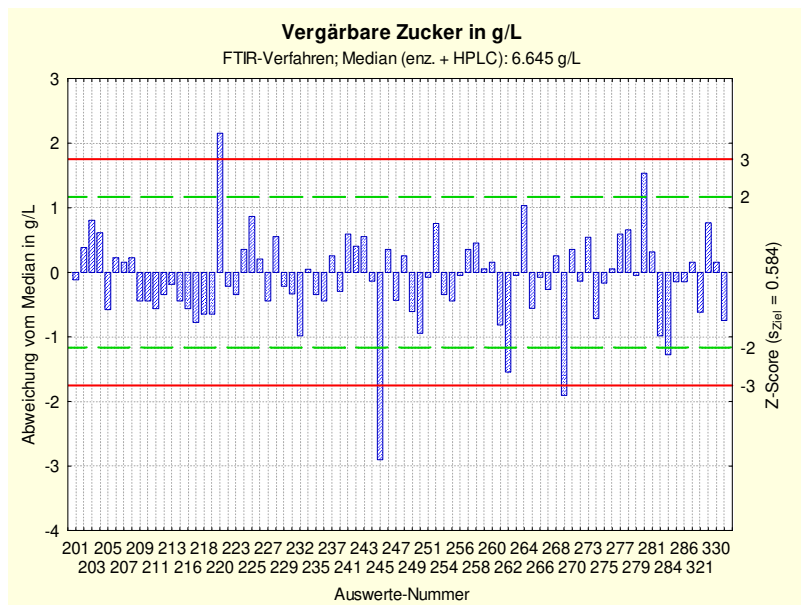
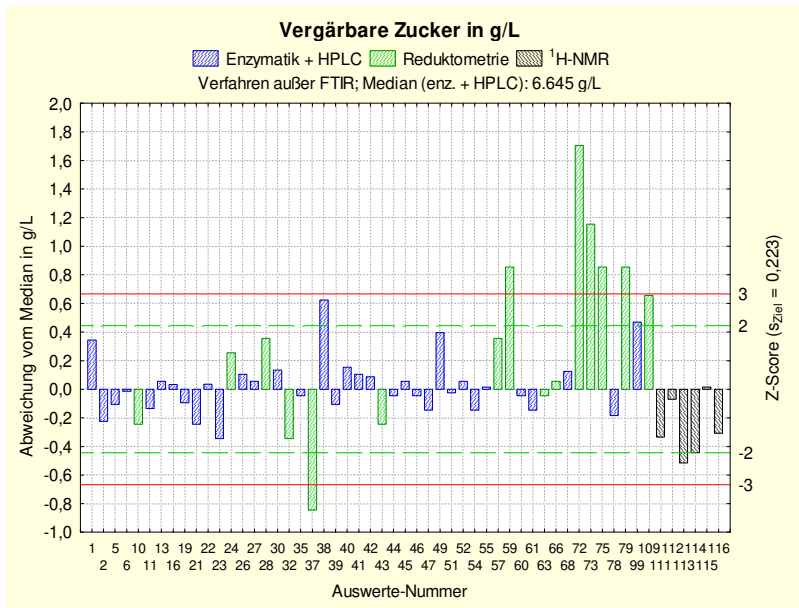
5.4.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymat. alle Daten
Gültige Werte	34
Minimalwert	6,30
Mittelwert	6,667
Median	6,645
Maximalwert	7,27
Standardabweichung (s_L)	0,203
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,035
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,283
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,222
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,584
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,72
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,91
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,35
Quotient (u_M/s_H)	0,12
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,16
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,06

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	6,400	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	6,650	1,363
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	12	7,084	0,619
	reduktometrische Verfahren	15	6,992	0,680
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	26	6,662	0,148
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	8	6,578	0,209
	enzymatische und HPLC-Verfahren	34	6,645	0,159
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	82	6,561	0,589
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	80	6,786	0,681
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,369	0,236





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	3,44	0,116	0,74	0,87	
02	enzymat., autom.	3,25	-0,074	-0,47	-0,56	
03	enzymat., autom.	3,26	-0,064	-0,41	-0,48	
04	enzymat., autom.	3,41	0,086	0,55	0,65	
05	enzymat., autom.	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
10	enzymat., autom.	3,25	-0,074	-0,47	-0,56	
11	HPLC	3,27	-0,054	-0,34	-0,41	
13	enzymat., autom.	3,42	0,096	0,61	0,72	
16	enzymat., autom.	3,38	0,056	0,36	0,42	
19	enzymat., autom.	3,29	-0,034	-0,22	-0,26	
21	HPLC	2,98	-0,344	-2,19	-2,59	
22	HPLC	3,35	0,026	0,17	0,20	
23	HPLC	3,00	-0,324	-2,06	-2,44	
26	enzymat., autom.	3,42	0,096	0,61	0,72	
27	HPLC	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
30	enzymat., autom.	3,32	-0,006	-0,04	-0,05	
35	enzymat., autom.	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
38	enzymat., autom.	3,39	0,066	0,42	0,50	
39	HPLC	3,24	-0,084	-0,54	-0,63	
40	enzymat., autom.	3,35	0,026	0,16	0,19	
41	enzymat., autom.	3,35	0,026	0,17	0,20	
42	enzymat., autom.	3,35	0,030	0,19	0,23	
44	enzymat., autom.	3,40	0,076	0,48	0,57	
45	enzymat., autom.	3,40	0,076	0,48	0,57	
46	enzymat., autom.	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
49	enzymat., autom.	3,46	0,136	0,87	1,03	
51	enzymat., autom.	3,27	-0,054	-0,34	-0,41	
52	enzymat., autom.	3,33	0,006	0,04	0,05	
55	enzymat., autom.	3,35	0,026	0,17	0,20	
57	enzymat., autom.	3,33	0,006	0,04	0,05	
60	HPLC	3,20	-0,124	-0,79	-0,93	
61	enzymat. Hand	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
68	enzymat., autom.	3,37	0,046	0,29	0,35	
78	enzymat. Hand	3,30	-0,024	-0,15	-0,18	
91	HPLC	3,25	-0,074	-0,47	-0,56	
99	HPLC	3,504	0,180	1,15	1,36	
111	NMR	3,23	-0,090	-0,57	-0,68	
112	NMR	3,33	0,005	0,03	0,04	
113	NMR	3,10	-0,224	-1,43	-1,69	
114	NMR	3,20	-0,125	-0,80	-0,94	
115	NMR	3,20	-0,124	-0,79	-0,93	
116	NMR	3,17	-0,159	-1,01	-1,20	
117	NMR	3,74	0,418	2,66	3,15	

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

5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,26	-0,064	-0,41	-0,16	
202	FTIR	3,46	0,136	0,87	0,33	
203	FTIR	3,30	-0,024	-0,15	-0,06	
204	FTIR	3,57	0,246	1,57	0,60	
205	FTIR	3,31	-0,014	-0,09	-0,03	
207	FTIR	3,60	0,276	1,76	0,68	
208	FTIR	3,18	-0,144	-0,92	-0,35	
209	FTIR	3,20	-0,124	-0,79	-0,30	
210	FTIR	3,47	0,146	0,93	0,36	
211	FTIR	3,09	-0,234	-1,49	-0,57	
212	FTIR	3,35	0,026	0,17	0,06	
213	FTIR	4,02	0,696	4,43	1,71	
215	FTIR	3,50	0,176	1,12	0,43	
216	FTIR	3,04	-0,284	-1,81	-0,70	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	3,19	-0,134	-0,85	-0,33	
219	FTIR	2,50	-0,824	-5,25	-2,02	
220	FTIR	5,60	2,276	14,50	5,58	(*)
221	FTIR	2,92	-0,404	-2,57	-0,99	
222	FTIR	3,65	0,326	2,08	0,80	
223	FTIR	3,00	-0,324	-2,06	-0,79	
224	FTIR	3,30	-0,024	-0,15	-0,06	
225	FTIR	3,79	0,466	2,97	1,14	
226	FTIR	3,17	-0,154	-0,98	-0,38	
227	FTIR	3,90	0,576	3,67	1,41	
228	FTIR	3,88	0,556	3,54	1,36	
229	FTIR	3,13	-0,194	-1,24	-0,48	
230	FTIR	2,98	-0,344	-2,19	-0,84	
232	FTIR	2,54	-0,784	-5,00	-1,92	
234	FTIR	3,59	0,266	1,69	0,65	
235	FTIR	2,40	-0,924	-5,89	-2,26	
236	FTIR	3,40	0,076	0,48	0,19	
237	FTIR	5,16	1,836	11,70	4,50	
240	FTIR	3,11	-0,214	-1,36	-0,52	
241	FTIR	3,32	-0,004	-0,03	-0,01	
242	FTIR	3,45	0,126	0,80	0,31	
243	FTIR	3,90	0,576	3,67	1,41	
244	FTIR	3,92	0,596	3,80	1,46	
245	FTIR	3,10	-0,224	-1,43	-0,55	
246	FTIR	3,70	0,376	2,40	0,92	
248	FTIR	3,90	0,576	3,67	1,41	
249	FTIR	3,28	-0,044	-0,28	-0,11	
250	FTIR	2,70	-0,624	-3,98	-1,53	
251	FTIR	3,56	0,236	1,50	0,58	
253	FTIR	3,60	0,276	1,76	0,68	
255	FTIR	2,80	-0,524	-3,34	-1,28	
256	FTIR	3,42	0,096	0,61	0,24	
257	FTIR	3,23	-0,094	-0,60	-0,23	
258	FTIR	3,00	-0,324	-2,06	-0,79	
259	FTIR	3,60	0,276	1,76	0,68	
260	FTIR	5,00	1,676	10,68	4,11	
261	FTIR	3,31	-0,014	-0,09	-0,03	
262	FTIR	2,80	-0,524	-3,34	-1,28	
263	FTIR	3,10	-0,224	-1,43	-0,55	
264	FTIR	3,65	0,326	2,08	0,80	
265	FTIR	3,08	-0,244	-1,55	-0,60	
266	FTIR	3,36	0,036	0,23	0,09	
267	FTIR	3,51	0,186	1,19	0,46	
269	FTIR	3,91	0,586	3,73	1,44	
270	FTIR	2,89	-0,434	-2,77	-1,06	
271	FTIR	3,55	0,226	1,44	0,55	
273	FTIR	2,83	-0,494	-3,15	-1,21	
274	FTIR	2,96	-0,364	-2,32	-0,89	
275	FTIR	3,54	0,216	1,38	0,53	
276	FTIR	3,90	0,576	3,67	1,41	
277	FTIR	3,83	0,506	3,22	1,24	
278	FTIR	3,60	0,276	1,76	0,68	
280	FTIR	3,00	-0,324	-2,06	-0,79	
281	FTIR	2,80	-0,524	-3,34	-1,28	
282	FTIR	3,40	0,076	0,48	0,19	
283	FTIR	3,73	0,406	2,59	1,00	
284	FTIR	4,13	0,806	5,14	1,98	
285	FTIR	3,30	-0,024	-0,15	-0,06	
286	FTIR	3,16	-0,164	-1,05	-0,40	
287	FTIR	3,50	0,176	1,12	0,43	
312	FTIR	1,99	-1,334	-8,50	-3,27	
321	FTIR	2,87	-0,454	-2,89	-1,11	
328	FTIR	3,55	0,226	1,44	0,55	
330	FTIR	3,10	-0,224	-1,43	-0,55	
337	FTIR	3,42	0,096	0,61	0,24	

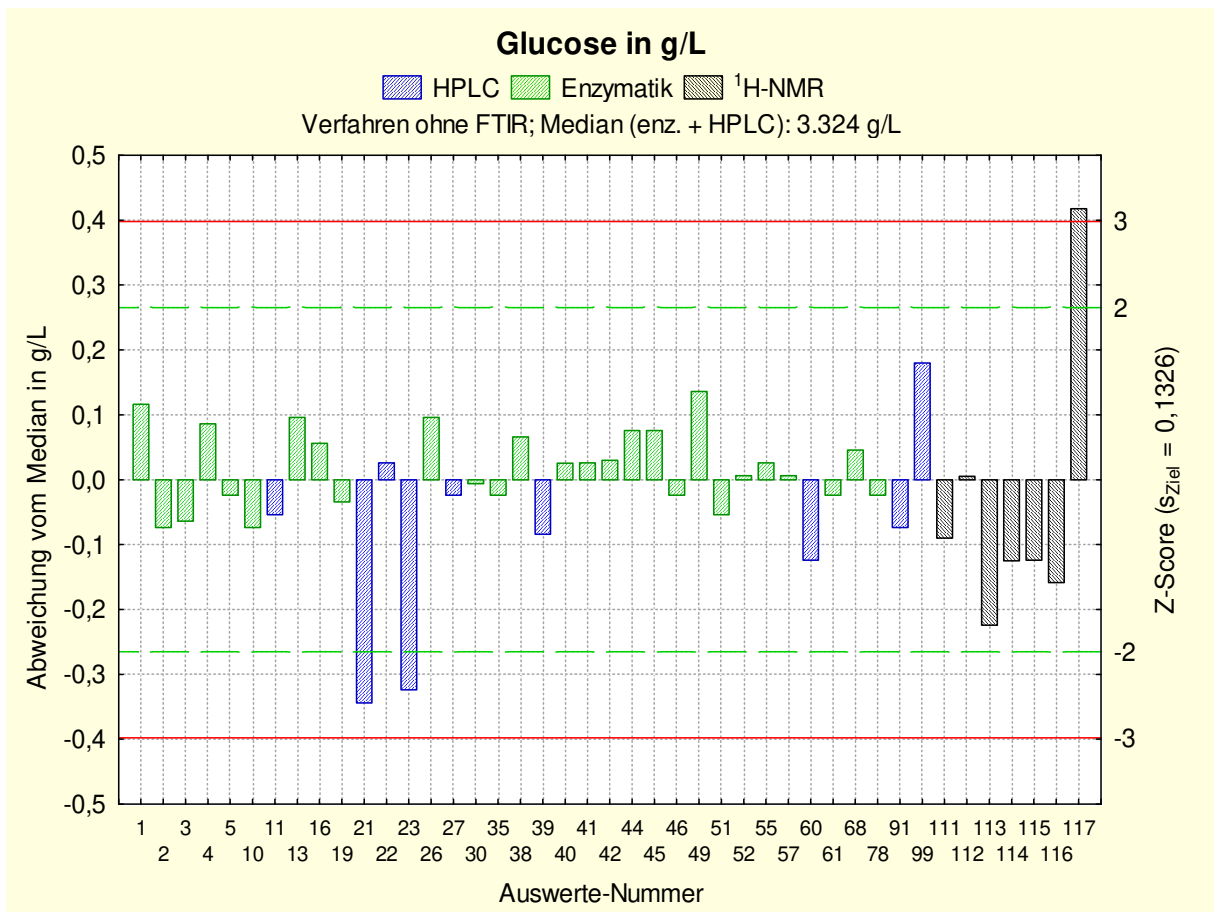
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

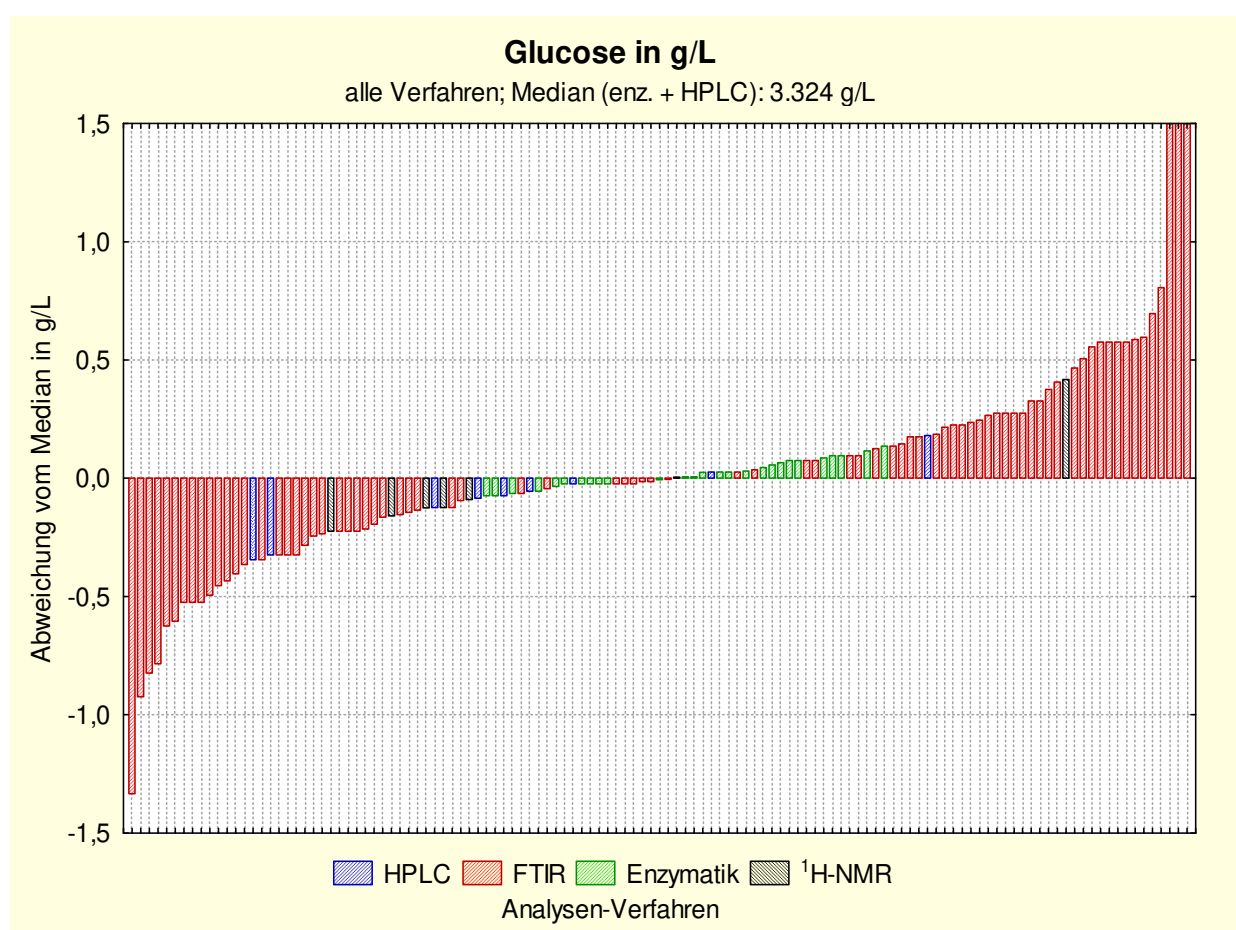
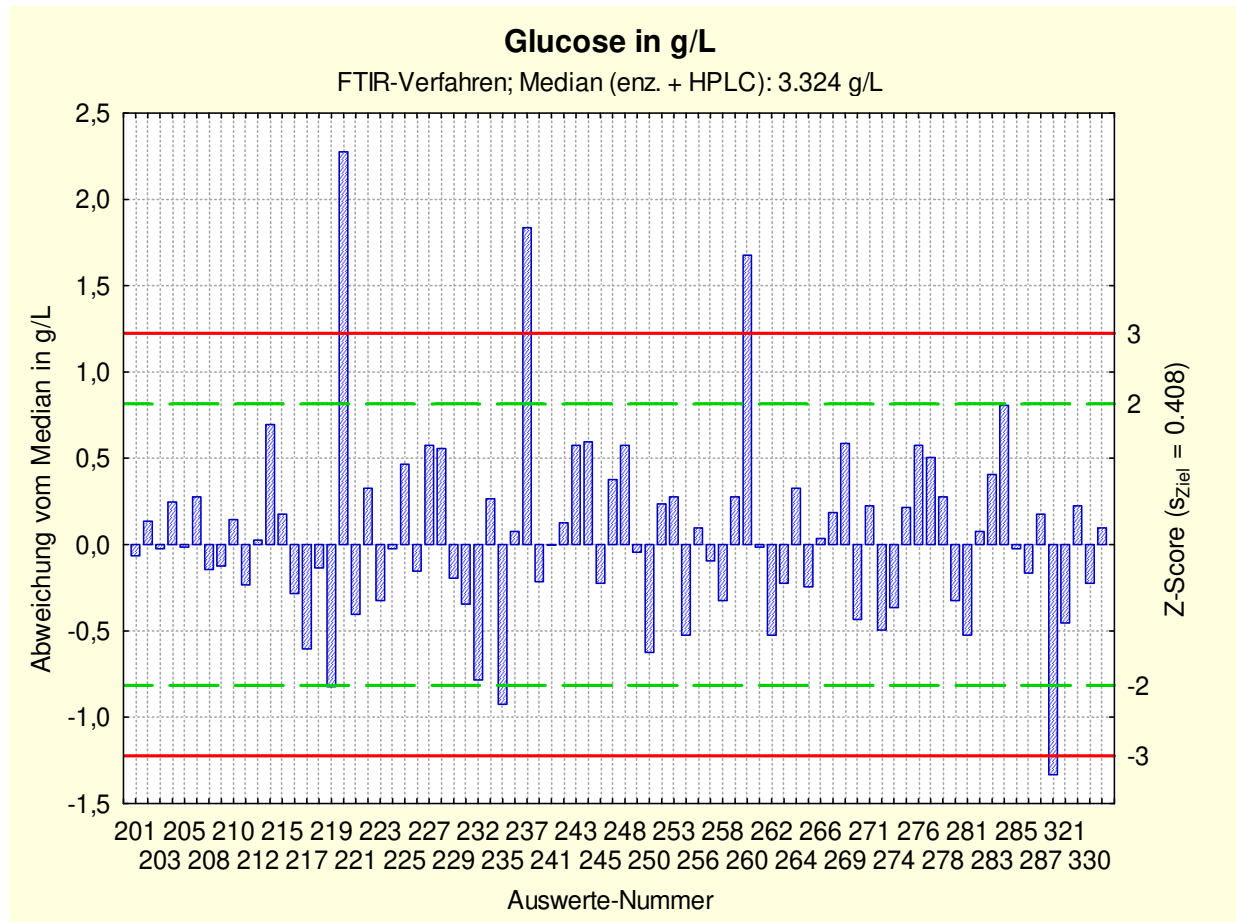
5.5.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	2,98
Mittelwert	3,316
Median	3,324
Maximalwert	3,50
Standardabweichung (s _L)	0,106
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,157
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,133
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,408
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,67
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,80
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,26
Quotient (u _M /s _H)	0,11
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,13
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,04

5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	9	3,236	0,179
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	3,340	0,064
enzymat. autom. 2	OIV-MA-AS313-29; enzymatisch, automatisiert	1	3,410	
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	3,346	0,090
	herkömmliche Verfahren	36	3,327	0,080
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	3,350	0,430
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	3,229	0,101





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	3,55	0,220	1,40	1,66	
02	enzymat., autom.	3,17	-0,160	-1,02	-1,20	
04	enzymat., autom.	3,36	0,030	0,19	0,23	
05	enzymat., autom.	3,24	-0,090	-0,57	-0,68	
10	enzymat., autom.	3,05	-0,280	-1,78	-2,11	
11	HPLC	3,24	-0,090	-0,57	-0,68	
13	enzymat., autom.	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
16	enzymat., autom.	3,30	-0,031	-0,20	-0,23	
19	enzymat., autom.	3,26	-0,070	-0,45	-0,53	
21	HPLC	3,42	0,090	0,57	0,68	
22	HPLC	3,33	0,000	0,00	0,00	
23	HPLC	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
26	enzymat., autom.	3,33	0,000	0,00	0,00	
27	HPLC	3,50	0,170	1,08	1,28	
30	enzymat., autom.	3,43	0,100	0,64	0,75	
35	enzymat., autom.	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
38	enzymat., autom.	3,88	0,550	3,50	4,14	
39	HPLC	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
40	enzymat., autom.	3,54	0,209	1,33	1,57	
41	enzymat., autom.	3,40	0,070	0,45	0,53	
42	enzymat., autom.	3,38	0,052	0,33	0,39	
44	enzymat., autom.	3,20	-0,130	-0,83	-0,98	
45	enzymat., autom.	3,40	0,070	0,45	0,53	
46	enzymat., autom.	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
47	enzymat., autom.	3,10	-0,230	-1,46	-1,73	
49	enzymat., autom.	3,58	0,250	1,59	1,88	
51	enzymat., autom.	3,30	-0,030	-0,19	-0,23	
52	enzymat., autom.	3,36	0,030	0,19	0,23	
55	enzymat., autom.	3,31	-0,020	-0,13	-0,15	
57	enzymat., autom.	3,43	0,100	0,64	0,75	
60	HPLC	3,40	0,070	0,45	0,53	
61	enzymat. Hand	3,21	-0,120	-0,76	-0,90	
68	enzymat., autom.	3,36	0,030	0,19	0,23	
78	enzymat. Hand	3,16	-0,170	-1,08	-1,28	
91	HPLC	3,48	0,150	0,95	1,13	
99	HPLC	3,61	0,280	1,78	2,11	
111	NMR	3,08	-0,253	-1,61	-1,91	
112	NMR	3,25	-0,085	-0,54	-0,64	
113	NMR	3,03	-0,300	-1,91	-2,26	
114	NMR	3,00	-0,328	-2,08	-2,47	
115	NMR	3,46	0,130	0,83	0,98	
116	NMR	3,17	-0,159	-1,01	-1,19	
117	NMR	3,08	-0,252	-1,60	-1,90	

5.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,27	-0,060	-0,38	-0,18	
202	FTIR	3,57	0,240	1,53	0,73	
203	FTIR	4,15	0,820	5,22	2,48	
204	FTIR	3,69	0,360	2,29	1,09	
205	FTIR	2,77	-0,560	-3,56	-1,70	
207	FTIR	3,20	-0,130	-0,83	-0,39	
208	FTIR	3,69	0,360	2,29	1,09	
209	FTIR	3,10	-0,230	-1,46	-0,70	
210	FTIR	2,73	-0,600	-3,82	-1,82	
211	FTIR	2,99	-0,340	-2,16	-1,03	
212	FTIR	3,29	-0,040	-0,25	-0,12	
213	FTIR	3,70	0,370	2,35	1,12	
215	FTIR	3,20	-0,130	-0,83	-0,39	
216	FTIR	3,04	-0,290	-1,85	-0,88	
217	FTIR	2,37	-0,960	-6,11	-2,91	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	3,46	0,130	0,83	0,39	
219	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,09	
220	FTIR	3,20	-0,130	-0,83	-0,39	
221	FTIR	3,51	0,180	1,15	0,55	
222	FTIR	4,25	0,920	5,85	2,79	
223	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,09	
224	FTIR	3,60	0,270	1,72	0,82	
225	FTIR	3,63	0,300	1,91	0,91	
226	FTIR	3,68	0,350	2,23	1,06	
227	FTIR	3,80	0,470	2,99	1,42	
228	FTIR	3,11	-0,220	-1,40	-0,67	
229	FTIR	3,41	0,080	0,51	0,24	
230	FTIR	3,43	0,100	0,64	0,30	
232	FTIR	3,12	-0,210	-1,34	-0,64	
234	FTIR	3,88	0,550	3,50	1,67	
235	FTIR	3,00	-0,330	-2,10	-1,00	
236	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-1,30	
237	FTIR	3,09	-0,240	-1,53	-0,73	
240	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,27	
241	FTIR	3,83	0,500	3,18	1,52	
242	FTIR	3,60	0,270	1,72	0,82	
243	FTIR	3,80	0,470	2,99	1,42	
244	FTIR	3,42	0,090	0,57	0,27	
245	FTIR	3,12	-0,210	-1,34	-0,64	
246	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,09	
248	FTIR	3,90	0,570	3,63	1,73	
249	FTIR	3,33	0,000	0,00	0,00	
250	FTIR	2,90	-0,430	-2,74	-1,30	
251	FTIR	3,65	0,320	2,04	0,97	
253	FTIR	3,10	-0,230	-1,46	-0,70	
255	FTIR	3,80	0,470	2,99	1,42	
256	FTIR	3,13	-0,200	-1,27	-0,61	
257	FTIR	3,79	0,460	2,93	1,39	
258	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,09	
259	FTIR	2,80	-0,530	-3,37	-1,61	
260	FTIR	3,30	-0,030	-0,19	-0,09	
261	FTIR	3,31	-0,020	-0,13	-0,06	
262	FTIR	2,30	-1,030	-6,55	-3,12	
263	FTIR	3,80	0,470	2,99	1,42	
264	FTIR	4,04	0,710	4,52	2,15	
265	FTIR	3,38	0,050	0,32	0,15	
266	FTIR	3,21	-0,120	-0,76	-0,36	
267	FTIR	3,74	0,410	2,61	1,24	
269	FTIR	2,93	-0,400	-2,54	-1,21	
270	FTIR	4,01	0,680	4,33	2,06	
271	FTIR	3,50	0,170	1,08	0,52	
273	FTIR	4,22	0,890	5,66	2,70	
274	FTIR	2,74	-0,590	-3,75	-1,79	
275	FTIR	2,94	-0,390	-2,48	-1,18	
276	FTIR	2,70	-0,630	-4,01	-1,91	
277	FTIR	3,41	0,080	0,51	0,24	
278	FTIR	3,60	0,270	1,72	0,82	
280	FTIR	2,79	-0,540	-3,44	-1,64	
281	FTIR	4,10	0,770	4,90	2,33	
282	FTIR	4,50	1,170	7,44	3,55	
283	FTIR	3,25	-0,080	-0,51	-0,24	
284	FTIR	2,83	-0,500	-3,18	-1,52	
285	FTIR	3,50	0,170	1,08	0,52	
286	FTIR	3,79	0,460	2,93	1,39	
287	FTIR	3,40	0,070	0,45	0,21	
312	FTIR	3,24	-0,090	-0,57	-0,27	
321	FTIR	3,16	-0,170	-1,08	-0,52	
328	FTIR	3,86	0,530	3,37	1,61	
330	FTIR	3,50	0,170	1,08	0,52	
337	FTIR	5,22	1,890	12,02	5,73	(*)

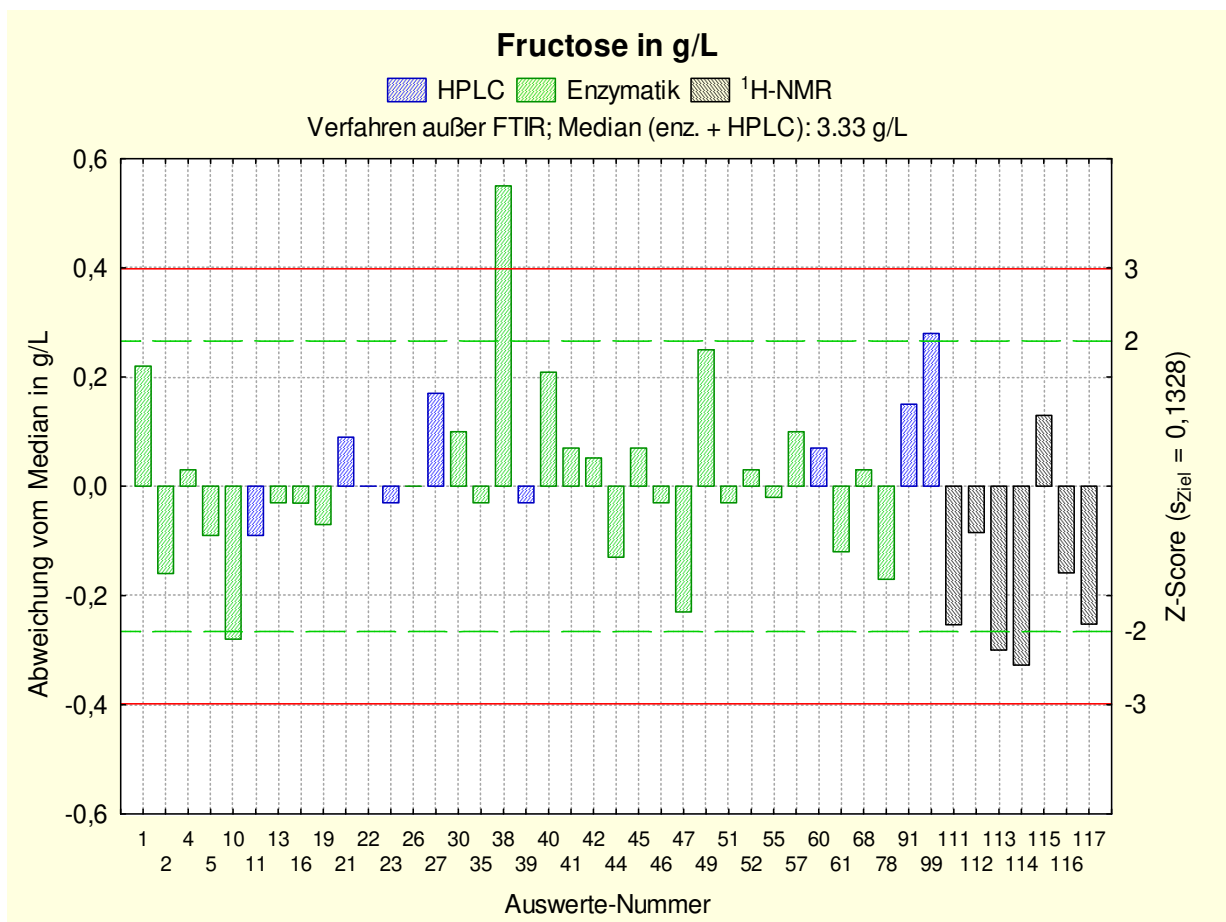
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

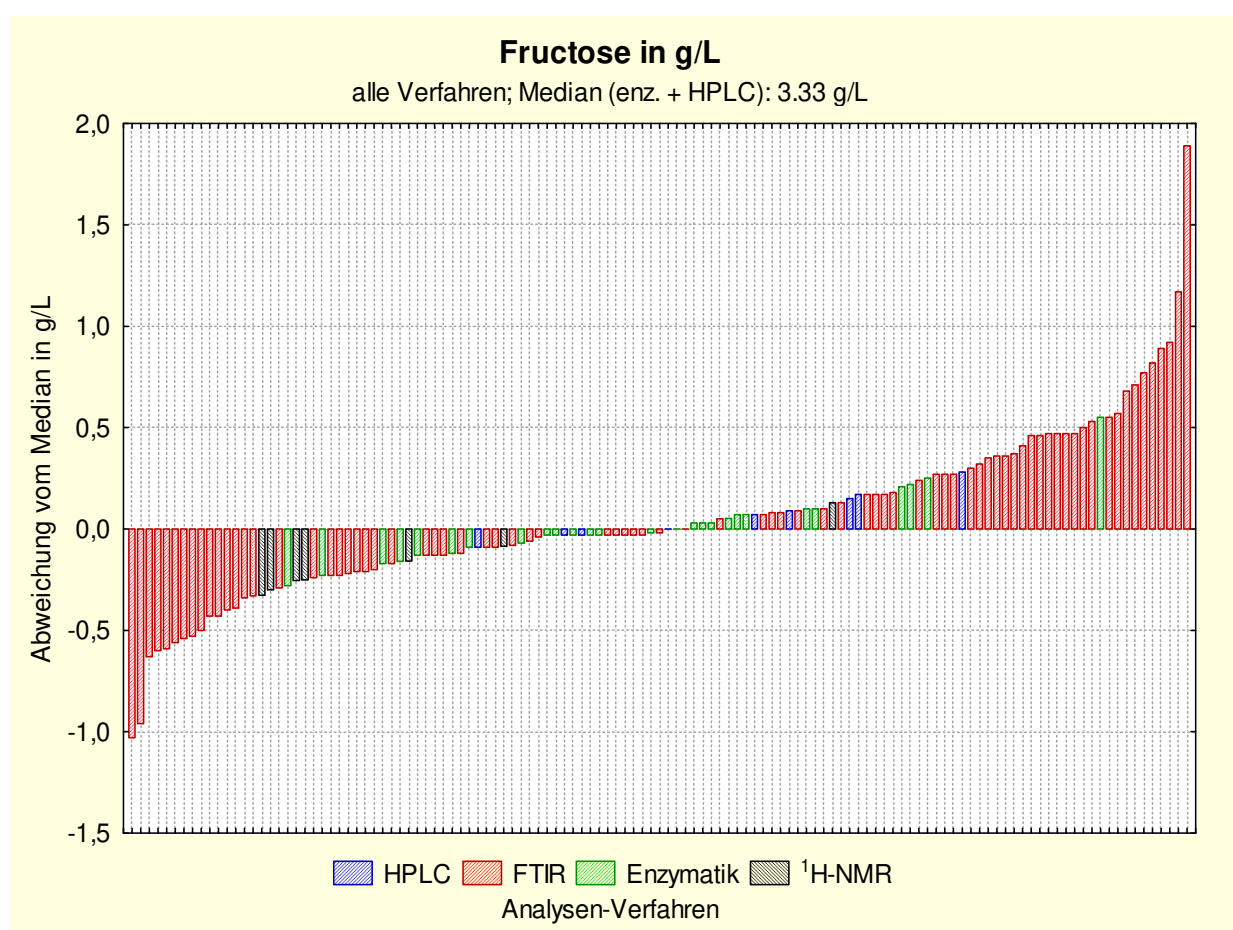
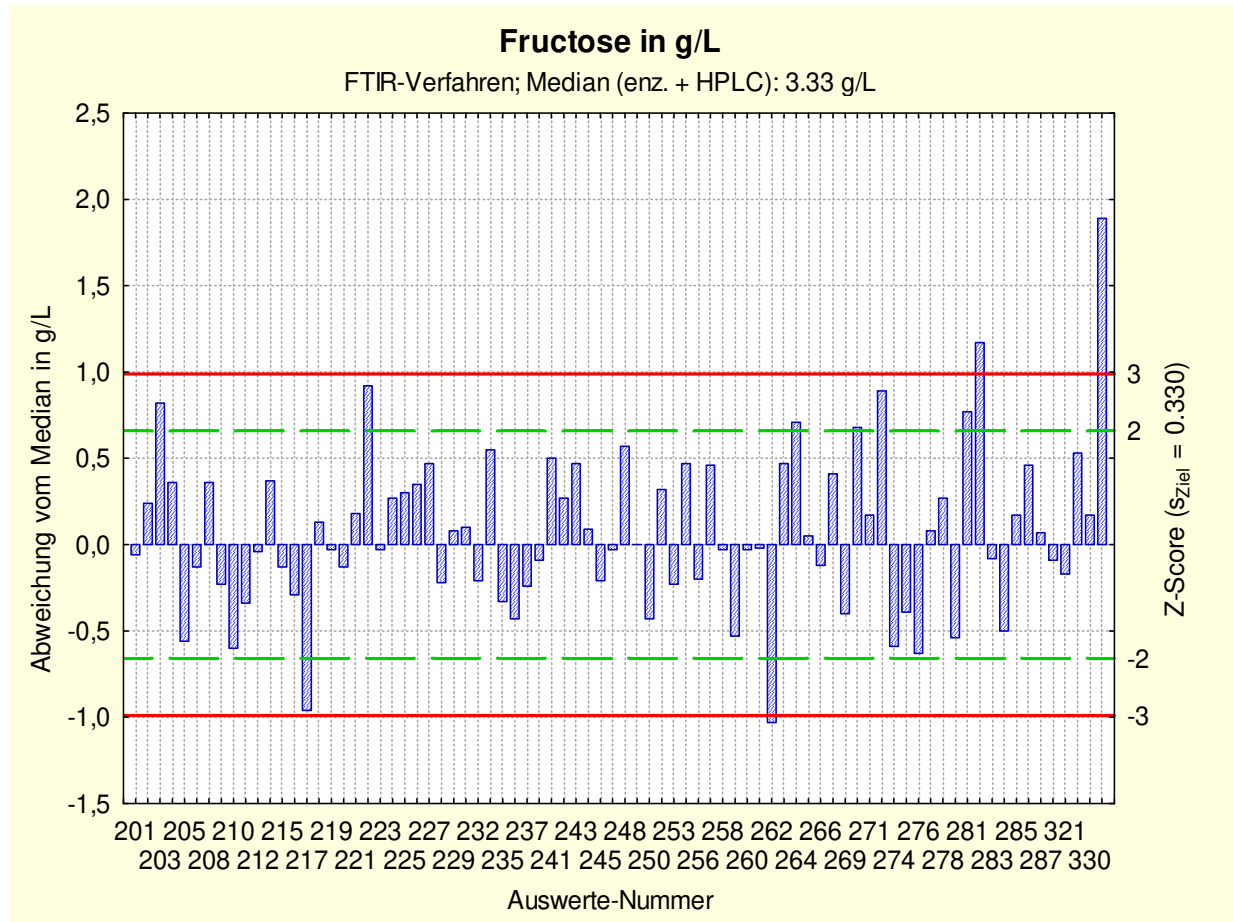
5.6.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	3,05
Mittelwert	3,355
Median	3,330
Maximalwert	3,88
Standardabweichung (s_L)	0,157
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,026
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,157
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,133
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{ÜFTIR}$)	0,330
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,00
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,18
Quotient ($s_L/s_{ÜFTIR}$)	0,47
Quotient (u_M/s_H)	0,17
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,20
Quotient ($u_M/s_{ÜFTIR}$)	0,08

5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	9	3,395	0,128
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	23	3,331	0,127
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	1	3,360	0,219
	herkömmliche Verfahren	36	3,347	0,137
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	3,392	0,440
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	3,136	0,143





5.7 Glycerin [g/L]

5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,93	0,430	1,79	
02	enzymat. autom.	5,59	0,090	0,37	
04	enzymat. autom.	5,49	-0,010	-0,04	
05	enzymat. autom.	5,52	0,020	0,08	
06	enzymat. Hand	5,47	-0,026	-0,11	
09	enzymat. autom.	5,35	-0,150	-0,62	
10	enzymat. Hand	5,54	0,040	0,17	
11	HPLC	5,50	0,000	0,00	
21	HPLC	5,35	-0,150	-0,62	
22	HPLC	5,45	-0,050	-0,21	
23	HPLC	5,30	-0,200	-0,83	
27	HPLC	6,00	0,500	2,08	
39	HPLC	5,76	0,260	1,08	
42	HPLC	5,44	-0,056	-0,23	
57	enzymat. autom.	5,50	0,000	0,00	
60	HPLC	5,50	0,000	0,00	
61	enzymat. Hand	5,26	-0,240	-1,00	
78	enzymat. Hand	5,25	-0,250	-1,04	
91	HPLC	5,69	0,190	0,79	
99	HPLC	5,635	0,135	0,56	
111	NMR	5,71	0,213	0,88	
112	NMR	5,29	-0,209	-0,87	
113	NMR	5,23	-0,270	-1,12	
114	NMR	5,56	0,062	0,26	
115	NMR	5,51	0,010	0,04	
116	NMR	5,39	-0,109	-0,45	

5.7.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	20
Minimalwert	5,25
Mittelwert	5,527
Median	5,500
Maximalwert	6,00
Standardabweichung (s_L)	0,201
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,045
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,241
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,83
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,58
Quotient (u_M/s_H)	0,19
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,13

5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	5,548	0,204
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	5,487	0,093
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	5,491	0,314
	herkömmliche Verfahren	20	5,508	0,183
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	72	5,625	0,428
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,449	0,204

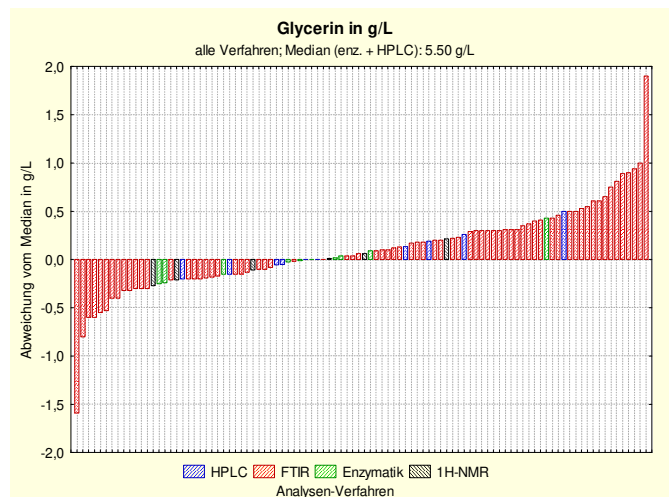
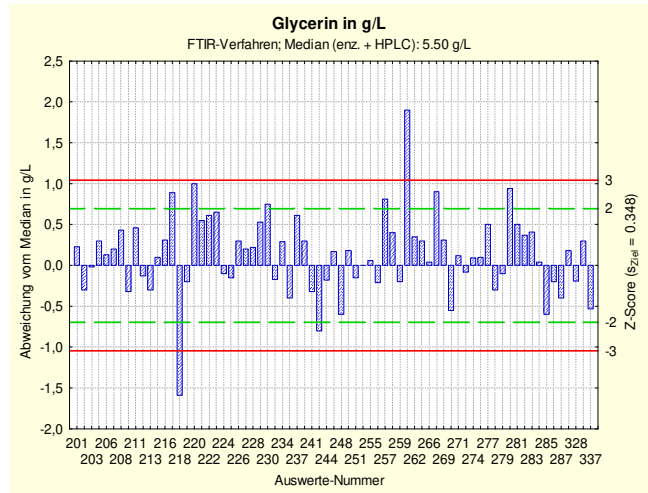
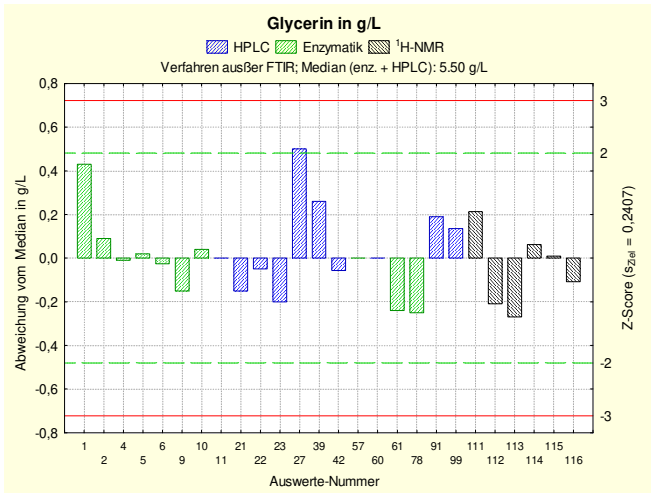
5.7.4 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,73	0,230	0,96	0,66	
202	FTIR	5,20	-0,300	-1,25	-0,86	
203	FTIR	5,48	-0,020	-0,08	-0,06	
205	FTIR	5,80	0,300	1,25	0,86	
206	FTIR	5,63	0,130	0,54	0,37	
207	FTIR	5,70	0,200	0,83	0,57	
208	FTIR	5,93	0,430	1,79	1,24	
210	FTIR	5,18	-0,320	-1,33	-0,92	
211	FTIR	5,96	0,460	1,91	1,32	
212	FTIR	5,37	-0,130	-0,54	-0,37	
213	FTIR	5,20	-0,300	-1,25	-0,86	
215	FTIR	5,60	0,100	0,42	0,29	
216	FTIR	5,81	0,310	1,29	0,89	
217	FTIR	6,39	0,890	3,70	2,56	
218	FTIR	3,91	-1,590	-6,61	-4,57	
219	FTIR	5,30	-0,200	-0,83	-0,57	
220	FTIR	6,50	1,000	4,15	2,87	
221	FTIR	6,05	0,550	2,28	1,58	
222	FTIR	6,11	0,610	2,53	1,75	
223	FTIR	6,15	0,650	2,70	1,87	
224	FTIR	5,40	-0,100	-0,42	-0,29	
225	FTIR	5,35	-0,150	-0,62	-0,43	
226	FTIR	5,80	0,300	1,25	0,86	
227	FTIR	5,70	0,200	0,83	0,57	
228	FTIR	5,72	0,220	0,91	0,63	
229	FTIR	6,03	0,530	2,20	1,52	
230	FTIR	6,25	0,750	3,12	2,16	
232	FTIR	5,33	-0,170	-0,71	-0,49	
234	FTIR	5,79	0,290	1,20	0,83	
236	FTIR	5,10	-0,400	-1,66	-1,15	
237	FTIR	6,11	0,610	2,53	1,75	
240	FTIR	5,80	0,300	1,25	0,86	
241	FTIR	5,18	-0,320	-1,33	-0,92	
243	FTIR	4,70	-0,800	-3,32	-2,30	
244	FTIR	5,32	-0,180	-0,75	-0,52	
245	FTIR	5,67	0,170	0,71	0,49	
248	FTIR	4,90	-0,600	-2,49	-1,72	
249	FTIR	5,68	0,180	0,75	0,52	
251	FTIR	5,35	-0,150	-0,62	-0,43	
253	FTIR	5,50	0,000	0,00	0,00	
255	FTIR	5,56	0,060	0,25	0,17	
256	FTIR	5,29	-0,210	-0,87	-0,60	
257	FTIR	6,31	0,810	3,36	2,33	
258	FTIR	5,90	0,400	1,66	1,15	
259	FTIR	5,30	-0,200	-0,83	-0,57	
260	FTIR	7,40	1,900	7,89	5,46	(***)
262	FTIR	5,85	0,350	1,45	1,01	
265	FTIR	5,80	0,300	1,25	0,86	
266	FTIR	5,54	0,040	0,17	0,11	
267	FTIR	6,40	0,900	3,74	2,59	
269	FTIR	5,81	0,310	1,29	0,89	
270	FTIR	4,95	-0,550	-2,28	-1,58	
271	FTIR	5,62	0,120	0,50	0,34	
273	FTIR	5,42	-0,080	-0,33	-0,23	
274	FTIR	5,59	0,090	0,37	0,26	
276	FTIR	5,60	0,100	0,42	0,29	
277	FTIR	6,00	0,500	2,08	1,44	
278	FTIR	5,20	-0,300	-1,25	-0,86	
279	FTIR	5,40	-0,100	-0,42	-0,29	
280	FTIR	6,44	0,940	3,91	2,70	
281	FTIR	6,00	0,500	2,08	1,44	
282	FTIR	5,87	0,370	1,54	1,06	
283	FTIR	5,91	0,410	1,70	1,18	
284	FTIR	5,54	0,040	0,17	0,11	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
285	FTIR	4,90	-0,600	-2,49	-1,72	
286	FTIR	5,30	-0,200	-0,83	-0,57	
287	FTIR	5,10	-0,400	-1,66	-1,15	
321	FTIR	5,68	0,180	0,75	0,52	
328	FTIR	5,31	-0,190	-0,79	-0,55	
330	FTIR	5,80	0,300	1,25	0,86	
337	FTIR	4,97	-0,530	-2,20	-1,52	



5.8 pH-Wert

5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,66	0,060	1,26	
02	potentiometr.	3,64	0,040	0,84	
04	potentiometr.	3,66	0,060	1,26	
05	potentiometr.	3,59	-0,010	-0,21	
06	potentiometr.	3,65	0,050	1,05	
09	potentiometr.	3,66	0,060	1,26	
10	potentiometr.	3,64	0,040	0,84	
11	potentiometr.	3,51	-0,090	-1,89	
13	potentiometr.	3,60	0,000	0,00	
16	potentiometr.	3,63	0,030	0,63	
19	potentiometr.	3,61	0,010	0,21	
21	potentiometr.	3,55	-0,050	-1,05	
22	potentiometr.	3,59	-0,010	-0,21	
23	potentiometr.	3,62	0,020	0,42	
26	k. A.	3,69	0,090	1,89	
27	potentiometr.	3,68	0,080	1,68	
28	potentiometr.	3,65	0,050	1,05	
30	potentiometr.	3,55	-0,050	-1,05	
32	potentiometr.	3,60	0,000	0,00	
35	potentiometr.	3,50	-0,100	-2,10	
37	potentiometr.	3,60	0,000	0,00	
38	potentiometr.	3,56	-0,040	-0,84	
39	potentiometr.	3,63	0,030	0,63	
40	potentiometr.	3,65	0,050	1,05	
41	potentiometr.	3,52	-0,080	-1,68	
43	potentiometr.	3,63	0,030	0,63	
44	potentiometr.	3,56	-0,040	-0,84	
45	potentiometr.	3,51	-0,090	-1,89	
46	potentiometr.	3,40	-0,200	-4,20	
47	potentiometr.	3,46	-0,140	-2,94	
49	potentiometr.	3,58	-0,020	-0,42	
51	potentiometr.	3,52	-0,080	-1,68	
52	potentiometr.	3,46	-0,140	-2,94	
55	potentiometr.	3,64	0,040	0,84	
57	potentiometr.	3,61	0,010	0,21	
60	potentiometr.	3,55	-0,050	-1,05	
61	potentiometr.	3,60	0,000	0,00	
63	potentiometr.	3,70	0,100	2,10	
66	potentiometr.	3,50	-0,100	-2,10	
68	potentiometr.	3,55	-0,050	-1,05	
72	potentiometr.	3,43	-0,170	-3,57	
73	potentiometr.	3,53	-0,070	-1,47	
75	potentiometr.	3,69	0,090	1,89	
78	potentiometr.	3,64	0,040	0,84	
79	potentiometr.	3,63	0,030	0,63	

5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	44	3,589	0,0715
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,529	0,0711
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	3,690	
	alle Verfahren	126	3,551	0,0805

5.8.3 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,48	-0,120	-2,43	
202	FTIR	3,53	-0,070	-1,42	
203	FTIR	3,48	-0,120	-2,43	
204	FTIR	3,61	0,010	0,20	
205	FTIR	3,54	-0,060	-1,22	
206	FTIR	3,58	-0,020	-0,41	
207	FTIR	3,49	-0,110	-2,23	
208	FTIR	3,60	0,000	0,00	
209	FTIR	3,63	0,030	0,61	
210	FTIR	3,45	-0,150	-3,04	
211	FTIR	3,60	0,000	0,00	
212	FTIR	3,59	-0,010	-0,20	
213	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
215	FTIR	3,54	-0,060	-1,22	
216	FTIR	3,58	-0,020	-0,41	
217	FTIR	3,35	-0,250	-5,07	(***)
218	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
219	FTIR	3,55	-0,050	-1,01	
220	FTIR	3,67	0,070	1,42	
221	FTIR	3,54	-0,060	-1,22	
222	FTIR	3,45	-0,150	-3,04	
223	FTIR	3,55	-0,050	-1,01	
224	FTIR	3,45	-0,150	-3,04	
225	FTIR	3,52	-0,080	-1,62	
226	FTIR	3,50	-0,100	-2,03	
227	FTIR	3,61	0,010	0,20	
228	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
229	FTIR	3,63	0,030	0,61	
230	FTIR	3,55	-0,050	-1,01	
232	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
234	FTIR	3,56	-0,040	-0,81	
235	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
236	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
237	FTIR	3,61	0,010	0,20	
240	FTIR	3,56	-0,040	-0,81	
241	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
242	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
243	FTIR	3,49	-0,110	-2,23	
244	FTIR	3,44	-0,160	-3,25	
245	FTIR	3,52	-0,080	-1,62	
246	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
248	FTIR	3,65	0,050	1,01	
249	FTIR	3,53	-0,070	-1,42	
250	FTIR	3,67	0,070	1,42	
251	FTIR	3,52	-0,080	-1,62	
253	FTIR	3,55	-0,050	-1,01	
255	FTIR	3,48	-0,120	-2,43	
256	FTIR	3,36	-0,240	-4,87	
257	FTIR	3,46	-0,140	-2,84	
258	FTIR	3,46	-0,140	-2,84	
259	FTIR	3,72	0,120	2,43	
260	FTIR	3,56	-0,040	-0,81	
262	FTIR	3,63	0,030	0,61	
263	FTIR	3,66	0,060	1,22	
264	FTIR	3,56	-0,040	-0,81	
265	FTIR	3,40	-0,200	-4,06	
266	FTIR	3,59	-0,010	-0,20	
267	FTIR	3,53	-0,070	-1,42	
268	FTIR	3,52	-0,080	-1,62	
269	FTIR	3,37	-0,230	-4,67	
270	FTIR	3,41	-0,190	-3,85	
271	FTIR	3,45	-0,150	-3,04	
273	FTIR	3,49	-0,110	-2,23	
274	FTIR	3,54	-0,060	-1,22	

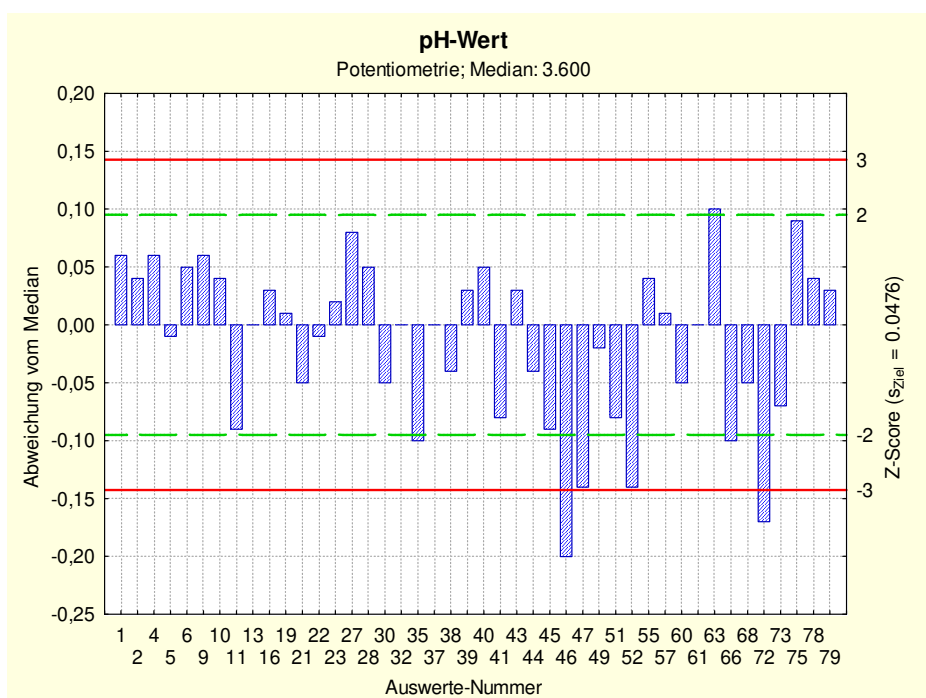
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der potentiometrischen Werte ab.

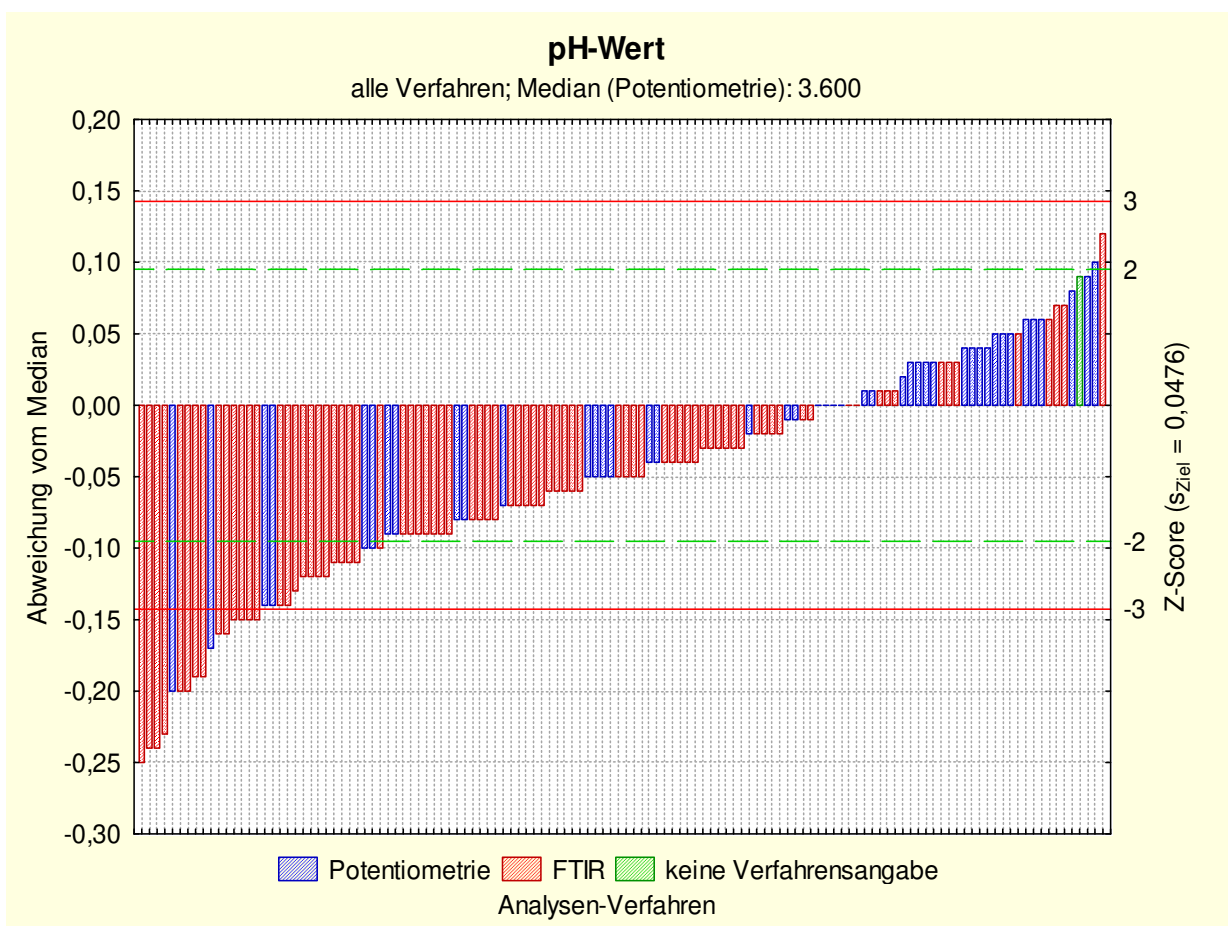
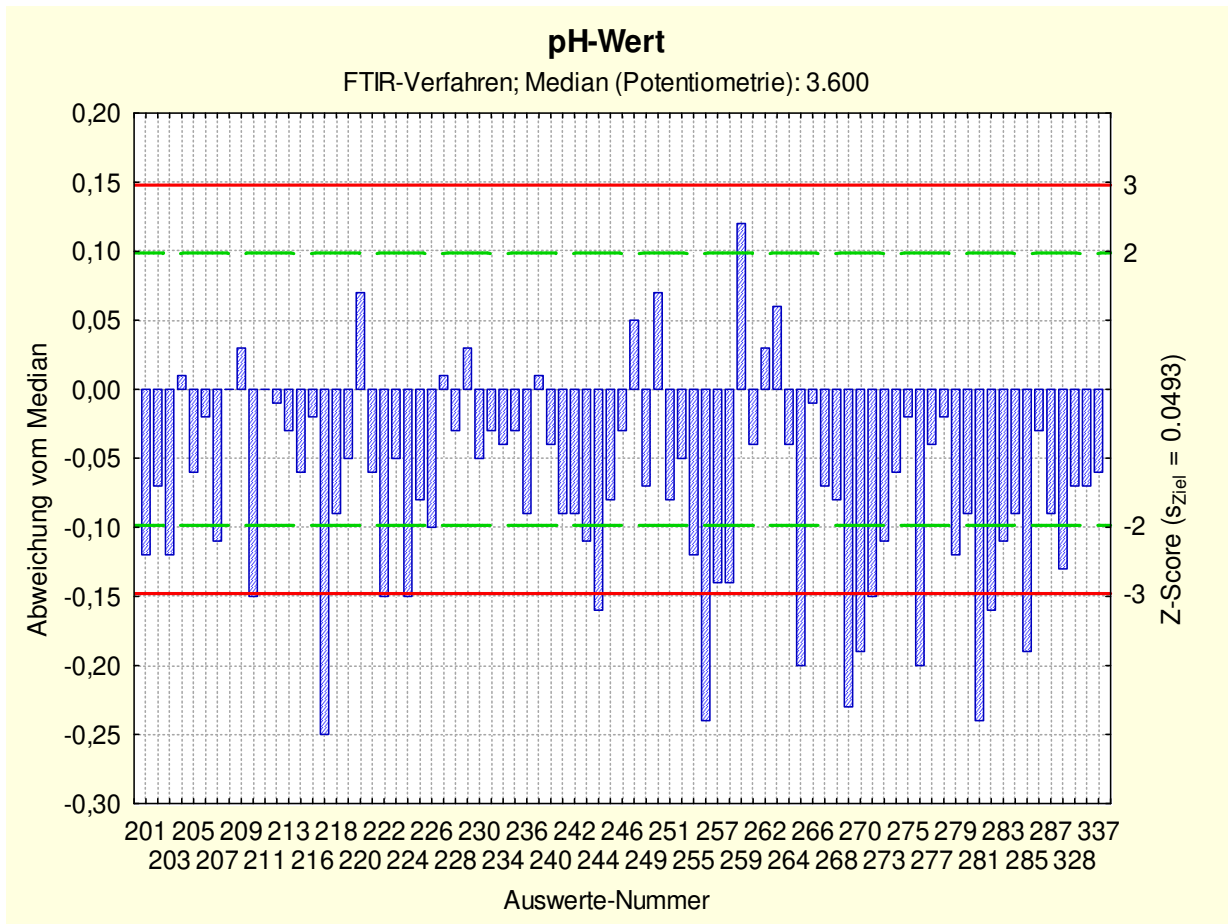
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	3,58	-0,020	-0,41	
276	FTIR	3,40	-0,200	-4,06	
277	FTIR	3,56	-0,040	-0,81	
278	FTIR	3,58	-0,020	-0,41	
279	FTIR	3,48	-0,120	-2,43	
280	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
281	FTIR	3,36	-0,240	-4,87	
282	FTIR	3,44	-0,160	-3,25	
283	FTIR	3,49	-0,110	-2,23	
284	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
285	FTIR	3,41	-0,190	-3,85	
286	FTIR	3,57	-0,030	-0,61	
287	FTIR	3,51	-0,090	-1,83	
321	FTIR	3,47	-0,130	-2,64	
328	FTIR	3,53	-0,070	-1,42	
330	FTIR	3,53	-0,070	-1,42	
337	FTIR	3,54	-0,060	-1,22	

5.8.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	44
Minimalwert	3,40
Mittelwert	3,585
Median	3,600
Maximalwert	3,70
Standardabweichung (s_L)	0,0714
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0108
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,50
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,45
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,23
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,22





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	3,96	-0,095	-0,51	-0,89	
02	LwK 5.2.1	3,99	-0,065	-0,35	-0,61	
03	phot.aut.	4,45	0,395	2,13	3,69	
04	LwK 5.2.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
05	LwK 5.1	3,98	-0,075	-0,40	-0,70	
06	LwK 5.2.1	4,06	0,005	0,03	0,05	
07	LwK 5.2.1	4,48	0,425	2,29	3,97	
09	LwK 5.2.1	4,02	-0,035	-0,19	-0,33	
10	LwK 5.1	3,90	-0,155	-0,83	-1,45	
11	LwK 5.2.1	4,03	-0,025	-0,13	-0,23	
13	LwK 5.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
16	LwK 5.2.1	3,95	-0,105	-0,57	-0,98	
19	LwK 5.2.1	4,06	0,005	0,03	0,05	
21	LwK 5.1	4,20	0,145	0,78	1,35	
22	LwK 5.1	3,82	-0,235	-1,26	-2,19	
23	LwK 5.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
24	LwK 5.1	4,30	0,245	1,32	2,29	
26	LwK 5.1	4,12	0,065	0,35	0,61	
27	LwK 5.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
28	LwK 5.1	3,95	-0,105	-0,57	-0,98	
30	LwK 5.2.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
32	LwK 5.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
34	LwK 5.2.1	4,03	-0,025	-0,13	-0,23	
37	LwK 5.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
38	LwK 5.1	4,05	-0,005	-0,03	-0,05	
39	LwK 5.2.1	4,11	0,055	0,30	0,51	
40	LwK 5.1	4,22	0,163	0,88	1,52	
41	LwK 5.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
42	LwK 5.1	3,94	-0,115	-0,62	-1,07	
43	LwK 5.1	4,20	0,145	0,78	1,35	
45	LwK 5.2.1	4,20	0,145	0,78	1,35	
46	LwK 5.2.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
47	LwK 5.1	4,00	-0,055	-0,30	-0,51	
49	LwK 5.1	3,98	-0,075	-0,40	-0,70	
51	LwK 5.2.1	4,30	0,245	1,32	2,29	
52	LwK 5.2.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
54	LwK 5.2.1	6,50	2,445	13,16	22,82	(*)
55	LwK 5.2.1	4,03	-0,025	-0,13	-0,23	
57	LwK 5.2.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
59	LwK 5.2.1	4,27	0,215	1,16	2,01	
60	LwK 5.2.1	4,20	0,145	0,78	1,35	
61	LwK 5.2.1	4,02	-0,035	-0,19	-0,33	
63	LwK 5.1	4,20	0,145	0,78	1,35	
66	LwK 5.1	4,10	0,045	0,24	0,42	
68	LwK 5.1	3,80	-0,255	-1,37	-2,38	
72	LwK 5.1	4,60	0,545	2,93	5,09	(**)
73	LwK 5.1	3,90	-0,155	-0,83	-1,45	
75	LwK 5.2.2	3,90	-0,155	-0,83	-1,45	
78	LwK 5.1	4,09	0,035	0,19	0,33	
79	LwK 5.2.2	4,10	0,045	0,24	0,42	
94	LwK 5.2.1	4,06	0,005	0,03	0,05	

Der mit (*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und wird nicht berücksichtigt.

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

5.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	4,15	0,090	0,48	0,62	
202	LwK 5.3	4,00	-0,060	-0,32	-0,41	
203	LwK 5.3	3,91	-0,150	-0,81	-1,03	
204	LwK 5.3	3,97	-0,090	-0,48	-0,62	
205	LwK 5.3	3,94	-0,120	-0,65	-0,83	
206	LwK 5.3	4,38	0,320	1,72	2,21	
207	LwK 5.3	4,30	0,240	1,29	1,66	
208	LwK 5.3	4,04	-0,020	-0,11	-0,14	
209	LwK 5.3	3,91	-0,150	-0,81	-1,03	
210	LwK 5.3	3,73	-0,330	-1,77	-2,28	
211	LwK 5.3	3,94	-0,120	-0,65	-0,83	
212	LwK 5.3	4,16	0,100	0,54	0,69	
213	LwK 5.3	4,13	0,070	0,38	0,48	
215	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
216	LwK 5.3	4,04	-0,020	-0,11	-0,14	
217	LwK 5.3	4,13	0,070	0,38	0,48	
218	LwK 5.3	4,02	-0,040	-0,22	-0,28	
219	LwK 5.3	4,05	-0,010	-0,05	-0,07	
220	LwK 5.3	4,33	0,270	1,45	1,86	
221	LwK 5.3	4,07	0,010	0,05	0,07	
222	LwK 5.3	3,79	-0,270	-1,45	-1,86	
223	LwK 5.3	3,40	-0,660	-3,55	-4,55	
224	LwK 5.3	4,40	0,340	1,83	2,34	
225	LwK 5.3	4,18	0,120	0,65	0,83	
226	LwK 5.3	4,20	0,140	0,75	0,97	
227	LwK 5.3	3,99	-0,070	-0,38	-0,48	
228	LwK 5.3	4,23	0,170	0,91	1,17	
229	LwK 5.3	4,45	0,390	2,10	2,69	
230	LwK 5.3	4,03	-0,030	-0,16	-0,21	
232	LwK 5.3	4,22	0,160	0,86	1,10	
234	LwK 5.3	4,02	-0,040	-0,22	-0,28	
235	LwK 5.3	3,90	-0,160	-0,86	-1,10	
236	LwK 5.3	4,30	0,240	1,29	1,66	
237	LwK 5.3	4,11	0,050	0,27	0,34	
240	LwK 5.3	4,25	0,190	1,02	1,31	
241	LwK 5.3	4,23	0,170	0,91	1,17	
242	LwK 5.3	3,67	-0,390	-2,10	-2,69	
243	LwK 5.3	3,80	-0,260	-1,40	-1,79	
244	LwK 5.3	4,18	0,120	0,65	0,83	
245	LwK 5.3	4,01	-0,050	-0,27	-0,34	
246	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
247	LwK 5.3	4,02	-0,040	-0,22	-0,28	
248	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
249	LwK 5.3	4,17	0,110	0,59	0,76	
250	LwK 5.3	4,20	0,140	0,75	0,97	
251	LwK 5.3	4,31	0,250	1,34	1,72	
253	LwK 5.3	4,30	0,240	1,29	1,66	
254	LwK 5.3	4,30	0,240	1,29	1,66	
255	LwK 5.3	4,19	0,130	0,70	0,90	
256	LwK 5.3	4,41	0,350	1,88	2,41	
257	LwK 5.3	4,41	0,350	1,88	2,41	
258	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
259	LwK 5.3	3,80	-0,260	-1,40	-1,79	
260	LwK 5.3	4,20	0,140	0,75	0,97	
261	LwK 5.3	3,89	-0,170	-0,91	-1,17	
262	LwK 5.3	3,90	-0,160	-0,86	-1,10	
263	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
264	LwK 5.3	3,94	-0,120	-0,65	-0,83	
265	LwK 5.3	3,92	-0,140	-0,75	-0,97	
266	LwK 5.3	4,00	-0,060	-0,32	-0,41	
267	LwK 5.3	4,13	0,070	0,38	0,48	
268	LwK 5.3	3,70	-0,360	-1,94	-2,48	
269	LwK 5.3	4,06	0,000	0,00	0,00	
270	LwK 5.3	3,78	-0,280	-1,51	-1,93	
271	LwK 5.3	3,87	-0,190	-1,02	-1,31	
273	LwK 5.3	3,95	-0,110	-0,59	-0,76	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

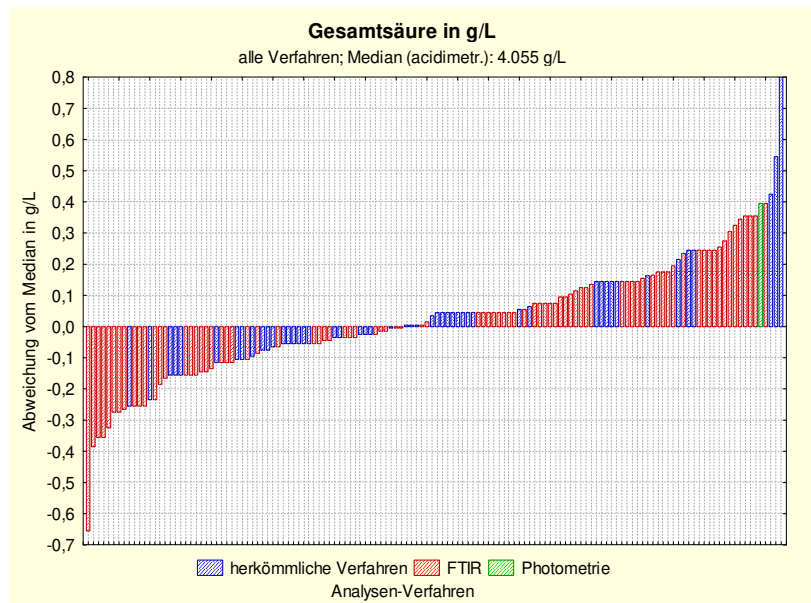
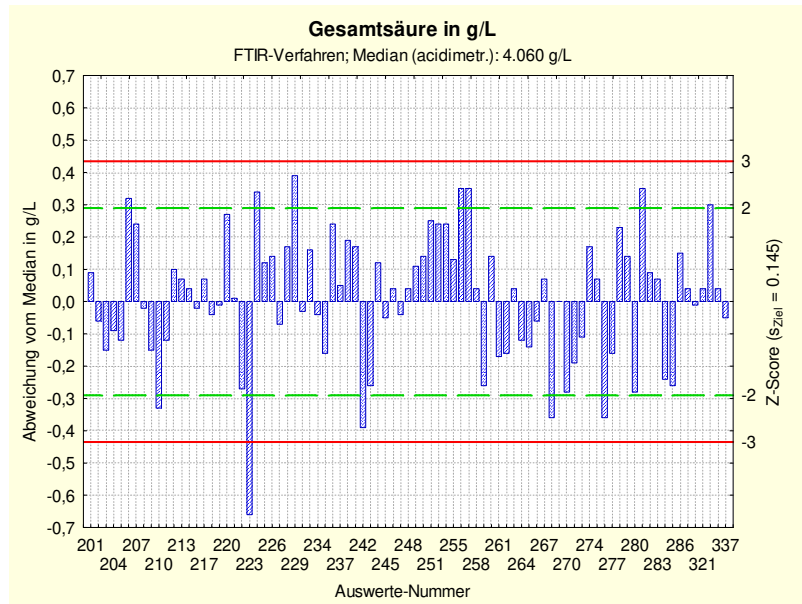
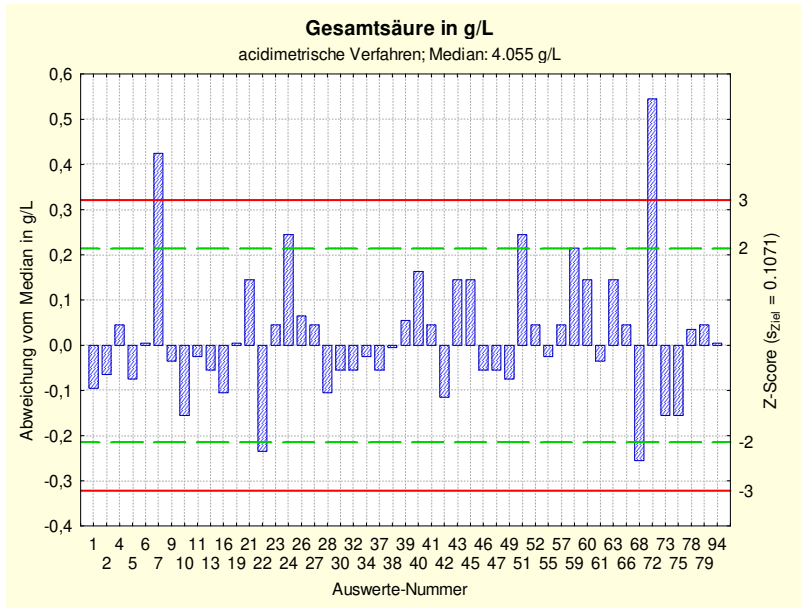
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 5.3	4,23	0,170	0,91	1,17	
275	LwK 5.3	4,13	0,070	0,38	0,48	
276	LwK 5.3	3,70	-0,360	-1,94	-2,48	
277	LwK 5.3	3,90	-0,160	-0,86	-1,10	
278	LwK 5.3	4,29	0,230	1,24	1,59	
279	LwK 5.3	4,20	0,140	0,75	0,97	
280	LwK 5.3	3,78	-0,280	-1,51	-1,93	
281	LwK 5.3	4,41	0,350	1,88	2,41	
282	LwK 5.3	4,15	0,090	0,48	0,62	
283	LwK 5.3	4,13	0,070	0,38	0,48	
284	LwK 5.3	3,82	-0,240	-1,29	-1,66	
285	LwK 5.3	3,80	-0,260	-1,40	-1,79	
286	LwK 5.3	4,21	0,150	0,81	1,03	
287	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
312	LwK 5.3	4,05	-0,010	-0,05	-0,07	
321	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
328	LwK 5.3	4,36	0,300	1,61	2,07	
330	LwK 5.3	4,10	0,040	0,22	0,28	
337	LwK 5.3	4,01	-0,050	-0,27	-0,34	

5.9.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	49	48
Minimalwert	3,80	3,80
Mittelwert	4,076	4,065
Median	4,060	4,055
Maximalwert	4,60	4,48
Standardabweichung (s_L)	0,148	0,128
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,021	0,019
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,186	0,186
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,80	0,69
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,38	1,20
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	1,08	0,88
Quotient (u_M/s_H)	0,11	0,10
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,20	0,17
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,15	0,13

5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	25	4,053	0,142
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	23	4,090	0,116
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	4,000	0,160
	acidimetrische Verfahren	50	4,068	0,122
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	4,077	0,200
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	4,450	



5.10 Weinsäure [g/L]

5.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: alle herkömmlichen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,72	-0,070	-0,75	
02	HPLC	1,68	-0,110	-1,19	
04	photometr.	1,79	0,000	0,00	
05	photometr.	1,75	-0,040	-0,43	
06	HPLC	1,74	-0,052	-0,56	
07	HPLC	1,60	-0,190	-2,05	
09	photometr., autom.	1,73	-0,060	-0,65	
10	photometr.	1,85	0,060	0,65	
13	photometr., autom.	2,22	0,430	4,64	
16	photometr., autom.	2,10	0,310	3,34	
19	photometr., autom.	1,74	-0,050	-0,54	
22	HPLC	1,78	-0,010	-0,11	
23	HPLC	1,77	-0,020	-0,22	
27	HPLC	1,80	0,010	0,11	
30	photometr., autom.	1,92	0,130	1,40	
38	photometr., autom.	1,79	0,000	0,00	
39	HPLC	1,78	-0,010	-0,11	
40	photometr., autom.	1,93	0,140	1,51	
41	photometr., autom.	1,87	0,080	0,86	
44	photometr., autom.	2,12	0,330	3,56	
45	photometr., autom.	1,95	0,160	1,72	
49	photometr., autom.	1,70	-0,090	-0,97	
55	photometr., autom.	2,02	0,230	2,48	
57	photometr., autom.	1,75	-0,040	-0,43	
60	photometr., autom.	1,80	0,010	0,11	
61	HPLC	1,87	0,080	0,86	
68	photometr., autom.	0,51	-1,280	-13,80	(*)
78	photometr.	1,72	-0,070	-0,75	
97	HPLC	1,65	-0,140	-1,51	
102	photometr., autom.	1,86	0,070	0,75	
111	NMR	1,57	-0,225	-2,42	
112	NMR	1,63	-0,158	-1,71	
113	NMR	1,54	-0,250	-2,70	
114	NMR	1,43	-0,360	-3,89	
115	NMR	1,68	-0,110	-1,19	
116	NMR	1,74	-0,049	-0,53	

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

5.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,67	-0,120	-1,29	-0,53	
202	FTIR	1,86	0,070	0,75	0,31	
203	FTIR	1,72	-0,070	-0,75	-0,31	
204	FTIR	1,79	0,000	0,00	0,00	
205	FTIR	1,59	-0,200	-2,16	-0,88	
207	FTIR	1,90	0,110	1,19	0,48	
208	FTIR	1,80	0,010	0,11	0,04	
209	FTIR	2,00	0,210	2,26	0,93	
210	FTIR	1,81	0,020	0,22	0,09	
211	FTIR	1,67	-0,120	-1,29	-0,53	
212	FTIR	1,73	-0,060	-0,65	-0,26	
213	FTIR	2,01	0,220	2,37	0,97	
215	FTIR	1,90	0,110	1,19	0,48	
216	FTIR	1,44	-0,350	-3,77	-1,54	
217	FTIR	1,58	-0,210	-2,26	-0,93	
218	FTIR	2,00	0,210	2,26	0,93	
219	FTIR	1,85	0,060	0,65	0,26	
220	FTIR	1,80	0,010	0,11	0,04	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	1,69	-0,100	-1,08	-0,44	
222	FTIR	1,98	0,190	2,05	0,84	
223	FTIR	1,68	-0,110	-1,19	-0,48	
224	FTIR	1,70	-0,090	-0,97	-0,40	
225	FTIR	1,92	0,130	1,40	0,57	
226	FTIR	1,68	-0,110	-1,19	-0,48	
227	FTIR	1,90	0,110	1,19	0,48	
228	FTIR	1,89	0,100	1,08	0,44	
229	FTIR	2,15	0,360	3,88	1,59	
230	FTIR	1,93	0,140	1,51	0,62	
232	FTIR	1,67	-0,120	-1,29	-0,53	
234	FTIR	1,91	0,120	1,29	0,53	
235	FTIR	0,40	-1,390	-14,98	-6,12	(*)
236	FTIR	1,50	-0,290	-3,13	-1,28	
237	FTIR	1,94	0,150	1,62	0,66	
240	FTIR	1,81	0,020	0,22	0,09	
241	FTIR	1,85	0,060	0,65	0,26	
242	FTIR	1,76	-0,030	-0,32	-0,13	
243	FTIR	2,00	0,210	2,26	0,93	
244	FTIR	1,99	0,200	2,16	0,88	
245	FTIR	2,09	0,300	3,23	1,32	
246	FTIR	1,80	0,010	0,11	0,04	
248	FTIR	2,30	0,510	5,50	2,25	
249	FTIR	2,29	0,500	5,39	2,20	
250	FTIR	1,80	0,010	0,11	0,04	
251	FTIR	1,96	0,170	1,83	0,75	
253	FTIR	1,70	-0,090	-0,97	-0,40	
255	FTIR	2,06	0,270	2,91	1,19	
256	FTIR	1,83	0,040	0,43	0,18	
257	FTIR	1,96	0,170	1,83	0,75	
258	FTIR	1,70	-0,090	-0,97	-0,40	
259	FTIR	1,90	0,110	1,19	0,48	
260	FTIR	1,90	0,110	1,19	0,48	
263	FTIR	0,80	-0,990	-10,67	-4,36	
264	FTIR	1,74	-0,050	-0,54	-0,22	
265	FTIR	1,75	-0,040	-0,43	-0,18	
266	FTIR	1,91	0,120	1,29	0,53	
267	FTIR	1,92	0,130	1,40	0,57	
268	FTIR	1,83	0,040	0,43	0,18	
269	FTIR	2,17	0,380	4,10	1,67	
270	FTIR	1,50	-0,290	-3,13	-1,28	
271	FTIR	1,69	-0,100	-1,08	-0,44	
273	FTIR	1,57	-0,220	-2,37	-0,97	
274	FTIR	2,05	0,260	2,80	1,15	
275	FTIR	1,92	0,130	1,40	0,57	
276	FTIR	1,60	-0,190	-2,05	-0,84	
277	FTIR	3,14	1,350	14,55	5,95	(*)
278	FTIR	2,10	0,310	3,34	1,37	
280	FTIR	1,91	0,120	1,29	0,53	
281	FTIR	2,01	0,220	2,37	0,97	
282	FTIR	1,53	-0,260	-2,80	-1,15	
283	FTIR	2,26	0,470	5,07	2,07	
284	FTIR	2,01	0,220	2,37	0,97	
285	FTIR	1,80	0,010	0,11	0,04	
286	FTIR	1,91	0,120	1,29	0,53	
287	FTIR	1,70	-0,090	-0,97	-0,40	
321	FTIR	1,87	0,080	0,86	0,35	
328	FTIR	1,82	0,030	0,32	0,13	
330	FTIR	2,00	0,210	2,26	0,93	
337	FTIR	1,82	0,030	0,32	0,13	

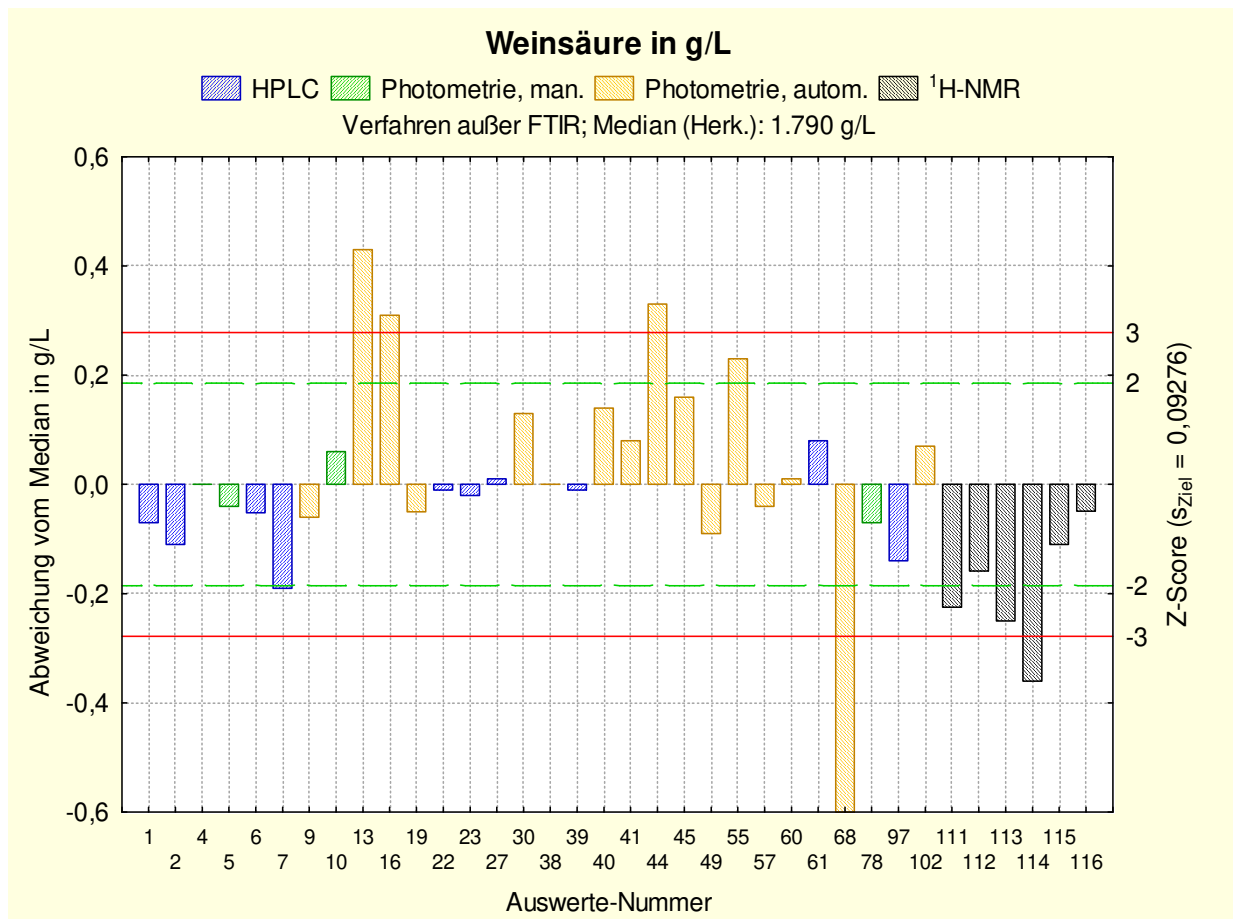
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

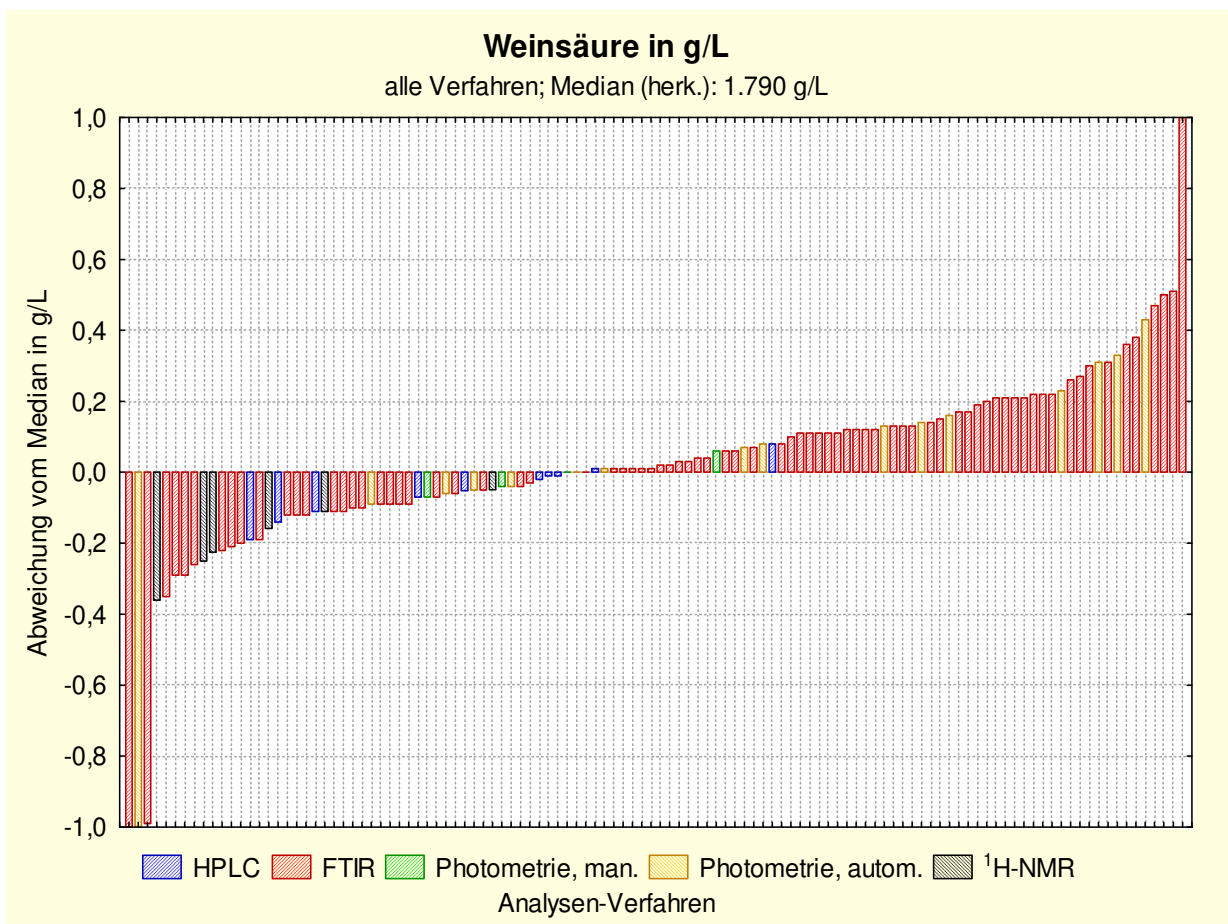
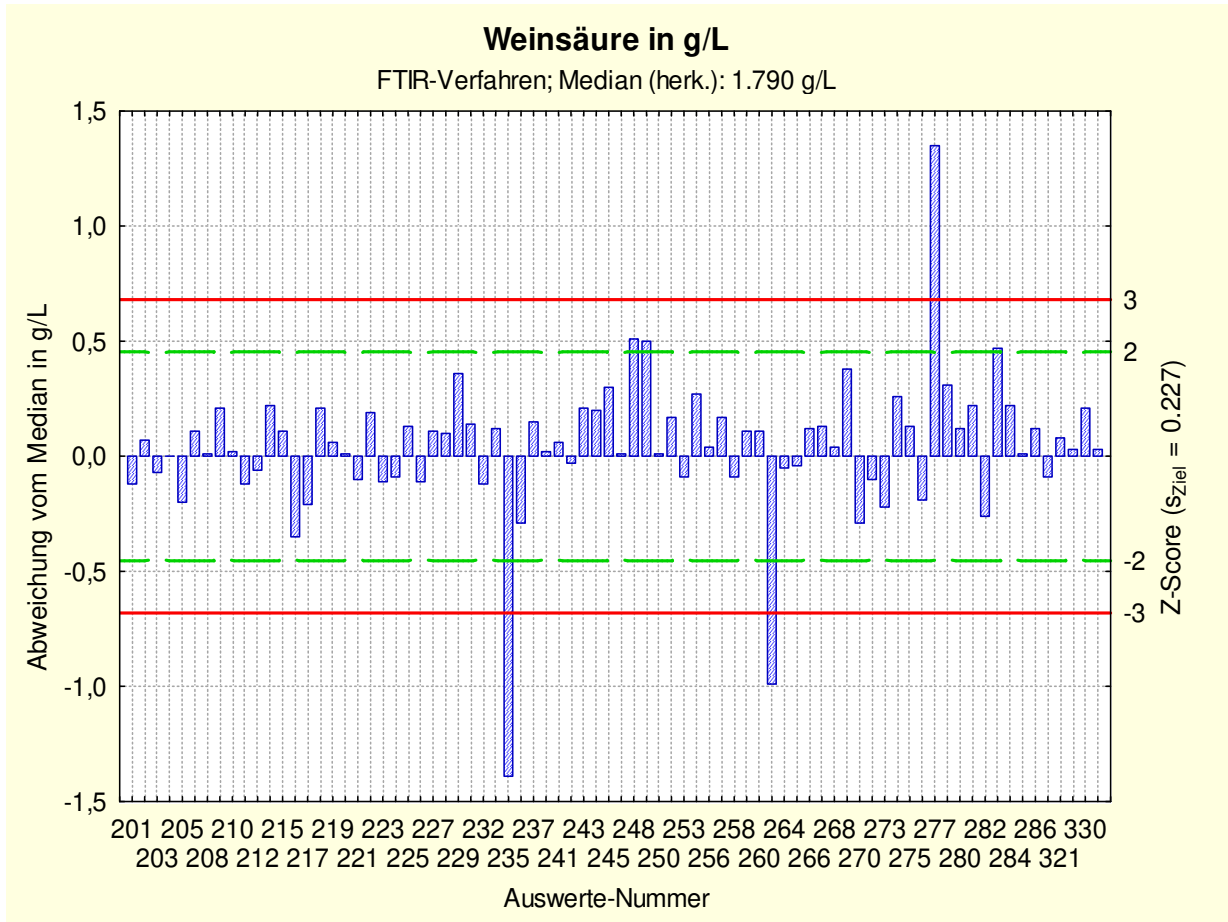
5.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC alle Daten	herk. Verf. alle Daten
Gültige Werte	10	29
Minimalwert	1,60	1,60
Mittelwert	1,739	1,828
Median	1,754	1,790
Maximalwert	1,87	2,22
Standardabweichung (s_L)	0,079	0,144
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,025	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,091	0,093
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,227	0,227
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,87	1,56
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,35	0,63
Quotient (u_M/s_H)	0,27	0,29
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,11	0,12

5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	1,742	0,083
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	1,777	0,063
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	16	1,877	0,183
	alle herkömmlichen Verfahren	30	1,805	0,128
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	1,843	0,187
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,600	0,121





5.11 Flüchtige Säure [g/L]

5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss und experimentelle Zielstandardabweichung mit Z_{Max} = 4,5

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,370	0,0700	3,44	2,45	
02	OIV o. SO2-korr.	0,434	0,1340	6,59	4,69	(***)
04	OIV SO2-korr.	0,358	0,0580	2,85	2,03	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,273	-0,0270	-1,33	-0,94	
06	OIV SO2-korr.	0,209	-0,0910	-4,47	-3,18	
07	OIV o. SO2-korr.	0,310	0,0100	0,49	0,35	
09	OIV SO2-korr.	0,349	0,0490	2,41	1,71	
10	Halbmikro SO2 unber.	0,350	0,0500	2,46	1,75	
11	OIV SO2-korr.	0,134	-0,1660	-8,16	-5,81	(*)
22	Halbmikro SO2 unber.	0,330	0,0300	1,47	1,05	
26	Gerhardt SO2 korr.	0,311	0,0105	0,52	0,37	
28	Halbmikro SO2 ausg.	0,299	-0,0010	-0,05	-0,04	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,290	-0,0100	-0,49	-0,35	
32	Halbmikro SO2 unber.	0,450	0,1500	7,37	5,25	(***)
37	Halbmikro SO2 korr.	0,320	0,0200	0,98	0,70	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,277	-0,0230	-1,13	-0,80	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,280	-0,0200	-0,98	-0,70	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,365	0,0650	3,20	2,27	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,260	-0,0400	-1,97	-1,40	
43	Gerhardt SO2 korr.	0,280	-0,0200	-0,98	-0,70	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,340	0,0400	1,97	1,40	
46	Halbmikro SO2 korr.	0,370	0,0700	3,44	2,45	
55	Rentschler mod. korr.	0,283	-0,0170	-0,84	-0,60	
57	Gerhardt SO2 korr.	0,300	0,0000	0,00	0,00	
61	OIV SO2-korr.	0,180	-0,1200	-5,90	-4,20	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,400	0,1000	4,92	3,50	
65	Wädenswil SO2 korr.	0,338	0,0380	1,87	1,33	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,500	0,2000	9,83	7,00	(*)
68	Gerhardt SO2 korr.	0,500	0,2000	9,83	7,00	(*)
72	Wädenswil SO2 unber.	0,395	0,0950	4,67	3,33	
78	Halbmikro SO2 korr.	0,440	0,1400	6,88	4,90	(**)
79	Halbmikro SO2 unber.	0,350	0,0500	2,46	1,75	
80	Wädenswil SO2 korr.	0,320	0,0200	0,98	0,70	

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

(**) Dieser Wert bleibt bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt, da Z-Score >4,5.

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

5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,400	0,0948	4,59	1,06	
202	FTIR	0,401	0,0958	4,64	1,07	
203	FTIR	0,388	0,0827	4,01	0,93	
204	FTIR	0,350	0,0447	2,17	0,50	
205	FTIR	0,390	0,0847	4,11	0,95	
207	FTIR	0,280	-0,0252	-1,22	-0,28	
208	FTIR	0,254	-0,0513	-2,48	-0,58	
209	FTIR	0,300	-0,0053	-0,25	-0,06	
210	FTIR	0,480	0,1747	8,46	1,96	
211	FTIR	0,365	0,0597	2,89	0,67	
212	FTIR	0,250	-0,0553	-2,68	-0,62	
213	FTIR	0,250	-0,0553	-2,68	-0,62	
215	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
216	FTIR	0,320	0,0147	0,71	0,17	
217	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
218	FTIR	0,420	0,1147	5,56	1,29	
219	FTIR	0,410	0,1047	5,07	1,18	
220	FTIR	0,630	0,3247	15,73	3,64	
222	FTIR	0,390	0,0847	4,11	0,95	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	FTIR	0,460	0,1548	7,50	1,74	
225	FTIR	0,240	-0,0653	-3,16	-0,73	
226	FTIR	0,317	0,0117	0,57	0,13	
227	FTIR	0,260	-0,0453	-2,19	-0,51	
228	FTIR	0,560	0,2548	12,34	2,86	
229	FTIR	0,350	0,0447	2,17	0,50	
230	FTIR	0,299	-0,0063	-0,30	-0,07	
232	FTIR	0,450	0,1447	7,01	1,62	
234	FTIR	0,350	0,0447	2,17	0,50	
235	FTIR	0,570	0,2647	12,82	2,97	
236	FTIR	0,360	0,0547	2,65	0,61	
237	FTIR	0,560	0,2548	12,34	2,86	
240	FTIR	0,530	0,2248	10,89	2,52	
241	FTIR	0,280	-0,0252	-1,22	-0,28	
242	FTIR	0,410	0,1047	5,07	1,18	
243	FTIR	0,300	-0,0053	-0,25	-0,06	
244	FTIR	0,430	0,1247	6,04	1,40	
245	FTIR	0,520	0,2148	10,40	2,41	
246	FTIR	0,370	0,0647	3,14	0,73	
248	FTIR	0,280	-0,0252	-1,22	-0,28	
249	FTIR	0,270	-0,0353	-1,71	-0,40	
250	FTIR	0,430	0,1247	6,04	1,40	
251	FTIR	0,270	-0,0353	-1,71	-0,40	
253	FTIR	0,470	0,1647	7,98	1,85	
254	FTIR	0,460	0,1548	7,50	1,74	
255	FTIR	0,230	-0,0753	-3,65	-0,84	
256	FTIR	0,500	0,1947	9,43	2,19	
257	FTIR	0,270	-0,0353	-1,71	-0,40	
259	FTIR	0,340	0,0348	1,68	0,39	
260	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
262	FTIR	0,450	0,1447	7,01	1,62	
263	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
264	FTIR	0,410	0,1047	5,07	1,18	
265	FTIR	0,440	0,1347	6,53	1,51	
266	FTIR	0,450	0,1447	7,01	1,62	
267	FTIR	0,320	0,0147	0,71	0,17	
268	FTIR	0,490	0,1847	8,95	2,07	
269	FTIR	0,440	0,1347	6,53	1,51	
270	FTIR	0,280	-0,0252	-1,22	-0,28	
271	FTIR	0,410	0,1047	5,07	1,18	
273	FTIR	0,340	0,0348	1,68	0,39	
274	FTIR	0,420	0,1147	5,56	1,29	
275	FTIR	0,420	0,1147	5,56	1,29	
276	FTIR	0,360	0,0547	2,65	0,61	
277	FTIR	0,200	-0,1053	-5,10	-1,18	
278	FTIR	0,310	0,0047	0,23	0,05	
279	FTIR	0,320	0,0147	0,71	0,17	
280	FTIR	0,370	0,0647	3,14	0,73	
281	FTIR	0,550	0,2448	11,86	2,75	
282	FTIR	0,710	0,4047	19,61	4,54	(*)
283	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
284	FTIR	0,380	0,0747	3,62	0,84	
285	FTIR	0,330	0,0247	1,20	0,28	
286	FTIR	0,260	-0,0453	-2,19	-0,51	
287	FTIR	0,310	0,0047	0,23	0,05	
328	FTIR	0,270	-0,0353	-1,71	-0,40	
330	FTIR	0,320	0,0147	0,71	0,17	
337	FTIR	0,370	0,0647	3,14	0,73	

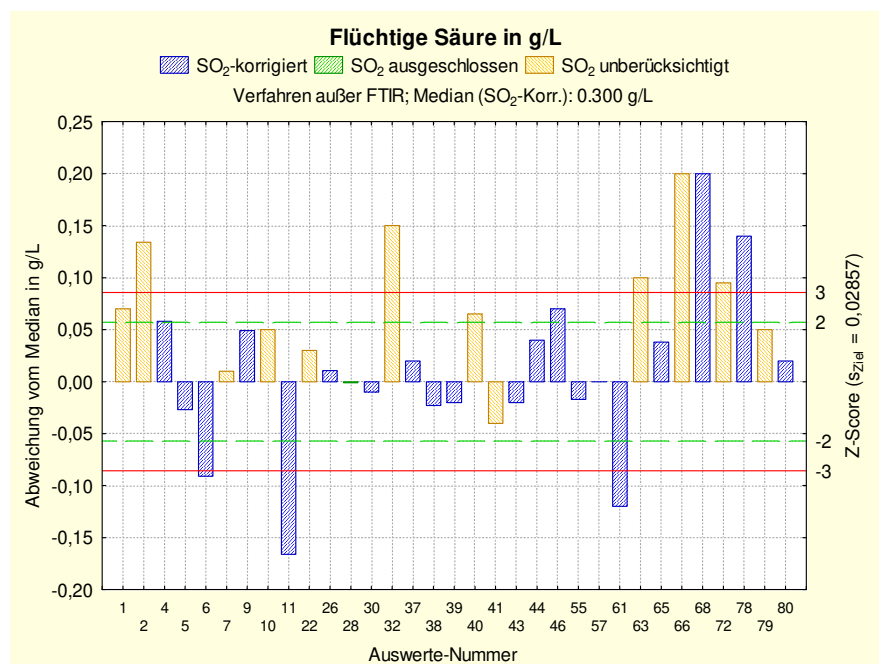
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der maßgeblichen Werte ab.

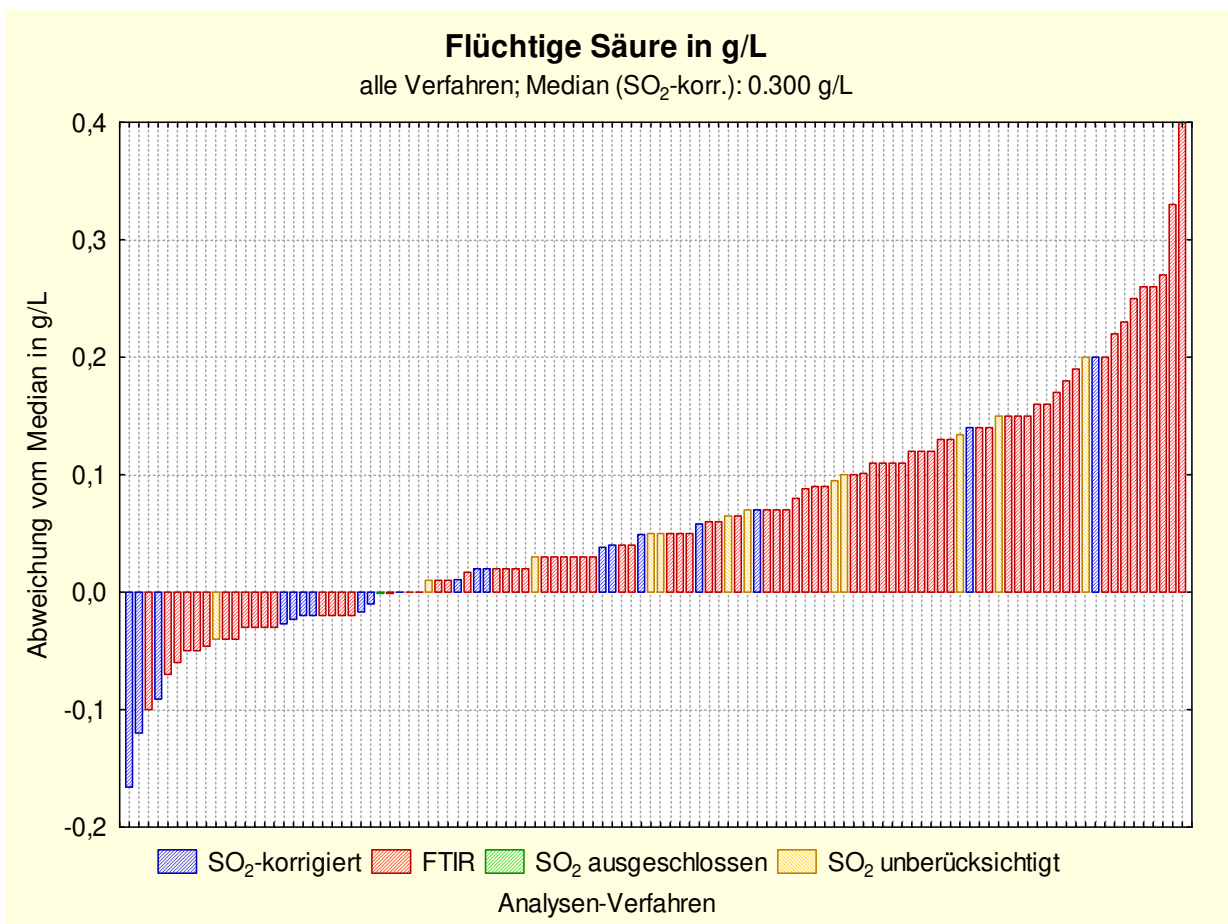
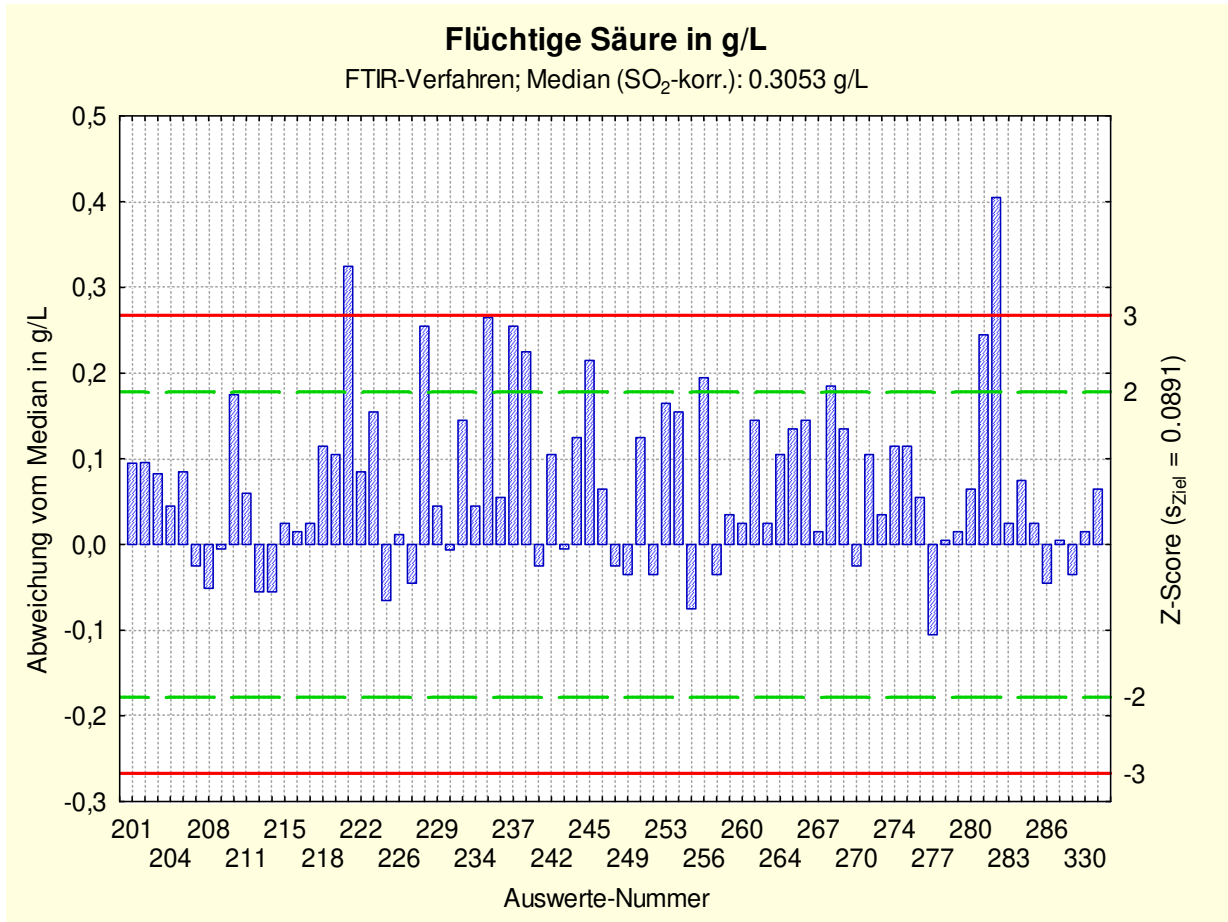
5.11.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur oder SO ₂ -Ausschluss	alle Daten Z _{Max} = 5,0	ber. Daten Z _{Max} = 4,5
Gültige Werte	18	17
Minimalwert	0,180	0,180
Mittelwert	0,3065	0,2987
Median	0,3053	0,3000
Maximalwert	0,440	0,370
Standardabweichung (s _L)	0,059	0,050
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,014	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,021	0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (S _Ü FTIR)	0,089	0,089
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,84	2,45
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)	2,05	1,74
Quotient (s _L /S _Ü FTIR)	0,66	0,56
Quotient (u _M /s _H)	0,67	0,59
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,48	0,42
Quotient (u _M /S _Ü FTIR)	0,16	0,13

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	7	0,3881	0,0614
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	1	0,2990	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,3767	0,0684
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,3950	
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	2	0,3290	0,0144
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	2	0,3125	0,0842
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	9	0,2995	0,0307
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO2-korr.	einschl. SO ₂ -Korrektur	5	0,2460	0,1154
ohne SO2-korr.	ohne SO ₂ -Korrektur	2	0,3720	0,0994
Rentschler mod	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	1	0,2830	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	20	0,3061	0,0653
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,3698	0,0940





5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	enzymat. autom.	0,248	-0,012	-0,67	
10	enzymat. autom.	0,270	0,010	0,56	
13	enzymat. autom.	0,300	0,040	2,22	
16	enzymat. autom.	0,200	-0,060	-3,33	
19	enzymat. autom.	0,280	0,020	1,11	
26	enzymat. autom.	0,260	0,000	0,00	
27	enzymat. autom.	0,247	-0,013	-0,73	
30	enzymat. autom.	0,340	0,080	4,44	
38	enzymat. autom.	0,250	-0,010	-0,56	
41	enzymat. autom.	0,280	0,020	1,11	
44	enzymat. autom.	0,260	0,000	0,00	
45	enzymat. autom.	0,330	0,070	3,89	
46	enzymat. autom.	0,260	0,000	0,00	
47	enzymat. autom.	0,210	-0,050	-2,78	
49	enzymat. autom.	0,280	0,020	1,11	
52	enzymat. autom.	0,300	0,040	2,22	
54	enzymat. autom.	0,290	0,030	1,67	
55	enzymat. autom.	0,234	-0,026	-1,44	
57	enzymat. autom.	0,260	0,000	0,00	
60	enzymat. autom.	0,300	0,040	2,22	
68	enzymat. autom.	0,240	-0,020	-1,11	
78	enzymat. autom.	0,240	-0,020	-1,11	
102	enzymat. autom.	0,27	0,010	0,56	

5.12.2 Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: enzymatisch, manuell und ¹H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,195	-0,034	-2,10	
02	HPLC	0,187	-0,042	-2,60	
06	HPLC	0,157	-0,072	-4,45	
23	HPLC	0,380	0,151	9,34	(*)
61	enzymat. Hand	0,185	-0,044	-2,72	
111	NMR	0,237	0,008	0,51	
112	NMR	0,248	0,019	1,17	
113	NMR	0,229	0,000	0,00	
114	NMR	0,228	-0,001	-0,08	
115	NMR	0,204	-0,025	-1,55	
116	NMR	0,231	0,002	0,12	
117	NMR	0,234	0,005	0,29	
221	FTIR	0,410	0,181	11,19	(*)
223	FTIR	0,315	0,086	5,32	(***)
241	FTIR	0,250	0,021	1,30	
258	FTIR	0,340	0,111	6,86	(***)
259	FTIR	0,270	0,041	2,54	
321	FTIR	0,355	0,126	7,79	(*)

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

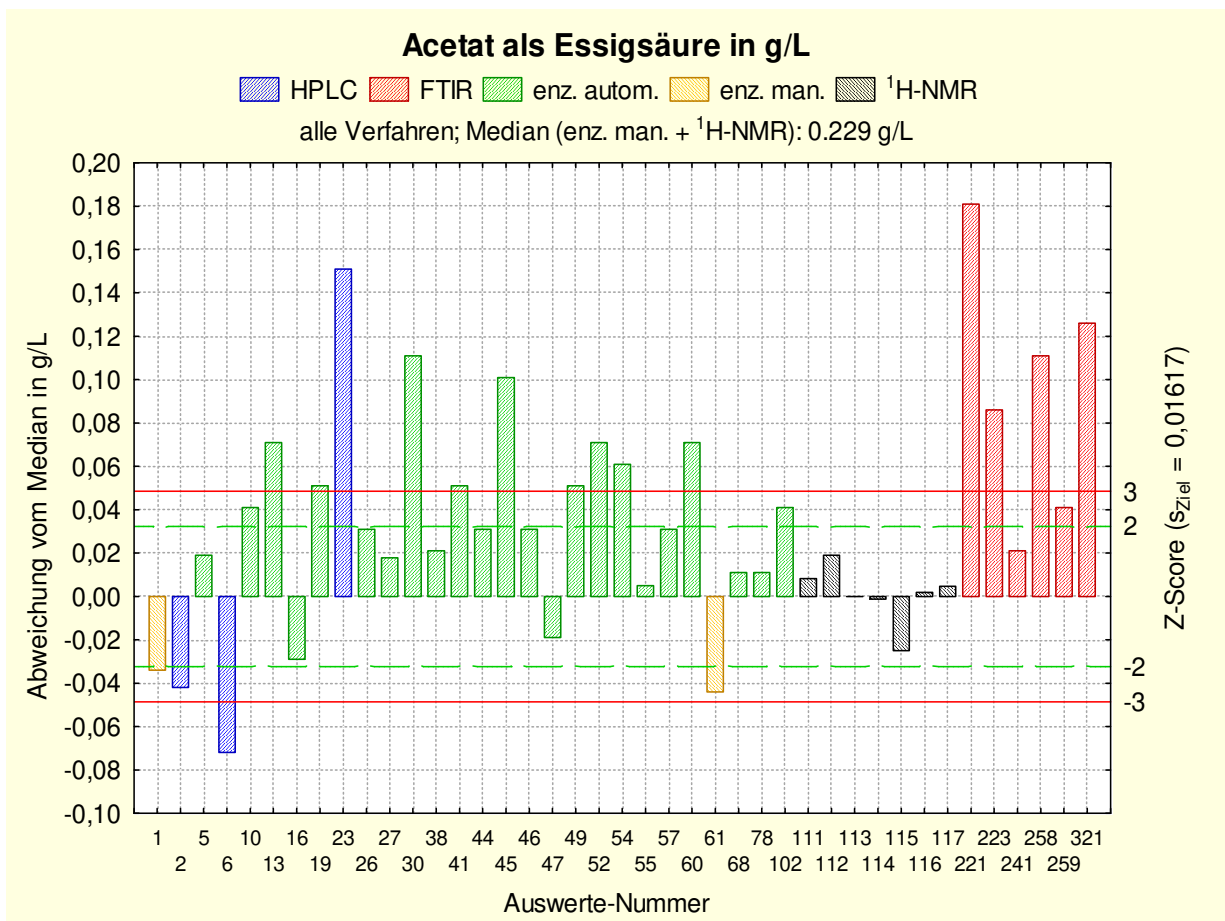
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der maßgeblichen Werte ab.

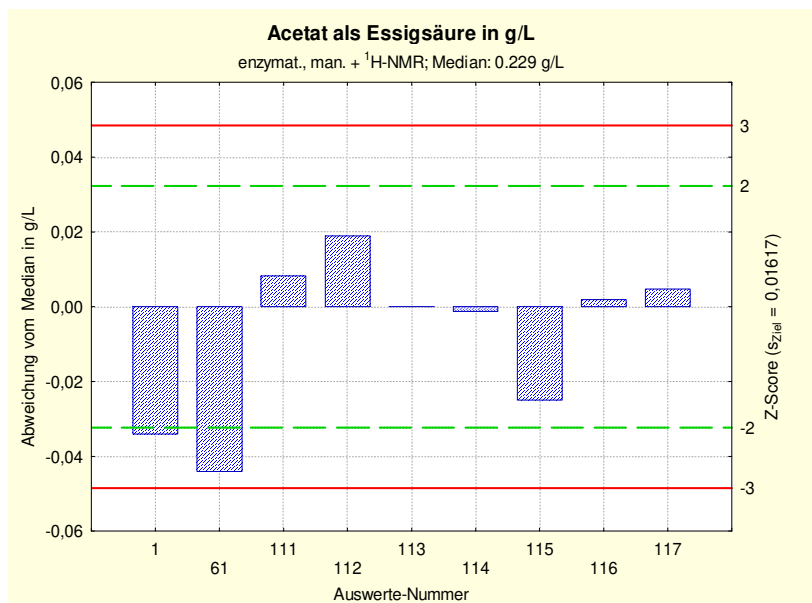
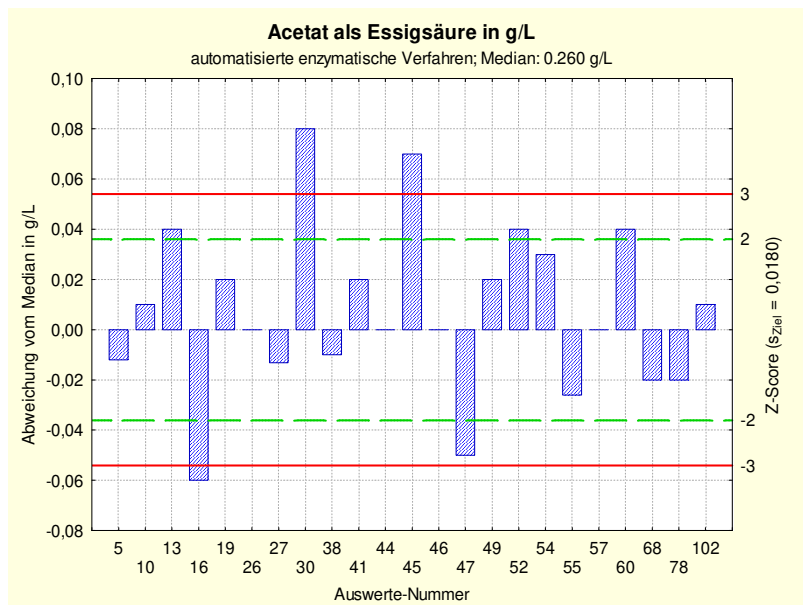
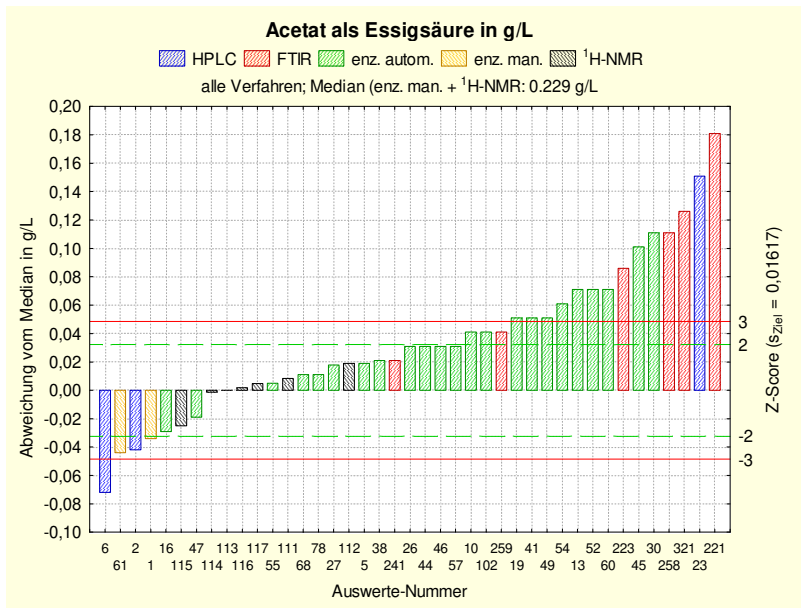
5.12.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	enz.man., ¹ H-NMR alle Daten
Gültige Werte	23	9
Minimalwert	0,200	0,185
Mittelwert	0,267	0,221
Median	0,260	0,229
Maximalwert	0,340	0,248
Standardabweichung (s _L)	0,034	0,021
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,007	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,018	0,016
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,88	1,32
Quotient (s _L /s _{exp herk.})		
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})		
Quotient (u _M /s _H)	0,39	0,44
Quotient (u _M /s _{exp herk.})		
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})		

5.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	23	0,2668	0,0316
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,2383	0,1314
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,1900	0,0080
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	7	0,2315	0,0116
	enzymat. manuell + ¹ H-NMR	8	0,2215	0,0234
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,3233	0,0663





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

5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,739	0,015	0,34	0,40	
02	HPLC	0,776	0,052	1,20	1,42	
06	HPLC	0,515	-0,209	-4,87	-5,77	(**)
07	enzymat. Hand	0,740	0,016	0,36	0,43	
22	HPLC	0,630	-0,094	-2,20	-2,60	
23	HPLC	0,680	-0,044	-1,03	-1,23	
39	HPLC	0,740	0,016	0,36	0,43	
61	enzymat. Hand	0,659	-0,065	-1,52	-1,80	
97	HPLC	0,710	-0,014	-0,34	-0,40	
111	NMR	0,738	0,013	0,31	0,36	
112	NMR	0,730	0,006	0,13	0,15	
113	NMR	0,695	-0,029	-0,69	-0,81	
114	NMR	0,654	-0,071	-1,65	-1,95	
115	NMR	0,650	-0,074	-1,73	-2,05	
116	NMR	0,720	-0,004	-0,10	-0,12	
117	NMR	0,665	-0,059	-1,38	-1,64	

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

5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,675	-0,025	-0,60	-0,70	
02	enz.(L-), autom.	0,685	-0,015	-0,36	-0,42	
03	enz.(L-), autom.	0,643	-0,057	-1,36	-1,60	
04	enz.(L-), autom.	0,710	0,010	0,24	0,28	
05	enz.(L-), autom.	0,683	-0,017	-0,41	-0,48	
07	enz.(L-) Hand	0,660	-0,040	-0,96	-1,12	
08	enz.(L-) Hand	0,637	-0,063	-1,51	-1,77	
09	enz.(L-), autom.	0,664	-0,036	-0,86	-1,01	
10	enz.(L-), autom.	0,700	0,000	0,00	0,00	
11	enz.(L-), autom.	0,785	0,085	2,03	2,38	
13	enz.(L-), autom.	0,740	0,040	0,96	1,12	
16	enz.(L-), autom.	0,700	0,000	0,00	0,00	
19	enz.(L-), autom.	0,700	0,000	0,00	0,00	
27	enz.(L-), autom.	0,600	-0,100	-2,39	-2,80	
30	enz.(L-), autom.	0,735	0,035	0,84	0,98	
38	enz.(L-), autom.	0,790	0,090	2,15	2,52	
40	enz.(L-), autom.	0,675	-0,025	-0,60	-0,70	
41	enz.(L-), autom.	0,770	0,070	1,68	1,96	
42	enz.(L-), autom.	0,760	0,060	1,44	1,68	
44	enz.(L-), autom.	0,770	0,070	1,68	1,96	
45	enz.(L-), autom.	0,770	0,070	1,68	1,96	
46	enz.(L-), autom.	0,810	0,110	2,63	3,08	
47	enz.(L-), autom.	0,700	0,000	0,00	0,00	
49	enz.(L-), autom.	0,730	0,030	0,72	0,84	
52	enz.(L-), autom.	0,300	-0,400	-9,57	-11,21	(*)
54	enz.(L-), autom.	0,600	-0,100	-2,39	-2,80	
55	enz.(L-), autom.	0,670	-0,030	-0,72	-0,84	
57	enz.(L-), autom.	0,660	-0,040	-0,96	-1,12	
60	enz.(L-), autom.	0,600	-0,100	-2,39	-2,80	
61	enz.(L-) Hand	0,638	-0,062	-1,49	-1,74	
63	enz.(L-) Hand	0,690	-0,010	-0,24	-0,28	
68	enz.(L-), autom.	0,700	0,000	0,00	0,00	
78	enz.(L-) Hand	0,640	-0,060	-1,44	-1,68	
102	enz.(L-), autom.	0,750	0,050	1,20	1,40	
109	enz.(L-), autom.	0,760	0,060	1,44	1,68	

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

5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,940	0,230	5,44	1,06	
202	FTIR	0,570	-0,140	-3,31	-0,64	
203	FTIR	0,760	0,050	1,18	0,23	
204	FTIR	0,630	-0,080	-1,89	-0,37	
205	FTIR	0,440	-0,270	-6,38	-1,24	
207	FTIR	0,300	-0,410	-9,70	-1,88	
208	FTIR	0,930	0,220	5,20	1,01	
209	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
210	FTIR	0,580	-0,130	-3,07	-0,60	
211	FTIR	0,390	-0,320	-7,57	-1,47	
212	FTIR	1,370	0,660	15,61	3,03	
213	FTIR	0,620	-0,090	-2,13	-0,41	
215	FTIR	1,600	0,890	21,05	4,08	
216	FTIR	0,790	0,080	1,89	0,37	
217	FTIR	1,020	0,310	7,33	1,42	
218	FTIR	0,680	-0,030	-0,71	-0,14	
219	FTIR	0,840	0,130	3,07	0,60	
220	FTIR	0,800	0,090	2,13	0,41	
221	FTIR	0,640	-0,070	-1,66	-0,32	
222	FTIR	0,590	-0,120	-2,84	-0,55	
223	FTIR	0,582	-0,128	-3,03	-0,59	
224	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
225	FTIR	0,500	-0,210	-4,97	-0,96	
226	FTIR	0,980	0,270	6,38	1,24	
227	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
228	FTIR	0,570	-0,140	-3,31	-0,64	
229	FTIR	1,070	0,360	8,51	1,65	
230	FTIR	0,140	-0,570	-13,48	-2,61	
232	FTIR	0,700	-0,010	-0,24	-0,05	
234	FTIR	0,920	0,210	4,97	0,96	
236	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
237	FTIR	0,800	0,090	2,13	0,41	
240	FTIR	0,700	-0,010	-0,24	-0,05	
241	FTIR	0,690	-0,020	-0,47	-0,09	
242	FTIR	0,820	0,110	2,60	0,50	
243	FTIR	0,900	0,190	4,49	0,87	
244	FTIR	0,480	-0,230	-5,44	-1,06	
245	FTIR	0,450	-0,260	-6,15	-1,19	
246	FTIR	0,100	-0,610	-14,42	-2,80	
248	FTIR	0,100	-0,610	-14,42	-2,80	
249	FTIR	0,390	-0,320	-7,57	-1,47	
250	FTIR	0,200	-0,510	-12,06	-2,34	
251	FTIR	0,500	-0,210	-4,97	-0,96	
253	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
254	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
255	FTIR	0,700	-0,010	-0,24	-0,05	
256	FTIR	0,090	-0,620	-14,66	-2,84	
257	FTIR	0,700	-0,010	-0,24	-0,05	
258	FTIR	0,400	-0,310	-7,33	-1,42	
259	FTIR	<= 0				
260	FTIR	0,500	-0,210	-4,97	-0,96	
263	FTIR	0,100	-0,610	-14,42	-2,80	
264	FTIR	1,620	0,910	21,52	4,17	
265	FTIR	0,810	0,100	2,36	0,46	
266	FTIR	0,650	-0,060	-1,42	-0,28	
267	FTIR	0,760	0,050	1,18	0,23	
268	FTIR	0,170	-0,540	-12,77	-2,48	
269	FTIR	1,140	0,430	10,17	1,97	
270	FTIR	1,060	0,350	8,28	1,61	
271	FTIR	0,630	-0,080	-1,89	-0,37	
273	FTIR	0,710	0,000	0,00	0,00	
274	FTIR	-0,140	-0,850	-20,10	-3,90	
275	FTIR	0,620	-0,090	-2,13	-0,41	
276	FTIR	0,500	-0,210	-4,97	-0,96	
277	FTIR	0,420	-0,290	-6,86	-1,33	
278	FTIR	0,500	-0,210	-4,97	-0,96	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

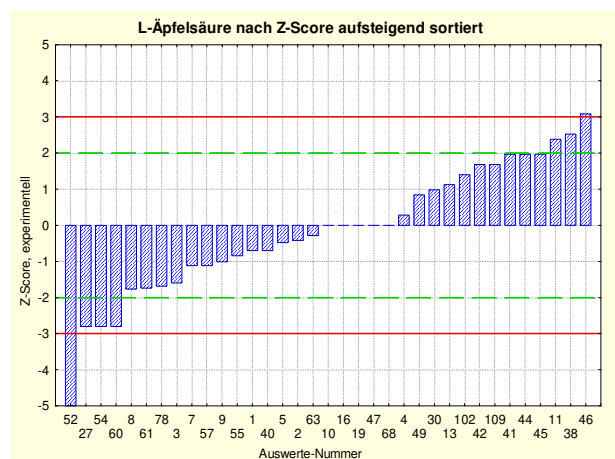
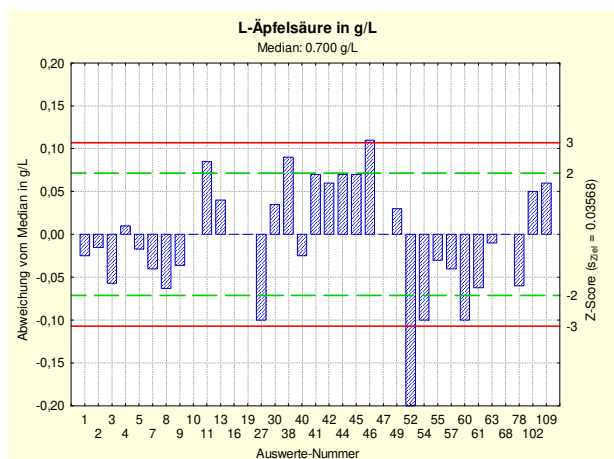
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	0,180	-0,530	-12,53	-2,43	
281	FTIR	<= 0				
282	FTIR	0,090	-0,620	-14,66	-2,84	
284	FTIR	1,100	0,390	9,22	1,79	
285	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
286	FTIR	0,580	-0,130	-3,07	-0,60	
287	FTIR	0,600	-0,110	-2,60	-0,50	
321	FTIR	0,200	-0,510	-12,06	-2,34	
328	FTIR	0,530	-0,180	-4,26	-0,83	
330	FTIR	0,700	-0,010	-0,24	-0,05	
337	FTIR	0,480	-0,230	-5,44	-1,06	

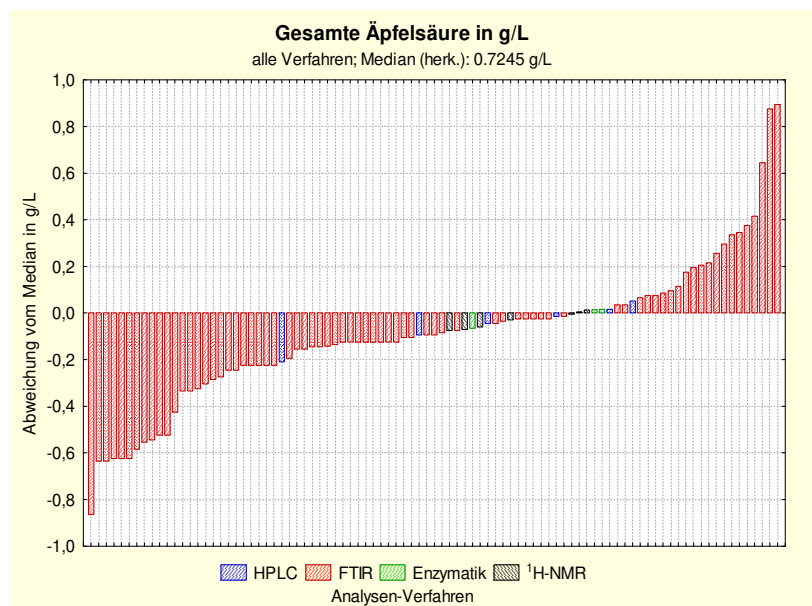
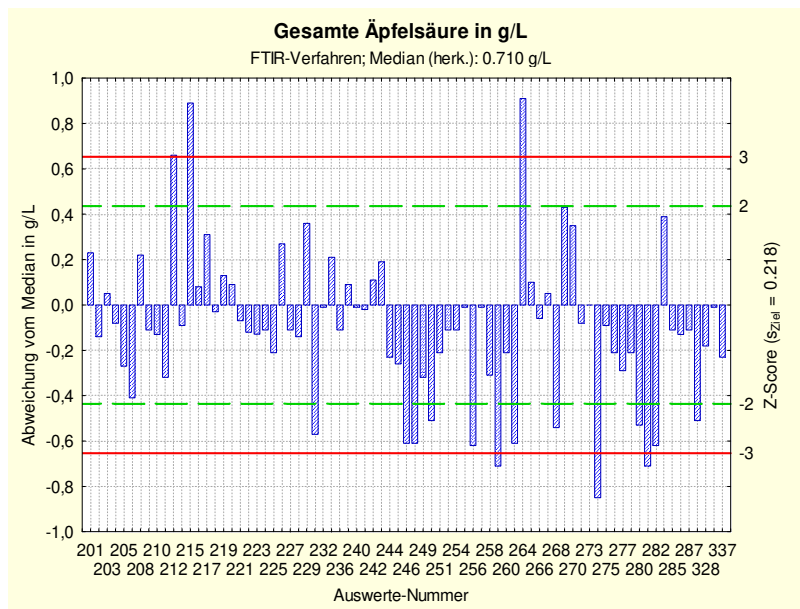
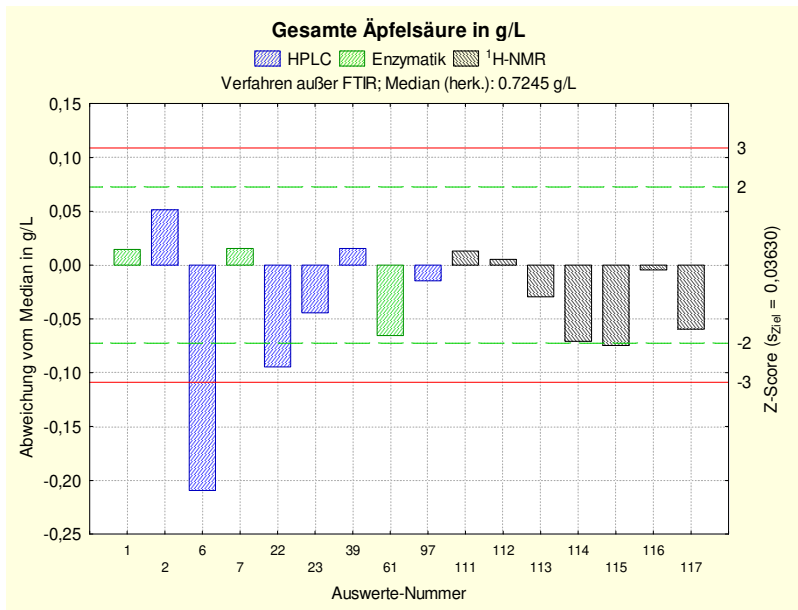
5.13.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure alle Daten	ber. Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	9	8	34
Minimalwert	0,52	0,63	0,60
Mittelwert	0,688	0,709	0,700
Median	0,710	0,724	0,700
Maximalwert	0,78	0,78	0,81
Standardabweichung (s _L)	0,079	0,049	0,057
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,026	0,017	0,010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,042	0,043	0,042
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,036	0,036	0,036
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218	0,218	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,88	1,14	1,37
Quotient (s _L /s _{exp})	2,21	1,35	1,60
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,36	0,22	
Quotient (u _M /s _H)	0,63	0,40	0,23
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,74	0,48	0,27
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,12	0,06	

5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	0,677	0,1024
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	3	0,713	0,0520
	Gesamte Äpfelsäure: herkömmliche Verfahren	9	0,700	0,0636
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,596	0,3050
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,693	0,0421
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	29	0,706	0,0667
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	6	0,656	0,0242
	L-Äpfelsäure: alle Verfahren	35	0,697	0,0651





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

5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	1,73	-0,215	-2,16	
02	HPLC	2,09	0,145	1,46	
04	enzymat. autom.	1,96	0,015	0,15	
05	enzymat. autom.	2,00	0,055	0,55	
06	HPLC	2,25	0,309	3,10	
07	enzymat. Hand	2,01	0,067	0,67	
08	enzymat. Hand	2,02	0,080	0,80	
09	enzymat. autom.	2,02	0,075	0,75	
11	enzymat. autom.	1,97	0,025	0,25	
19	enzymat. autom.	1,93	-0,015	-0,15	
22	HPLC	1,28	-0,665	-6,68	(**)
23	HPLC	1,90	-0,045	-0,45	
39	HPLC	1,93	-0,015	-0,15	
61	enzymat. Hand	1,85	-0,099	-0,99	
63	enzymat. Hand	1,93	-0,015	-0,15	
68	enzymat. autom.	1,91	-0,035	-0,35	
97	HPLC	1,88	-0,065	-0,65	
111	NMR	1,79	-0,157	-1,57	
112	NMR	1,95	0,005	0,05	
113	NMR	1,89	-0,055	-0,55	
114	NMR	1,84	-0,109	-1,09	
115	NMR	2,01	0,065	0,65	
116	NMR	1,82	-0,127	-1,28	

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

5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,73	0,044	0,50	0,47	
02	enz.(L-) autom.	1,66	-0,024	-0,27	-0,26	
03	enz.(L-) autom.	1,72	0,037	0,42	0,40	
04	enz.(L-) autom.	1,61	-0,076	-0,86	-0,82	
05	enz.(L-) autom.	1,67	-0,016	-0,18	-0,17	
07	enz.(L-) Hand	1,68	-0,004	-0,05	-0,04	
08	enz.(L-) Hand	1,69	0,008	0,09	0,09	
09	enz.(L-) autom.	1,74	0,054	0,61	0,58	
10	enz.(L-) autom.	1,77	0,084	0,95	0,91	
11	enz.(L-) autom.	1,64	-0,051	-0,58	-0,55	
13	enz.(L-) autom.	1,72	0,034	0,39	0,37	
16	enz.(L-) autom.	1,60	-0,086	-0,98	-0,93	
19	enz.(L-) autom.	1,61	-0,076	-0,86	-0,82	
27	enz.(L-) autom.	1,80	0,114	1,29	1,23	
30	enz.(L-) autom.	1,79	0,106	1,20	1,14	
38	enz.(L-) autom.	1,66	-0,026	-0,29	-0,28	
40	enz.(L-) autom.	1,61	-0,081	-0,92	-0,87	
41	enz.(L-) autom.	1,65	-0,036	-0,41	-0,39	
42	enz.(L-) autom.	1,91	0,224	2,54	2,41	
44	enz.(L-) autom.	1,74	0,054	0,61	0,58	
45	enz.(L-) autom.	1,76	0,074	0,84	0,80	
46	enz.(L-) autom.	1,84	0,154	1,75	1,66	
47	enz.(L-) autom.	1,60	-0,086	-0,98	-0,93	
49	enz.(L-) autom.	1,69	0,004	0,05	0,04	
54	enz.(L-) autom.	1,80	0,114	1,29	1,23	
55	enz.(L-) autom.	1,59	-0,101	-1,15	-1,09	
57	enz.(L-) autom.	1,58	-0,106	-1,20	-1,14	
60	enz.(L-) autom.	1,70	0,014	0,16	0,15	
61	enz.(L-) Hand	1,53	-0,155	-1,76	-1,67	
63	enz.(L-) Hand	1,64	-0,046	-0,52	-0,50	
68	enz.(L-) autom.	1,59	-0,096	-1,09	-1,03	
78	enz.(L-) Hand	1,68	-0,006	-0,07	-0,06	
102	enz.(L-) autom.	1,97	0,284	3,22	3,06	
109	enz.(L-) autom.	1,75	0,062	0,70	0,67	

5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,02	0,090	0,91	0,43	
202	FTIR	1,82	-0,108	-1,09	-0,52	
203	FTIR	1,84	-0,090	-0,91	-0,43	
204	FTIR	1,98	0,050	0,51	0,24	
205	FTIR	1,99	0,060	0,61	0,29	
207	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
208	FTIR	1,88	-0,050	-0,51	-0,24	
209	FTIR	1,50	-0,430	-4,35	-2,06	
210	FTIR	1,54	-0,390	-3,94	-1,87	
211	FTIR	1,76	-0,170	-1,72	-0,81	
212	FTIR	1,90	-0,030	-0,30	-0,14	
213	FTIR	1,68	-0,250	-2,53	-1,20	
215	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
216	FTIR	1,75	-0,180	-1,82	-0,86	
217	FTIR	1,52	-0,410	-4,15	-1,96	
218	FTIR	1,80	-0,130	-1,31	-0,62	
219	FTIR	2,06	0,130	1,31	0,62	
220	FTIR	1,60	-0,330	-3,34	-1,58	
221	FTIR	2,11	0,180	1,82	0,86	
222	FTIR	0,97	-0,960	-9,71	-4,59	
223	FTIR	2,15	0,224	2,27	1,07	
224	FTIR	1,80	-0,130	-1,31	-0,62	
225	FTIR	1,72	-0,210	-2,12	-1,00	
226	FTIR	1,62	-0,310	-3,13	-1,48	
227	FTIR	1,80	-0,130	-1,31	-0,62	
228	FTIR	1,78	-0,150	-1,52	-0,72	
229	FTIR	1,87	-0,060	-0,61	-0,29	
230	FTIR	2,01	0,080	0,81	0,38	
232	FTIR	1,82	-0,110	-1,11	-0,53	
234	FTIR	2,15	0,220	2,22	1,05	
236	FTIR	1,60	-0,330	-3,34	-1,58	
237	FTIR	1,49	-0,440	-4,45	-2,11	
240	FTIR	1,85	-0,080	-0,81	-0,38	
241	FTIR	1,73	-0,200	-2,02	-0,96	
242	FTIR	1,99	0,060	0,61	0,29	
243	FTIR	1,60	-0,330	-3,34	-1,58	
244	FTIR	1,56	-0,370	-3,74	-1,77	
245	FTIR	1,65	-0,280	-2,83	-1,34	
246	FTIR	1,40	-0,530	-5,36	-2,54	
248	FTIR	1,90	-0,030	-0,30	-0,14	
249	FTIR	1,26	-0,670	-6,78	-3,21	
250	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
251	FTIR	1,68	-0,250	-2,53	-1,20	
253	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
254	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
255	FTIR	1,76	-0,170	-1,72	-0,81	
256	FTIR	2,19	0,260	2,63	1,24	
257	FTIR	1,52	-0,410	-4,15	-1,96	
258	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
259	FTIR	1,20	-0,730	-7,38	-3,49	
260	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
263	FTIR	1,00	-0,930	-9,40	-4,45	
264	FTIR	2,11	0,180	1,82	0,86	
265	FTIR	1,38	-0,550	-5,56	-2,63	
266	FTIR	0,45	-1,480	-14,97	-7,08	(*)
267	FTIR	1,87	-0,060	-0,61	-0,29	
268	FTIR	1,36	-0,570	-5,76	-2,73	
269	FTIR	1,32	-0,610	-6,17	-2,92	
270	FTIR	1,97	0,040	0,40	0,19	
271	FTIR	1,80	-0,130	-1,31	-0,62	
273	FTIR	1,90	-0,030	-0,30	-0,14	
274	FTIR	1,57	-0,360	-3,64	-1,72	
275	FTIR	1,59	-0,340	-3,44	-1,63	
276	FTIR	1,50	-0,430	-4,35	-2,06	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

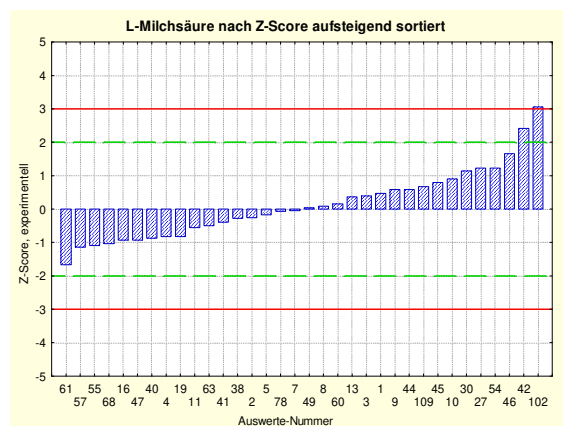
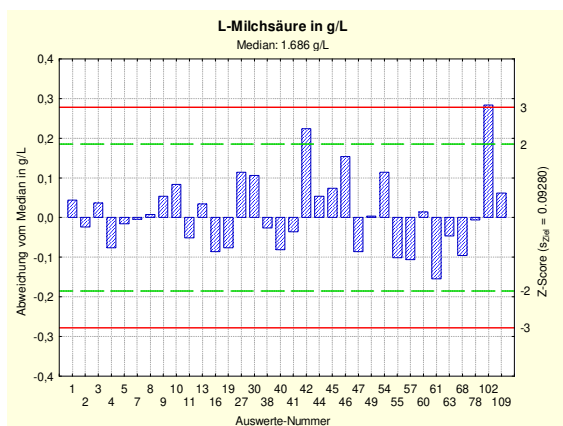
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	1,55	-0,380	-3,84	-1,82	
278	FTIR	2,10	0,170	1,72	0,81	
280	FTIR	1,83	-0,100	-1,01	-0,48	
281	FTIR	1,69	-0,240	-2,43	-1,15	
282	FTIR	1,87	-0,060	-0,61	-0,29	
284	FTIR	1,78	-0,150	-1,52	-0,72	
285	FTIR	1,60	-0,330	-3,34	-1,58	
286	FTIR	1,65	-0,280	-2,83	-1,34	
287	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
321	FTIR	1,70	-0,230	-2,33	-1,10	
328	FTIR	1,88	-0,050	-0,51	-0,24	
330	FTIR	1,80	-0,130	-1,31	-0,62	
337	FTIR	1,35	-0,580	-5,87	-2,78	

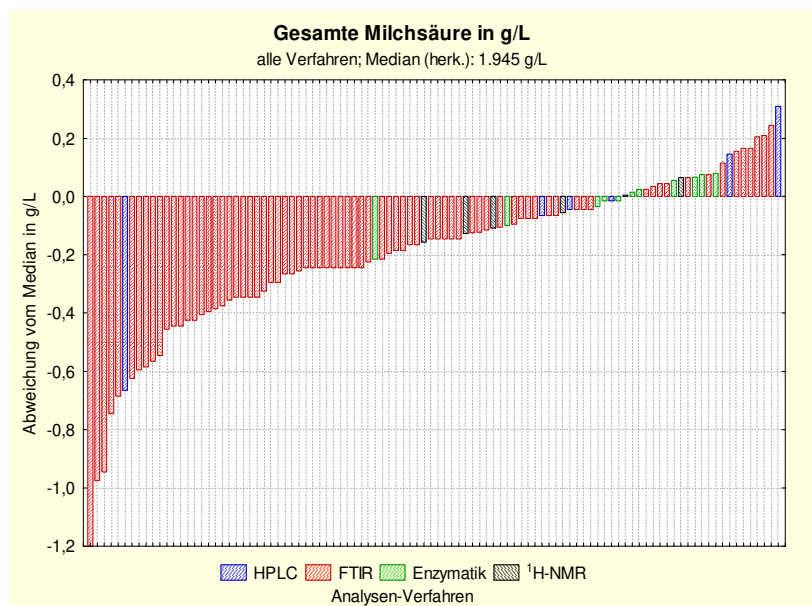
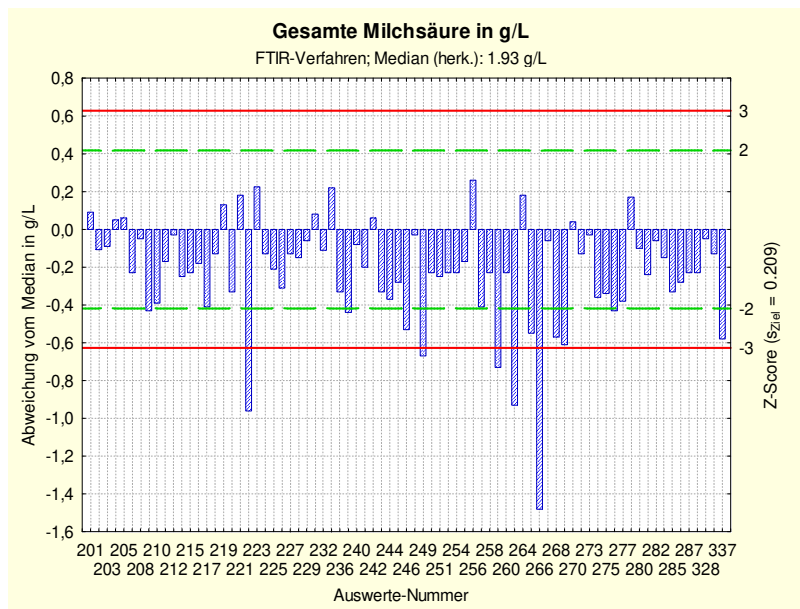
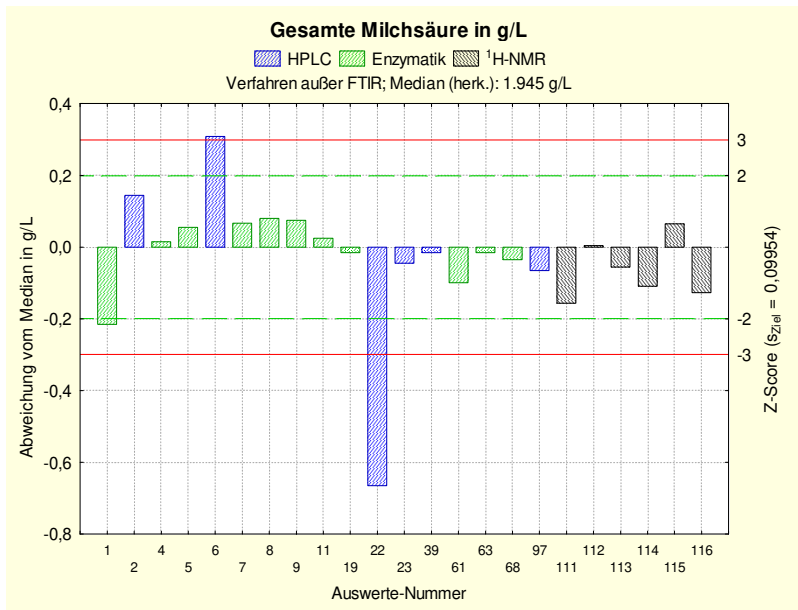
5.14.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in [g/L] für:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	17	16	34
Minimalwert	1,28	1,73	1,53
Mittelwert	1,922	1,962	1,698
Median	1,930	1,945	1,686
Maximalwert	2,25	2,25	1,97
Standardabweichung (s _L)	0,199	0,114	0,097
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,048	0,029	0,017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,099	0,100	0,088
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,093
Zielstandardabweichung, experimentell (S _{FTIR})	0,209	0,209	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,01	1,15	1,10
Quotient (s _L /s _{exp})			1,04
Quotient (s _L /S _{FTIR})	0,95	0,54	
Quotient (u _M /s _H)	0,49	0,33	0,19
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,18
Quotient (u _M /S _{FTIR})	0,23	0,14	

5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	6	1,924	0,269
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	1,965	0,047
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	5	1,911	0,134
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	17	1,946	0,101
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	1,724	0,235
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,880	0,092
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	28	1,699	0,0979
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	6	1,668	0,0590
	alle Verfahren L-Milchsäure	34	1,691	0,0908





5.15 Reduktone [mg/L]

5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	13,0	-3,00	-1,78	
10	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-4,00	-2,37	
18	Glyoxal/Stärke	20,0	4,00	2,37	
19	Glyoxal/potentiometr.	14,6	-1,40	-0,83	
21	Glyoxal/Stärke	19,0	3,00	1,78	
22	Glyoxal/potentiometr.	19,0	3,00	1,78	
23	Glyoxal/Stärke	14,0	-2,00	-1,19	
24	Glyoxal/Stärke	12,0	-4,00	-2,37	
26	Glyoxal/potentiometr.	16,0	0,00	0,00	
27	Glyoxal/potentiometr.	15,0	-1,00	-0,59	
30	Glyoxal/Stärke	16,0	0,00	0,00	
32	Propionaldehyd/Stärke	22,0	6,00	3,56	
34	Glyoxal/Stärke	11,0	-5,00	-2,96	
36	Glyoxal/Stärke	17,0	1,00	0,59	
37	Glyoxal/potentiometr.	13,5	-2,50	-1,48	
38	Glyoxal/Stärke	19,0	3,00	1,78	
39	Glyoxal/potentiometr.	17,4	1,40	0,83	
40	Glyoxal/Stärke	13,7	-2,33	-1,38	
41	Glyoxal/Stärke	18,0	2,00	1,19	
42	Glyoxal/Stärke	10,0	-6,00	-3,56	
43	Glyoxal/Stärke	10,0	-6,00	-3,56	
47	Glyoxal/Stärke	17,0	1,00	0,59	
49	Glyoxal/Stärke	16,0	0,00	0,00	
51	Propionaldehyd/Stärke	23,0	7,00	4,15	
55	Glyoxal/MTT	13,3	-2,70	-1,60	
57	Glyoxal/potentiometr.	16,0	0,00	0,00	
59	Glyoxal/potentiometr.	20,0	4,00	2,37	
60	Glyoxal/Stärke	13,0	-3,00	-1,78	
63	Glyoxal/Stärke	17,0	1,00	0,59	
64	Glyoxal/Stärke	16,0	0,00	0,00	
65	Glyoxal/potentiometr.	18,0	2,00	1,19	
66	Glyoxal/Stärke	17,0	1,00	0,59	
67	Glyoxal/potentiometr.	16,0	0,00	0,00	
68	Acetaldehyd/potent.	20,0	4,00	2,37	
70	Glyoxal/potentiometr.	22,0	6,00	3,56	
72	Glyoxal/Stärke	16,5	0,50	0,30	
73	Glyoxal/Stärke	7,0	-9,00	-5,34	(*)
75	Glyoxal/Stärke	18,0	2,00	1,19	
76	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-5,00	-2,96	
78	Acetaldehyd/Stärke	23,0	7,00	4,15	
83	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-4,00	-2,37	
84	Glyoxal/potentiometr.	18,0	2,00	1,19	
86	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-4,00	-2,37	
96	Glyoxal/potentiometr.	20,0	4,00	2,37	
103	Propionaldehyd/Stärke	25,0	9,00	5,34	(*)
108	Glyoxal/potentiometr.	2	-14,00	-8,30	(*)

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

Anmerkung:

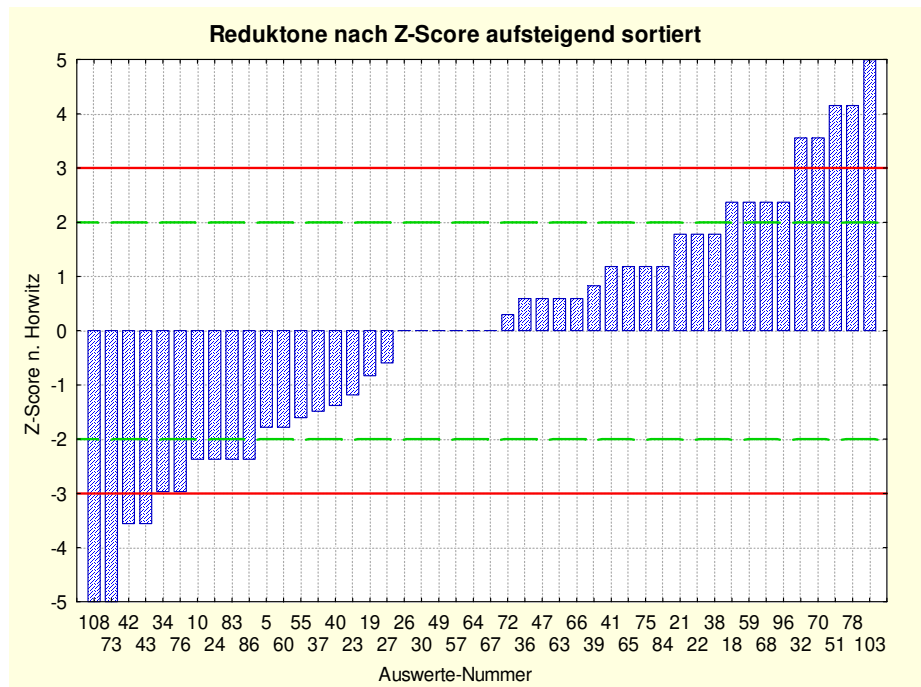
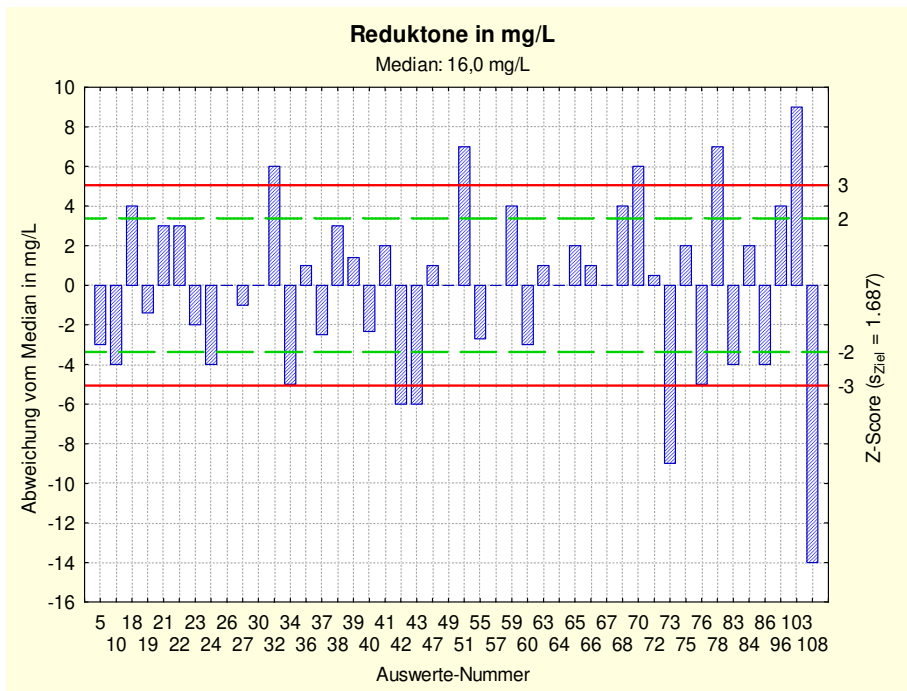
Da der Quotient s_L/s_H über 2,0 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Bewertung der Laborleistung dar und werden deshalb in grauer Schriftfarbe dargestellt.

5.15.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	23,00	
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	16,50	5,613
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	23,33	1,732
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	21	15,27	3,570
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	18	15,66	3,881
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	13,30	
	alle Verfahren	46	16,03	4,184

5.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	43
Minimalwert	10,0
Mittelwert	16,21
Median	16,00
Maximalwert	23,0
Standardabweichung (sL)	3,489
Standardfehler des Mittelwertes	0,532
Zielstandardabweichung n. Horwitz (sH)	1,687
Zielstandardabweichung, experimentell (sexp)	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,07
Quotient (s _L /s _{exp})	
Quotient (u _M /s _H)	0,32
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	



5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.2	53,0	6,70	1,61	
02	LwK 6.2	46,5	0,20	0,05	
04	LwK 6.3	48,0	1,70	0,41	
05	LwK 6.2	39,8	-6,50	-1,56	
06	LwK 6.2	48,6	2,34	0,56	
09	LwK 6.2	46,6	0,30	0,07	
11	LwK 6.2	42,0	-4,35	-1,05	
13	LwK 6.3	46,0	-0,30	-0,07	
28	LwK 6.2	44,9	-1,40	-0,34	
41	LwK 6.3	48,0	1,70	0,41	
44	LwK 6.3	43,0	-3,30	-0,79	
45	LwK 6.3	54,0	7,70	1,85	
46	LwK 6.3	42,0	-4,30	-1,03	
47	LwK 6.3	52,0	5,70	1,37	
52	LwK 6.3	48,0	1,70	0,41	
54	LwK 6.4	43,0	-3,30	-0,79	
55	LwK 6.4	45,2	-1,10	-0,26	
60	LwK 6.3	45,0	-1,30	-0,31	
61	LwK 6.2	49,6	3,30	0,79	
94	LwK 6.3	46,3	0,00	0,00	
105	LwK 6.2	45,2	-1,10	-0,26	
202	LwK 6.5	56,3	10,00	2,40	
205	LwK 6.5	36,0	-10,30	-2,48	
206	LwK 6.5	53,7	7,40	1,78	
208	LwK 6.5	43,8	-2,50	-0,60	
210	LwK 6.5	40,0	-6,30	-1,51	
211	LwK 6.5	43,0	-3,35	-0,81	
213	LwK 6.5	48,0	1,70	0,41	
219	LwK 6.5	39,0	-7,30	-1,76	
220	LwK 6.5	45,0	-1,30	-0,31	
225	LwK 6.5	48,0	1,70	0,41	
237	LwK 6.5	36,0	-10,30	-2,48	
243	LwK 6.5	47,0	0,70	0,17	
248	LwK 6.5	45,0	-1,30	-0,31	
250	LwK 6.5	39,0	-7,30	-1,76	
251	LwK 6.5	41,0	-5,30	-1,27	
257	LwK 6.5	48,8	2,50	0,60	
261	LwK 6.5	55,8	9,51	2,29	
262	LwK 6.5	40,5	-5,80	-1,39	
263	LwK 6.5	46,0	-0,30	-0,07	
264	LwK 6.5	53,0	6,70	1,61	
265	LwK 6.5	36,0	-10,30	-2,48	
277	LwK 6.5	47,0	0,70	0,17	
278	LwK 6.5	45,0	-1,30	-0,31	
279	LwK 6.5	42,0	-4,30	-1,03	
280	LwK 6.5	45,0	-1,30	-0,31	
287	LwK 6.5	48,0	1,70	0,41	
328	LwK 6.5	46,4	0,14	0,03	
330	LwK 6.5	32,0	-14,30	-3,44	
337	LwK 6.5	36,0	-10,30	-2,48	

5.16.2 Laborergebnisse, (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
10	Redox incl.	62,0	2,00	0,39	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-4,00	-0,77	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	1,00	0,19	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	0,00	0,00	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	1,00	0,19	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	-1,00	-0,19	
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	0,00	0,00	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	57,0	-3,00	-0,58	
37	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-4,00	-0,77	
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	1,00	0,19	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,3	1,33	0,26	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	-1,00	-0,19	
49	LwK 6.1 (incl.Red.)	64,0	4,00	0,77	
51	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	5,00	0,96	
57	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	1,00	0,19	
59	Redox incl.	65,0	5,00	0,96	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	0,00	0,00	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-2,00	-0,39	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	-9,00	-1,74	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	57,4	-2,60	-0,50	
73	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	-11,00	-2,12	
76	Redox incl.	47,0	-13,00	-2,51	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	67,0	7,00	1,35	
79	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-2,00	-0,39	
83	Redox incl.	52,0	-8,00	-1,54	
84	Redox incl.	62,0	2,00	0,39	
86	Redox incl.	58,0	-2,00	-0,39	

5.16.3 Laborergebnisse, (jodometrische Verfahren exclusive 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.)	44,8	0,80	0,20	0,15	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	44,0	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,6	-0,40	-0,10	-0,08	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	51,0	7,00	1,76	1,35	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,0	-4,00	-1,00	-0,77	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,6	-2,40	-0,60	-0,46	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	1,00	0,25	0,19	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	49,0	5,00	1,26	0,96	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	-1,00	-0,25	-0,19	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	64,0	20,00	5,02	3,86	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	48,0	4,00	1,00	0,77	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	-1,00	-0,25	-0,19	
96	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	-3,00	-0,75	-0,58	
103	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	-5,00	-1,26	-0,96	
108	LwK 6.1 (excl.Red.)	53,0	9,00	2,26	1,74	

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

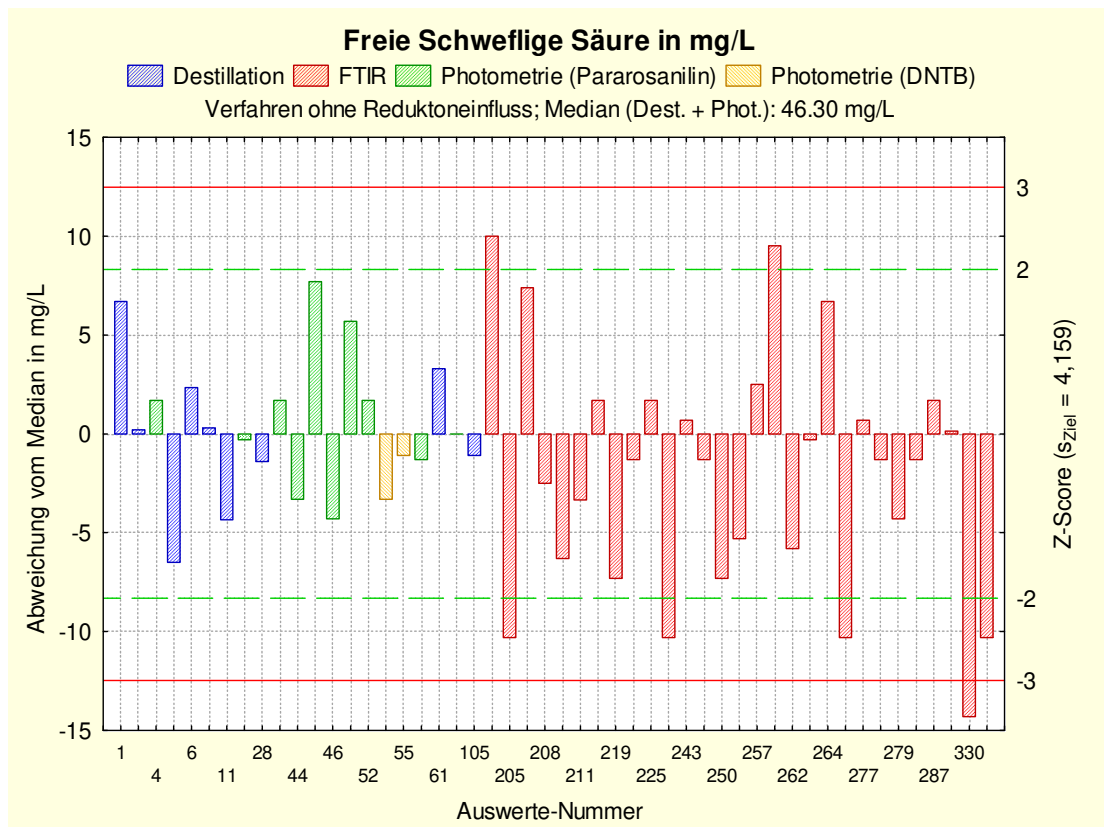
5.16.4 Deskriptive Ergebnisse

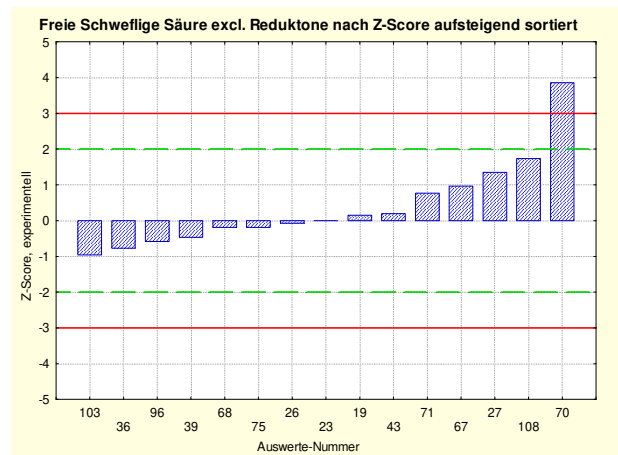
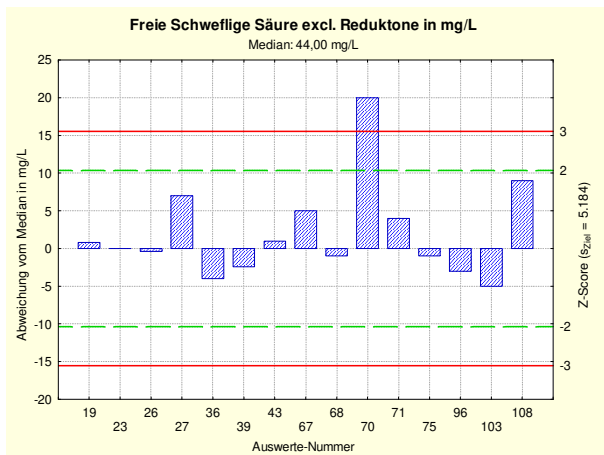
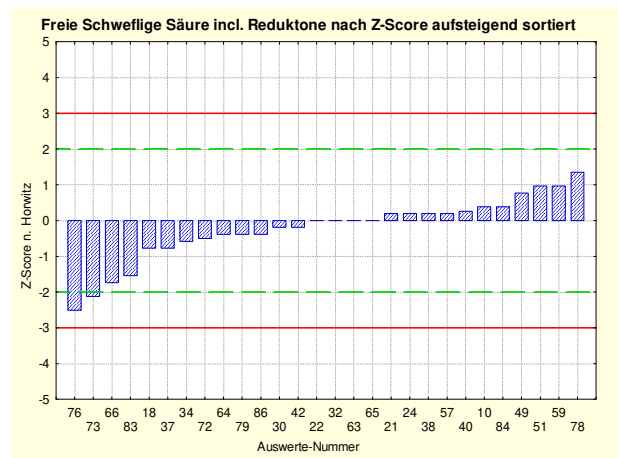
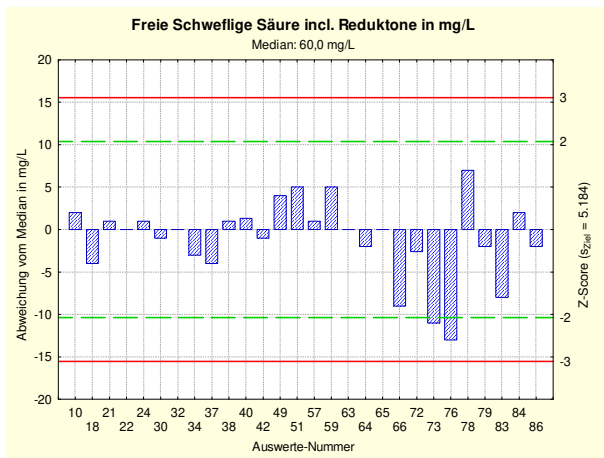
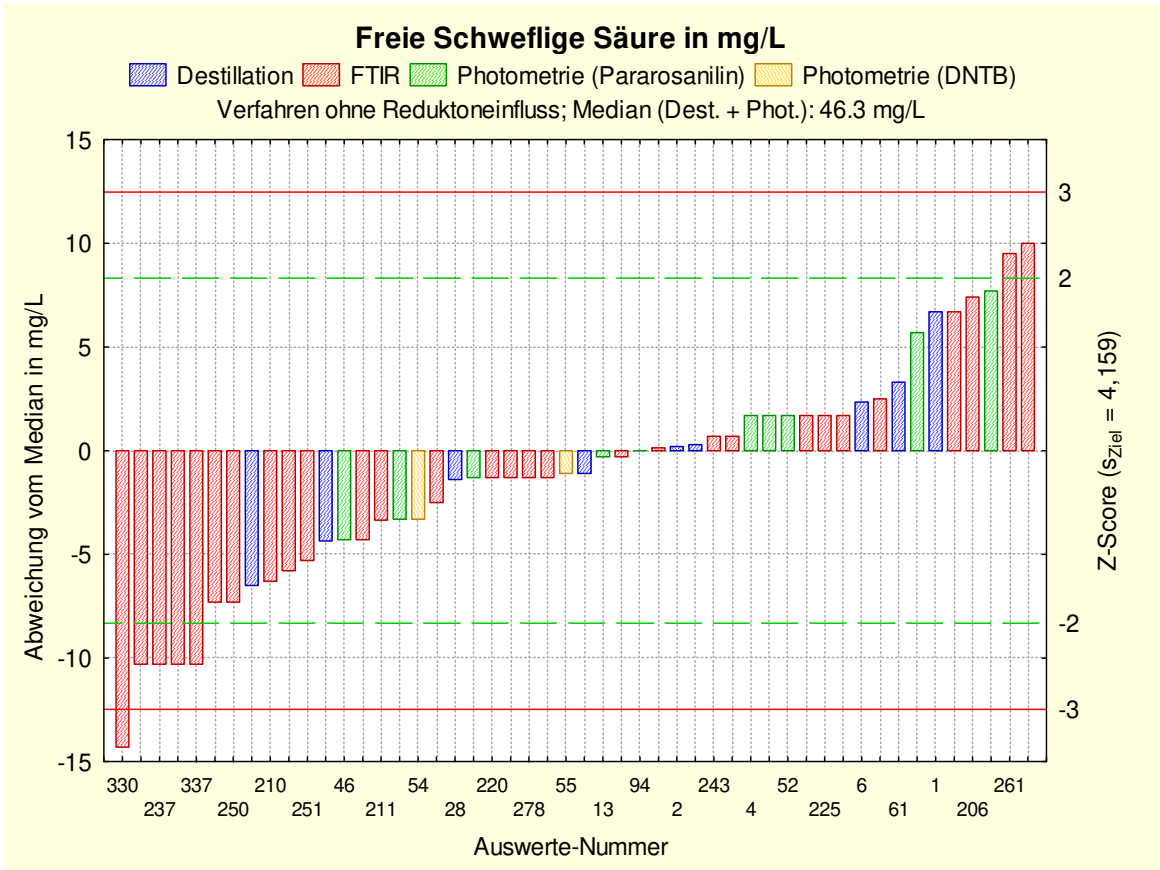
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie alle Daten	jodometrisch incl. Reduktone alle Daten	jodometrisch excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	21	28	15
Minimalwert	39,8	47,0	39,0
Mittelwert	46,51	58,85	46,00
Median	46,30	60,00	44,00
Maximalwert	54,0	67,0	64,0
Standardabweichung (s _L)	3,664	4,668	6,384
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,800	0,882	1,648
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	4,159	5,184	3,983
- n. Horwitz incl. Reduktone ^{*)} (s _H incl. Red.)			5,184
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,88	0,90	1,60
Quotient (s _L /s _{exp})			1,23
Quotient (u _M /s _H)	0,19	0,17	0,41
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,32

s_H incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone

5.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox incl.	Jodometrische Bestimmung mit ph-Meter mV-Modus und Redoxelektrode, incl. Reduktone	6	57,81	7,55
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - ohne Abzug der Reduktone	22	59,46	3,07
	jodometrische Verfahren inklusive Reduktone	28	59,29	3,95
LwK 6.1 excl.Red.	- mit Abzug der Reduktone	15	45,21	5,04
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	46,24	4,46
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	10	47,13	3,62
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	2	44,10	1,76
	Destillations- und photometrische Verfahren	21	46,45	3,59
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	29	44,22	6,29





5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

5.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	89,5	6,00	0,87	1,12	
02	LwK 7.3	88,3	4,80	0,70	0,90	
04	LwK 7.7	86,0	2,50	0,36	0,47	
05	LwK 7.3	83,4	-0,10	-0,01	-0,02	
06	LwK 7.3	84,8	1,30	0,19	0,24	
07	LwK 7.4.2	83,0	-0,50	-0,07	-0,09	
09	LwK 7.3	83,4	-0,10	-0,01	-0,02	
10	LwK 7.4.2	83,0	-0,50	-0,07	-0,09	
11	LwK 7.3	85,0	1,50	0,22	0,28	
13	LwK 7.4.1	89,0	5,50	0,80	1,03	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	14,50	2,11	2,71	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,5	6,00	0,87	1,12	
21	LwK 7.4.2	88,0	4,50	0,66	0,84	
22	LwK 7.3	112,0	28,50	4,15	5,32	(**)
23	LwK 7.4.2m	72,0	-11,50	-1,68	-2,15	
24	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,0	7,50	1,09	1,40	
26	LwK 7.4.2	80,0	-3,50	-0,51	-0,65	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	7,50	1,09	1,40	
28	LwK 7.3	86,4	2,90	0,42	0,54	
30	LwK 7.4.1	84,0	0,50	0,07	0,09	
32	LwK 7.5.1(incl. Red.)	100,0	16,50	2,40	3,08	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	95,0	11,50	1,68	2,15	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	12,50	1,82	2,33	
37	LwK 7.4.1	76,0	-7,50	-1,09	-1,40	
38	LwK 7.7	81,0	-2,50	-0,36	-0,47	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	6,50	0,95	1,21	
40	LwK 7.4.1	84,0	0,50	0,07	0,09	
41	LwK 7.6	89,0	5,50	0,80	1,03	
42	LwK 7.4.2	87,0	3,50	0,51	0,65	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	16,50	2,40	3,08	
44	LwK 7.4.1	82,0	-1,50	-0,22	-0,28	
45	LwK 7.7	95,0	11,50	1,68	2,15	
46	LwK 7.7	84,0	0,50	0,07	0,09	
47	LwK 7.4.2	88,0	4,50	0,66	0,84	
49	LwK 7.4.2	84,0	0,50	0,07	0,09	
51	LwK 7.5.2(incl. Red.)	94,0	10,50	1,53	1,96	
52	LwK 7.7	84,0	0,50	0,07	0,09	
54	LwK 7.7	84,0	0,50	0,07	0,09	
55	LwK 7.7	85,3	1,80	0,26	0,34	
57	LwK 7.4.2	81,0	-2,50	-0,36	-0,47	
59	LwK 7.5.2(incl. Red.)	110,0	26,50	3,86	4,95	
60	LwK 7.3	75,0	-8,50	-1,24	-1,59	
61	LwK 7.3	83,6	0,10	0,01	0,02	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	14,50	2,11	2,71	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	91,0	7,50	1,09	1,40	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,0	18,50	2,70	3,45	
66	LwK 7.4.2	96,0	12,50	1,82	2,33	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	95,0	11,50	1,68	2,15	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	14,50	2,11	2,71	
70	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	25,50	3,72	4,76	
71	LwK 7.6	78,0	-5,50	-0,80	-1,03	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,7	0,20	0,03	0,04	
73	LwK 7.5.3(incl. Red.)	89,0	5,50	0,80	1,03	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	96,0	12,50	1,82	2,33	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	100,0	16,50	2,40	3,08	
78	LwK 7.4.1	81,0	-2,50	-0,36	-0,47	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	110,0	26,50	3,86	4,95	
83	Redox incl.	94,0	10,50	1,53	1,96	
84	LwK 7.5.1(incl. Red.)	95,0	11,50	1,68	2,15	
90	LwK 7.4.2	80,0	-3,50	-0,51	-0,65	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
94	LwK 7.6	76,0	-7,50	-1,09	-1,40	
95	LwK 7.4.2	81,7	-1,80	-0,26	-0,34	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	5,50	0,80	1,03	
97	LwK 7.3	86,1	2,60	0,38	0,49	
98	LwK 7.4.2	70,0	-13,50	-1,97	-2,52	
99	LwK 7.4.2	80,0	-3,50	-0,51	-0,65	
101	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	6,50	0,95	1,21	
103	LwK 7.5.1(excl. Red.)	84,0	0,50	0,07	0,09	
105	LwK 7.3	86,2	2,70	0,39	0,50	
107	LwK 7.4.2	80,0	-3,50	-0,51	-0,65	
202	LwK 7.8	80,4	-3,10	-0,45	-0,58	
205	LwK 7.8	91,0	7,50	1,09	1,40	
206	LwK 7.8	88,3	4,80	0,70	0,90	
207	LwK 7.8	49,0	-34,50	-5,03	-6,44	(***)
208	LwK 7.8	90,7	7,20	1,05	1,34	
210	LwK 7.8	92,0	8,50	1,24	1,59	
211	LwK 7.8	94,6	11,11	1,62	2,07	
213	LwK 7.8	98,0	14,50	2,11	2,71	
219	LwK 7.8	83,0	-0,50	-0,07	-0,09	
220	LwK 7.8	92,0	8,50	1,24	1,59	
225	LwK 7.8	87,0	3,50	0,51	0,65	
237	LwK 7.8	104,0	20,50	2,99	3,83	
243	LwK 7.8	88,0	4,50	0,66	0,84	
248	LwK 7.8	81,0	-2,50	-0,36	-0,47	
250	LwK 7.8	85,0	1,50	0,22	0,28	
251	LwK 7.8	87,0	3,50	0,51	0,65	
257	LwK 7.8	96,0	12,50	1,82	2,33	
261	LwK 7.8	79,0	-4,53	-0,66	-0,85	
262	LwK 7.8	90,0	6,50	0,95	1,21	
263	LwK 7.8	94,0	10,50	1,53	1,96	
264	LwK 7.8	79,0	-4,50	-0,66	-0,84	
265	LwK 7.8	76,0	-7,50	-1,09	-1,40	
277	LwK 7.8	73,0	-10,50	-1,53	-1,96	
278	LwK 7.8	97,0	13,50	1,97	2,52	
279	LwK 7.8	103,0	19,50	2,84	3,64	
280	LwK 7.8	84,0	0,50	0,07	0,09	
287	LwK 7.8	86,0	2,50	0,36	0,47	
328	LwK 7.8	78,3	-5,24	-0,76	-0,98	
330	LwK 7.8	73,0	-10,50	-1,53	-1,96	
337	LwK 7.8	104,0	20,50	2,99	3,83	

(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab. Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren (LwK 7.8) sind die $Z\text{-Score}_{\text{Horwitz}}$ gültig. Die $Z\text{-Score}_{\text{exper.}}$ in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

5.17.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	33	32
Minimalwert	70,0	70,0
Mittelwert	84,04	83,17
Median	83,60	83,50
Maximalwert	112,0	96,0
Standardabweichung (s_L)	7,156	5,182
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,246	0,916
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	6,871	6,864
Zielstandardabweichung experimentell (s_{exp})	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,04	0,75
Quotient ($s_L/s_{\text{exp herk.}}$)	1,34	0,97
Quotient (u_M/s_H)	0,18	0,13
Quotient ($u_M/s_{\text{exp herk.}}$)	0,23	0,17

5.17.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	12	85,67	3,07
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	82,63	4,46
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	82,90	4,23
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	72,00	
	alle Destillationsverfahren	33	83,66	4,51
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch ohne Reduktionabzug	12	96,53	5,71
	nach einfacher Hydrolyse			
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	nach doppelter Hydrolyse	2	102,00	12,83
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	j mit Hydrolyse nach Rebelein	3	95,85	11,55
Redox incl.	mit ph-Meter im mV-Modus und Redoxelektrode	1	94,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktionabzug	18	96,86	7,69
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktionabzug	8	91,97	5,68
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	95,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktionabzug	9	92,49	5,75
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	3	80,32	6,63
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	84,72	2,63
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	30	87,43	9,98

