



MASTERARBEIT | MASTER'S THESIS

Titel | Title

Etablierung strukturierter Entscheidungsprozesse zur validen
Identifizierung und Differenzierung von TCM-Extraktgranulaten

verfasst von | submitted by
Paul Lukas Ebert BSc

angestrebter akademischer Grad | in partial fulfilment of the requirements for the degree of
Magister pharmaciae (Mag. pharm.)

Wien | Vienna, 2026

Studienkennzahl lt. Studienblatt | Degree
programme code as it appears on the
student record sheet:

UA 066 605

Studienrichtung lt. Studienblatt | Degree
programme as it appears on the student
record sheet:

Masterstudium Pharmazie

Betreut von | Supervisor:

Univ.-Prof. Mag. Dr. Judith Maria Rollinger

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung	1
1. Abstract.....	2
2. Zielsetzung	3
2.1 Behandelte Problemstellung.....	3
2.2 Ziel dieser Arbeit.....	3
2.3 Aufstellen relevanter Hypothesen.....	3
3. Einleitung	4
3.1 Allgemeine Einführung in das Thema	4
3.2 Relevanz der Granulat-Identifikation.....	4
3.3 Bisherige nasschemische Methodik und zusätzliche spezifische Anforderungen	5
3.4 Gründe für einen algorithmischen Ansatz	6
4. Spezieller Teil: Methodische Vorgehensweise und Ergebnisse	7
4.1 Übernahme und Durchführung der nasschemischen Standard-Testreihe	7
4.2 Qualität der erhobenen Rohdaten.....	9
4.3 Standardisierung der Testbewertung	10
4.4 Bewertungshilfen: Blindproben und Positivbeispiele.....	11
4.4.1 Durchführung der Blindproben.....	11
4.4.2 Qualität der Blindproben	13
4.5 Auswertung der gesammelten Testergebnisse	14
4.6 Theoretische Grundlagen des Entscheidungsbaumes (ID3).....	16
4.7 Algorithmische Strukturierung der Auswertung.....	18
4.7.1 Vorstrukturierung anhand optischer Kriterien	18
4.7.2 Anwendung des ID3-Algorithmus	20
4.8 Ergebnisse des Entscheidungsbaumes.....	22
4.9 Mineralische Granulate, zusätzliche Unterscheidung.....	23

5. Diskussion, Schlussfolgerung und Ausblick	26
5.1 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse	26
5.2 Bewertung der Ergebnisse und Resümee	27
5.3 Beantwortung der aufgestellten Hypothesen.....	28
5.4 Mögliche Begründung kontroverser Ergebnisse	29
5.5 Offene Fragen	31
5.6 Vorschläge für weitere Optimierungen.....	33
6. Experimenteller Teil: Materialien und Methoden	35
6.1 Verwendetes Probenmaterial	35
6.2 Verwendete Geräte und Software	36
6.3 Verwendete Reagenzien, Reinsubstanzen und Lösungsmittel	36
6.3.1 Reagenzien und Lösungsmittel der Standardarbeitsanweisungen	36
6.3.2 Reinsubstanzen und Lösungsmittel der Blindproben	37
6.4 Verwendete Methoden	37
6.4.1 Standardarbeitsanweisung der nasschemischen Testreihe 1-12.....	37
6.4.2 Standardarbeitsanweisung der mineralischen Testreihe 13-18.....	40
6.4.3 Aufbau der Tageslicht-Fotoapparatur	41
Literaturverzeichnis	42
Abbildungsverzeichnis	43
Anhang	44

Danksagung

Die Erstellung dieser Masterarbeit bot mir die Gelegenheit, mich sowohl wissenschaftlich als auch persönlich weiterzuentwickeln. Umso mehr möchte ich jene Menschen hervorheben, die mich auf dem Weg begleitet und unterstützt haben.

Ganz besonderer Dank gilt meiner Betreuerin der Universität Wien, Univ.-Prof. Mag. Dr. Judith M. Rollinger, die mir von Anfang an einen besonderen Vertrauensvorschuss zugestand, mich bei der Koordination universitärer Termine unterstützte und mich mit Rat und Feedback bis zum Abschluss dieser Arbeit stets aktiv begleitete. Es ist mir eine Ehre, in der Abteilung der Pharmakognosie des Departments für pharmazeutische Wissenschaften betreut worden zu sein, und ich bedanke mich hier besonders bei Univ.-Prof. Mag. Dr. Sabine Glasl-Tazreiter, aber auch ganz generell bei den großartigen Kollegen des Departments, für die Tipps und Inputs, die mir auf meinem Weg mitgegeben wurden.

Zu großem Dank verpflichtet fühle ich mich Mag. Mag. Erich Stöger und seiner Frau Yawen. Sie haben mich zu diesem fantastischen Projekt gebracht, mich in Göming aufgenommen und wie ein Familienmitglied beherbergt. Danke auch an Mag. Matthias Burschowsky für die Projekt- und Laborleitung vor Ort und besonders für die Unterstützung bei der Bewältigung anspruchsvoller Projektabschnitte. Dem gesamten Team der Plantasia GmbH danke ich für die herzliche Aufnahme und die außergewöhnlich angenehme gemeinsame Zeit.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Catherina Duftschmid, B.Sc. Als Projektpartnerin begleitete sie diese Arbeit mit kritischen Gedanken, fachlichen Diskussionen und gemeinsamer Lösungsfindung. In herausfordernden Zeiten half sie mir, meine Gedanken zu ordnen und das Wesentliche nicht aus den Augen zu verlieren. Ihr Rückhalt und ihre Unterstützung gingen weit über dieses gemeinsame Projekt hinaus und haben dazu beigetragen, dass diese Arbeit in der vorliegenden Form entstehen konnte.

Mein Dank gilt außerdem meiner Familie, meinen Freunden und meinen Arbeitskollegen. Sie haben mich während meines Studiums stets begleitet und Verständnis für die Herausforderungen dieser Zeit gezeigt. Zu wissen, jederzeit auf sie zählen zu können, war für mich von unschätzbarem Wert.

Abkürzungsverzeichnis

CART	Classification and Regression Trees
CR2 (-Datei)	“Canon Raw 2”(-Datei)
GF	Granulatfarbe
ID3	Iterative Dichotomiser 3
IG	Informationsgewinn, Information Gain
LF	Lösungsfarbe
praep.	praeparatum
SL	Stammlösung
SOP	Standardarbeitsanweisung, Standard Operating Procedure
TCM	Traditionelle Chinesische Medizin

Hinweis zur sprachlichen Gleichbehandlung:

Aus Gründen der besseren Lesbarkeit wird in der vorliegenden Arbeit durchgehend das generische Maskulinum verwendet. Sämtliche Personenbezeichnungen beziehen sich dabei gleichermaßen auf alle Geschlechter.

Hinweis zur Verwendung KI-gestützter Hilfsmittel

Bei der Erstellung dieser Masterarbeit kamen die KI-gestützten Sprachmodelle ChatGPT von OpenAI und Gemini von Google zum Einsatz. Genutzt wurden sie ausschließlich als Hilfsmittel zur Gedankenstrukturierung und thematischen Reflexion. Es wurden keine KI-generierten Textpassagen unverändert in diese Arbeit übernommen. Sämtliche Inhalte, Bewertungen und Schlussfolgerungen wurden eigenständig erstellt und vom Autor selbst verantwortet. Zur Überprüfung der Rechtschreibung und Grammatik wurde zudem das KI-gestützte Online-Werkzeug Scribbr/QuillBot genutzt.

1. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit thematisiert die valide Identifizierung und Differenzierung von Extraktgranulaten aus Arzneidrogen der traditionellen chinesischen Medizin (TCM) unter Anwendung eines dualen Ansatzes aus einer nasschemischen Testreihe und einem algorithmischen Entscheidungsbaum. Beim Wareneingang von Arzneimitteln schreibt die Apothekenbetriebsordnung eine Identitätsprüfung vor, die aufgrund des Fehlens einer zuverlässigen, alltagstauglichen und breit anwendbaren Granulat-Identifizierung aktuell nur unter unverhältnismäßigem Aufwand erfüllt werden kann. Mangelnde Konformität könnte künftig den Vertrieb von TCM-Granulaten gefährden.

Ziel dieser Arbeit ist die Etablierung eines strukturierten Prüfkonzpts für gängige TCM-Granulate, um eine wissenschaftliche Grundlage für eine verlässliche sekundäre Identifizierung zur künftigen Eingangskontrolle zu gewähren.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Testreihe von 12 nasschemischen Tests übernommen und auf TCM-Granulate angewandt. Die erhobenen Daten zu 329 Granulaten wurden normiert und systematisch bewertet. Resultierende Testergebnisse wurden in einem algorithmischen ID3-Entscheidungsbaum organisiert. Abschließend wurde die gesamte Methode kritisch bewertet und Optimierungspotenzial aufgezeigt.

Die in dieser Masterarbeit vorgestellte Methode eignet sich prinzipiell zur validen Differenzierung von TCM-Granulaten. 169 der 329 Granulate konnten eindeutig identifiziert werden, was 51,4% Differenzierbarkeit entspricht. Unter Berücksichtigung der methodischen Limitationen gilt diese Rate als adäquat, aber verbesserungsfähig. In einem Bereich mit besonders niedriger Erkennungsrate konnte mittels einer vorgeschlagenen methodischen Optimierung eine signifikante Verbesserung der Ergebnisse erzielt werden. Zusammenfassend wurde ein solides Differenzierungskonzept erstellt, das reproduzierbare Ergebnisse liefert und durch die methodische Strukturierung qualitativer Analysen einen Beitrag zur künftigen Qualitätssicherung im Feld der TCM-Arzneigranulate leistet.

1. Abstract

This master thesis addresses the valid identification and differentiation of extract granules derived from medicinal drugs used in traditional Chinese medicine (TCM) by means of a dual approach comprising a series of wet-chemical tests and an algorithmic decision tree. Upon receipt of medicinal products, pharmacy regulations require identity testing, which can currently only be performed with disproportionate effort due to the lack of a reliable, practical, and widely applicable granule identification method. Non-compliance may pose a risk to future distribution.

The aim of this work is to implement a structured testing concept for common TCM granules for a reliable secondary identification as incoming quality control.

A set of 12 wet-chemical tests was applied to TCM granules. Data collected from 329 granules were standardized and systematically analyzed. The resulting data were structured via an algorithmic ID3 decision tree. Finally, the entire method was critically evaluated, and areas for optimization were identified.

In this thesis, a suitable method was elaborated, allowing for a solid differentiation of TCM granules. 169 of the 329 granules could be clearly identified (i.e., a 51.4% differentiation rate). Considering the methodological limitations, this rate is deemed adequate but subject to improvement. In an area with a particularly low detection rate, a significant improvement in results was achieved through the proposed methodological optimization. In summary, a robust differentiation concept was developed that delivers reproducible results and contributes to the advancement of quality assurance in the field of TCM medicinal granules through the methodological structuring of qualitative analyses.

2. Zielsetzung

2.1 Behandelte Problemstellung

Die Apothekenbetriebsordnung schreibt vor, dass Arzneimittel beim Wareneingang auf ihre Identität zu prüfen sind (Österreichische Apothekerkammer, 2005). Gegenwärtig fehlt eine standardisierte, kosteneffiziente Methode, die eine verlässliche Identifikation von TCM-Granulaten im Apothekenalltag erlaubt. Die daraus resultierende Nichterfüllung regulatorischer Ansprüche begünstigt künftige Einschränkungen in Verkauf und Anwendung von TCM-Extraktgranulaten.

2.2 Ziel dieser Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung und Implementierung einer Methode zur validen Identifizierung und Differenzierung von TCM-Arzneigranulaten, die den Ansprüchen einer verlässlichen Eingangskontrolle entspricht. Das soll erreicht werden durch das Testen der Granulate nach einer bereits etablierten nasschemischen Testreihe, der normierten Bewertung der Testausgänge und der Organisation der Ergebnisse in einem effizienten Entscheidungsbaum. Letztendlich soll die Basis für ein praxisnahes, gut handhabbares Instrument zur zweifelsfreien Unterscheidung der Granulate geschaffen werden.

2.3 Aufstellen relevanter Hypothesen

H1: Die etablierte nasschemische Testreihe besitzt ausreichend Trennschärfe, um die 329 untersuchten TCM-Arzneigranulate eindeutig zu identifizieren, und liefert reproduzierbare, verlässliche Ergebnisse.

H2: Durch einen algorithmischen Ansatz ist es möglich, einen praxistauglichen Entscheidungsbaum zu erstellen, der die Ergebnisse der Testreihe effizient organisiert und für die maximale Anzahl an Granulaten den optimalen Weg zur eindeutigen Identifizierung darstellt.

3. Einleitung

3.1 Allgemeine Einführung in das Thema

Rezepturen und Arzneien der traditionellen chinesischen Medizin (TCM) gewinnen in den westlichen Industrieregionen zunehmend an Bedeutung. Die Abkochung eines pflanzlichen Drogenmaterials, das sogenannte Dekokt, ist zwar die gebräuchlichste TCM-Zubereitung, allerdings ist sie nur schwer in den westlichen Alltag zu integrieren. Denn sie ist arbeits- und zeitintensiv und erfordert viel Mühe und Genauigkeit beim Herstellungsprozess. Faktoren wie Hitze, Kochzeit und Wassermenge müssen während der Zubereitung genau kontrolliert werden, damit es nicht zu Schwankungen in der Wirksamkeit kommt (Sun, 2025). Außerdem fehlt Patienten oftmals die intuitive Vertrautheit mit dem traditionellen chinesischen Medizinsystem, wodurch Fertigrezepturen stetig an Marktbedeutung gewinnen. Arzneigranulate bieten hier mehrere Vorteile: zu nennen sind ein hoher Anwendungskomfort, denn sie können einfach in Wasser gelöst werden, aber auch Qualitätskonstanz, einfache Lagerung und ein leichter Transport. Diese Vorzüge machen sie letztendlich zu sicheren, effizienten und bequemen Arzneiformen (Sun, 2025).

Um aus Rohdrogen Arzneigranulate in industriellem Maßstab herzustellen, wird in Fabriken nach den Vorschriften des chinesischen Arzneibuches gearbeitet. Dafür wird das Pflanzmaterial gereinigt, gewaschen und geschnitten und danach zum Einweichen mit Wasser versetzt. Anschließend wird die Arzneidroge in großen Ansätzen ausgekocht und das dabei gewonnene Dekokt in Sprühtürmen eingedampft. So entsteht ein Primärextrakt, der pulverförmig und meist stark hygroskopisch ist. Um daraus ein verwendbares Granulat zu gewinnen, wird dieser Extrakt unter der Verwendung von Hilfsstoffen wie Maltodextrin, Aerosil, Magnesiumstearat und in seltenen Fällen auch Laktose zu einem Bruchgranulat verarbeitet (Information nach mündlicher Befragung von Mag. Mag. E. Stöger, 27.08.2025).

3.2 Relevanz der Granulat-Identifikation

Wenn in einer Apotheke TCM-Arzneigranulate verwendet und verkauft werden, besteht die Auflage, beim Erhalt der Ware eine Eingangskontrolle durchzuführen. TCM-Granulate werden in Österreich als Arzneimittel eingestuft und die Apothekenbetriebsordnung verordnet in

§7 Absatz 1, dass Arzneimittel den Anforderungen des Arzneimittelgesetzes entsprechen müssen und gemäß Arzneibuchgesetz auf Identität zu prüfen sind. In §7 Absatz 3 wird vorgeschrieben, dass die Identitätsprüfung für jedes Arzneimittel, das keine Arzneispezialität ist, zu erfolgen hat (Österreichische Apothekerkammer, 2005).

Die Praxis sieht jedoch anders aus. Aufgrund fehlender Methoden, um eine einfache, zeitsparende und zugleich zuverlässige Eingangskontrolle durchzuführen, wird oftmals gar nicht oder nur unzureichend kontrolliert. Diese fehlende sekundäre Identitätsprüfung gefährdet die Anwendbarkeit und Sicherheit der Arzneimittel. Aufgrund nicht durchführbarer Eingangskontrollen ist ein zukünftiges Verbot für den Verkauf und die Verwendung von TCM-Arzneigranulaten in der etablierten Form nicht auszuschließen. Diese Arbeit soll dabei helfen, die Grundlagen für eine Methode basierend auf qualitativen Tests zu schaffen, die der zweifelsfreien sekundären Identifikation von TCM-Granulaten dient und in weiterer Folge für Apotheken zur Eingangskontrolle nutzbar gemacht werden kann.

3.3 Bisherige nasschemische Methodik und zusätzliche spezifische Anforderungen

Die Basis für diese Arbeit wurde von drei projektbeteiligten Masterstudentinnen der Pharmazie der Universität Wien geschaffen. In Kooperation mit der Firma Plantasia GmbH, Göming, Österreich, wurde bereits eine Standardarbeitsanweisung (SOP) zur Durchführung der Testreihe erstellt, mit der die TCM-Arzneigranulate analysiert werden können. Diese Testreihe wurde zuvor schon auf 299 der 329 zu untersuchenden Granulate angewandt und umfasst 12 nasschemische Reaktionen. Sie bestehen größtenteils aus Farbreaktionen, wodurch die Proben auf das Vorliegen und den Gehalt von bestimmten sekundären Pflanzenstoffen untersucht werden können. Mithilfe der verschiedenen Auslesungen der Farbreaktionstestreihe sollte im Idealfall jedem Granulat ein eindeutiger „Farb-Fingerabdruck“ zugeordnet werden können. Dieses Charakteristikum könnte dazu dienen, eine einfache, aber gleichzeitig robuste Identifizierung jedes TCM-Granulats in der Apotheke zu erreichen.

Um eine effiziente, aber zuverlässige Durchführbarkeit der sekundären Identifikation von TCM-Granulaten in der Apotheke zu gewährleisten, bestand das Ziel dieser Arbeit darin, reproduzierbare Testausgänge nach einem normierten Beurteilungsschlüssel zu bewerten und anschließend in Form eines Entscheidungsbaumes zu organisieren. Der Entscheidungsbaum

als Werkzeug zur intuitiven, schrittweisen Eingrenzung sollte es schlussendlich auch Laien ermöglichen, zweifelsfreie Zuordnungen zu treffen. Um in der Praxis eine möglichst zeitsparende Ausführung zu gewährleisten, ergab sich die zusätzliche Anforderung, mithilfe der minimalen Anzahl an Testreaktionen zur eindeutigen Identifikation des Granulats zu gelangen. Um dieser Herausforderung gerecht zu werden, kommen bei der Erstellung des Entscheidungsbaumes Methoden aus dem Fachbereich des maschinellen Lernens zum Einsatz, die in ihrer Theorie in Kapitel 4.6 beschrieben werden sollen.

3.4 Gründe für einen algorithmischen Ansatz

Neben dem algorithmischen Ansatz zur Datenverarbeitung wurde auch die Option exploriert, die Organisation des Entscheidungsbaumes anhand des Inhaltsstoffmusters der Granulat-Ausgangsdrogen festzumachen. Der algorithmische Ansatz zeigte sich jedoch als vorteilhaft, nicht zuletzt aufgrund der Tatsache, dass die Testausgänge teilweise nur sehr gering mit dem theoretischen Inhaltsstoffmuster der Granulate korrelieren. Auf diesen Umstand wird in Kapitel 5.4 genauer eingegangen. Eine detaillierte Analyse kann in der parallel durchgeführten Masterarbeit von C. Duftschmid, B.Sc. nachgelesen werden (Duftschmid, 2026 in Bearbeitung).

Ein algorithmischer Ansatz bietet diverse Vorteile. Einer der offensichtlichsten, die mathematische Effizienz, erfüllt die in Kapitel 3.3 beschriebene Anforderung der minimalen Testanzahl für eindeutige Ergebnisse. Ein effizienter Entscheidungsbaum, der pro Schritt die optimale Aufteilung der Daten gewährleistet, kommt auch am schnellsten zum Ziel der eindeutigen Identifikation. Ein algorithmischer Ansatz gewährleistet Objektivität und Reproduzierbarkeit, ermöglicht aber auch den problemlosen Umgang mit beliebig großen Datenmengen, was in diesem Anwendungsfall eine essenzielle Rolle spielt. Im nächsten Abschnitt dieser Arbeit wird die methodische Durchführung im Detail beschrieben.

4. Spezieller Teil: Methodische Vorgehensweise und Ergebnisse

4.1 Übernahme und Durchführung der nasschemischen Standard-Testreihe

Die bereits ausgearbeitete und in Kapitel 6.4.1 beschriebene SOP wurde unverändert übernommen, um die ausständigen 30 TCM-Granulate nach dem etablierten Schema zu testen. Für die Dokumentation wurden die Granulatfarben, Lösungsfarben und Ergebnisse der Tests 1-11 im Tageslicht fotografiert (Beispiele ersichtlich in Abbildung 1, 2 und 3) und noch vor Ort bei der Durchführung interpretiert. Die initiale Bewertung der Testergebnisse und alle relevanten Farben wurden per Protokoll dokumentiert. Der genaue Aufbau der Tageslicht-Fotoapparatur (Abbildung 10) wurde unverändert aus den vorangegangenen Arbeiten übernommen, um eine direkte Vergleichbarkeit der Tageslicht-Aufnahmen innerhalb des gesamten Projektes zu gewährleisten. Zusätzlich wurden die Granulatfarben, Lösungsfarben und Ergebnisse der Tests 1-12 mit einem CAMAG TLC Visualizer unter UV-Licht einer Wellenlänge von 366 nm fotografiert (Abbildung 1, 2 und 3) und ebenfalls bewertet.

Um alle relevanten Farben eindeutig identifizieren und protokollieren zu können, wurde mit einem RAL K7 „Classic“ Farbfächer gearbeitet. Essenziell für diese Beurteilung war, unter immer gleichbleibenden Lichtverhältnissen zu arbeiten, was mithilfe eines Ringlichtes gewährleistet werden konnte.

Zu jedem der 30 untersuchten Granulate wurden drei separate, völlig voneinander unabhängige Versuchsdurchgänge gemacht. Bei diesen Durchgängen fiel auf, dass die Ergebnisse der Tests 9 und 10 instabil waren und mit zunehmender Zeit zwischen Reaktionsablauf und Beurteilung eine eindeutige Auswertung erschwert wurde. Folglich wurden diese beiden Tests stets als Letztes in der Testreihe durchgeführt. Zusätzlich erwies sich Test 10 als erschütterungsempfindlich, was besondere Vorsicht beim Umgang mit diesen Proben forderte.

Nach erfolgter Durchführung der Testreihe waren die Rohdaten zu den insgesamt 329 zu untersuchenden Granulaten vollständig zusammengetragen. Im folgenden Abschnitt soll die Belastbarkeit dieser Daten beurteilt werden.

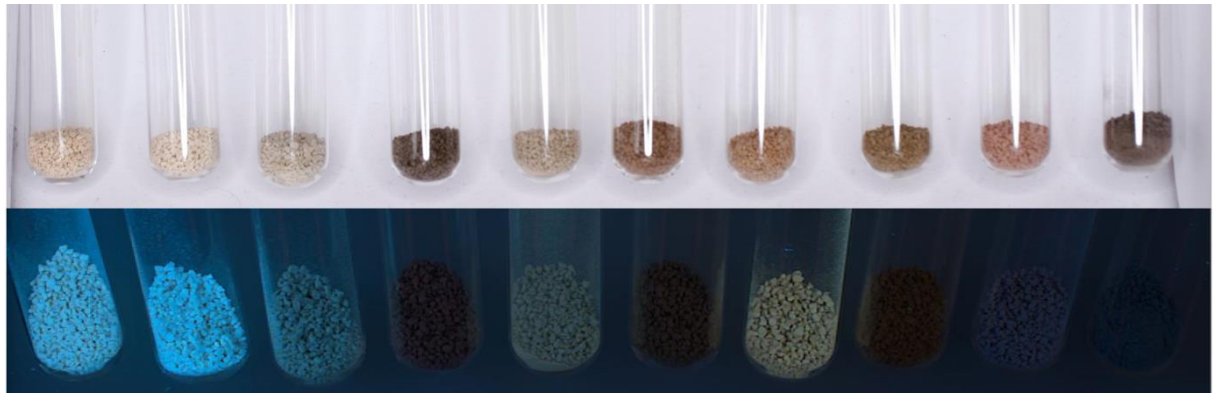


Abbildung 1: Granulatfarben der Proben 1325-1334 (links-rechts) unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)

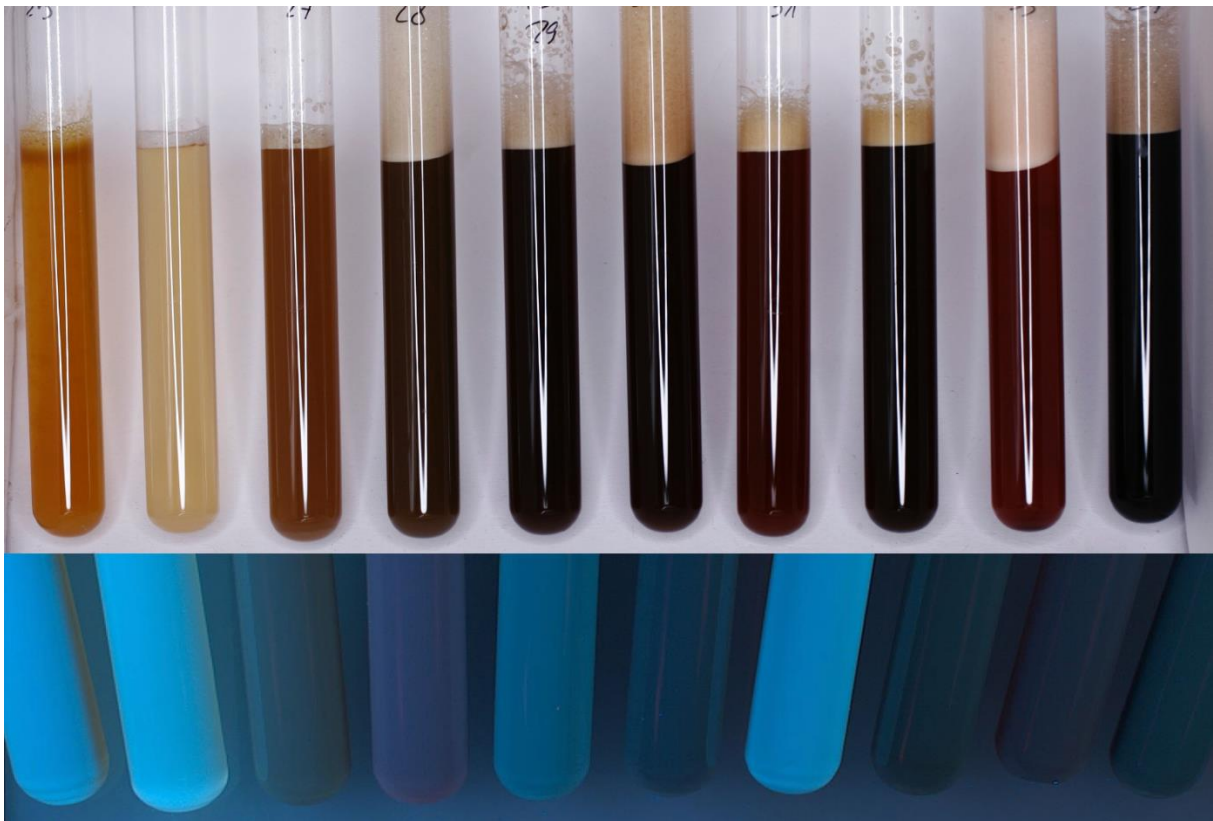


Abbildung 2: Lösungsfarben und Test 1 der Proben 1325-1334 (links-rechts) unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)

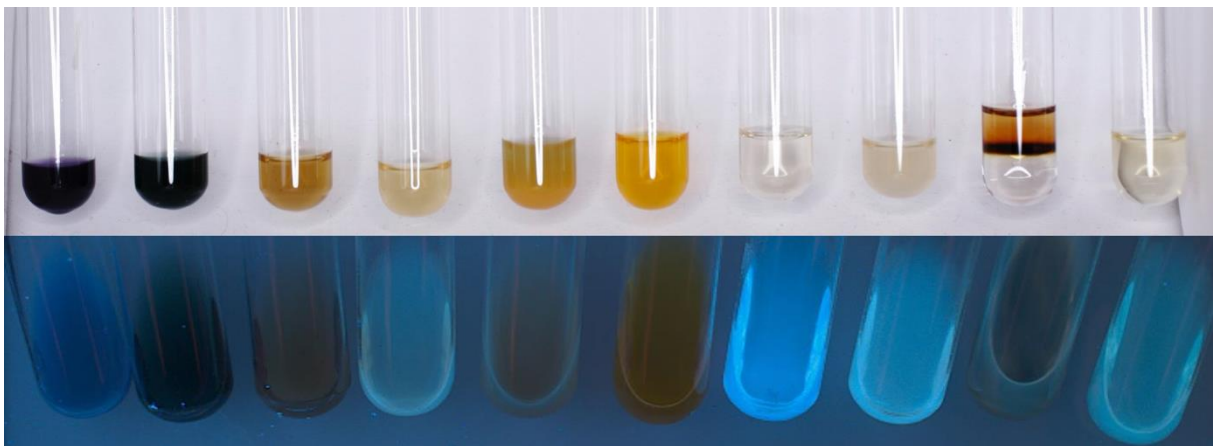


Abbildung 3: Durchgeführte Testreihe 2-11 der Probe 1326 Ophiopogonis rx. unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)

4.2 Qualität der erhobenen Rohdaten

Durch die Durchführung mehrerer getrennter Durchgänge der SOP-Testreihe pro untersuchtem Granulat konnten einzelne Ausreißer und unbrauchbare Ergebnisse eindeutig identifiziert und eliminiert werden. Zusätzlich erlaubten beobachtete Farbabweichungen einen direkten Rückschluss auf die Reproduzierbarkeit der Testausgänge. Um die Datenauswertung zu vereinfachen, wurden die Tageslicht- und UV-Aufnahmen der einzelnen Testreihen mithilfe des Programmes Microsoft PowerPoint collagiert. Dies ermöglichte einen Direktvergleich der Bilder und somit der Testergebnisse. Zusätzliche Sicherheit bot die Bestimmung der genauen RAL-Farben der Testausgänge. Durch den Vergleich der Proben mit dem RAL-Farbfächer konnten Farben zweifelsfrei bestimmt werden und die individuelle Farbwahrnehmung des Durchführenden weitestmöglich ausgeschlossen werden. Die Farbdokumentation bot eine Möglichkeit, die Testergebnisse auch zu einem späteren Zeitpunkt verlässlich nachzuvollziehen, was im Laufe der Arbeit noch sehr wichtig wurde.

Pro Tageslicht-Aufnahme wurden von der Kamera zwei unterschiedliche Formate generiert: eine „Canon Raw 2“-Datei (CR2-Datei) und eine JPEG-Datei. Beim Vergleich dieser beiden Dateien fiel auf, dass zwischen den Bildern stets ein minimaler Farbunterschied bestand. Der initiale Erklärungsansatz, dass eines bei der Abspeicherung der JPEG-Dateien beteiligtes Programm deren Farben nachträglich verstärkt, konnte nicht zweifelsfrei belegt werden. Es zeigte sich, dass weder die Farben der CR2-Datei noch jene der JPEG-Datei den im Labor protokollierten Echtfarben exakt entsprachen. Der Unterschied war jedoch so gering, dass die Einigung innerhalb der Projektarbeitsgruppe, ausschließlich mit den JPEG-Dateien zu arbeiten, als ausreichend erachtet wurde, um diesen Einflussfaktor hinnehmen zu können.

Im Zuge der vorliegenden Arbeit wurde ausschließlich die eingebaute Kamera des CAMAG TLC Visualizers für die UV-Aufnahmen genutzt. In den vorangegangenen Arbeiten kamen jedoch noch teilweise andere Kameras zum Einsatz. Auch dieser Einfluss auf die Vergleichbarkeit wurde als vernachlässigbar bewertet.

Die Fotodokumentation stellte die Basis der gesamten Arbeit dar. Diese ermöglichte zusammen mit den protokollierten RAL-Farben, die bei der Entscheidung unsicherer Fälle herangezogen wurden, eine finale Beurteilung der Testausgänge.

4.3 Standardisierung der Testbewertung

Unschärfe Beurteilungsschlüssel und eine nicht standardisierte Vorgehensweise bei der initialen Testauswertung führten dazu, dass diese erste Bewertung, die direkt bei der Durchführung entstanden war, zu großen Teilen verworfen werden musste. Stattdessen wurde unter den Beteiligten der Projektarbeitsgruppe festgelegt, dass sich die Auswertung primär an der Fotodokumentation orientieren sollte. Dafür wurde der Beurteilungsschlüssel, der anfangs direkt aus der SOP übernommen wurde, zusätzlich konkretisiert. Der Fokus wurde hierzu auf die Farben der Testausgänge gelegt. Jene Farben, die ein positives Ergebnis anzeigen, wurden als RAL-Farbcode exakt festgeschrieben. Ein vollständiger Überblick des konkretisierten Beurteilungsschlüssels ist in Tabelle 1 zu finden.

RAL-Farben eignen sich als Beurteilungskriterium, weil die Verwendung des RAL-Farbfächers den Einfluss der individuellen Farbwahrnehmung des Durchführenden auf ein Minimum reduziert. Zusätzlich wird durch deren Verwendung die Erkennung und Benennung von Mischfarben erheblich vereinfacht. Eine detaillierte Betrachtung der zentralen Frage bezüglich individuell abweichender Farbwahrnehmung und deren Einfluss auf dieses Projekt kann in der Arbeit von K. Simmer, B.Sc. nachgelesen werden (Simmer, 2026 in Bearbeitung).

Als weitere Anpassung des originalen Beurteilungsschemas wurde die halbpositive Beurteilung „(+)" des Tests 1 auf Saponine gestrichen, die eine Höhe der Schaumsäule von genau 1 cm anzeigt. Stattdessen wurden alle Schaumhöhen ≤ 1 cm als negatives Testergebnis gewertet. Durch diese Limitierung auf zwei mögliche Testausgänge wurden die Bewertungsmöglichkeiten von Test 1 an die restliche Testreihe angepasst und die Übersichtlichkeit des darauffolgenden Entscheidungsbaumes signifikant erhöht.

Vor der finalen Auswertung der Rohdaten wurden zusätzlich Blindproben und Positivbeispiele erarbeitet. Diese sollten eine zweifelsfreie Beurteilung der nasschemischen Testreihe erleichtern.

Tabelle 1: Kriterien für eine positive Beurteilung der Tests 1-12, besonders häufig beobachtete Farben fett geschrieben

Bezeichnung	Färbung	Zus. Beurteilungskriterium	RAL-Nummern
Test 1 – Saponine	–	Schaumsäule > 1 cm	–
Test 2 – Aminosäuren	Violett	–	3007, 4001, 4004-4008, 5004, 5011 <u>Nicht:</u> 3005, 3009, 4002, 4009-4011
Test 3 – red. Substanzen	Grün - Blau	–	<u>Grün:</u> 6000-6005, 6007, 6009-6013, 6015-6021, 6024-6026, 6028-6032, 6037, 6039 <u>Blau:</u> 5000-5024, 6004, 6026, 6027, 6033, 6034 <u>Nicht:</u> 6006, 6008, 6014, 6022
Test 4 – Tannine	Dunkelgrün - Schwarz	gallertige Konsistenz	6006-6009, 6012, 6015, 6022, 7021, 8017, 8022, 9004, 9005, 9011, 9017 <u>Nicht:</u> 3007, 6003, 6014, 6020
Test 5 – Anthrachinon	Rot	–	2002, 3000-3002, 3004 , 3005 , 3009, 3011 , 3013, 3016, 3020, 3028, 3031 <u>Nicht:</u> 8015, 8016
Test 6 – Proteine	Pink, Lila, Violett	–	3014, 3015, 3017, 3018, 3027, 4001-4003, 4004 , 4005, 4006, 4007 , 4008, 4010 <u>Nicht:</u> 3017, 4009
Test 7 – Alkaloide	–	oranger Niederschlag	2000, 2001, 2003, 2004, 2007-2011, 2017
Test 8 – Flavonoide (Shinoda)	Rosa - Rot	–	2012, 3000-3005, 3009-3031, 4002, 4003, 4010
Test 9 – Flavonoide (Bleiacetat)	–	gelber - rotbrauner Niederschlag	–
Test 10 – Steroide/Triterpene	–	roter Ring, gelber Ring	–
Test 11 – Berberin	Rot	–	2002, 3000-3005, 3011, 3013, 3016, 3020, 3028, 3031 <u>Nicht:</u> 2001, 3009
Test 12 – Flavonoide (Fluoreszenz)	–	charakteristische Fluoreszenz	–

4.4 Bewertungshilfen: Blindproben und Positivbeispiele

4.4.1 Durchführung der Blindproben

Um bei der Auswertung der Farbresultate der nasschemischen Testreihe 1-12 an Sicherheit zu gewinnen und zusätzlich den Einfluss der Eigenfarbe der Granulatlösungen auf die Testausgänge einschätzen zu können, wurde zusammen mit der projektbeteiligten Studentin C. Duftschmid, B.Sc. eine Reihe an Blindproben erarbeitet. Hierfür wurden Stammlösungen zubereitet, die keine TCM-Granulate enthielten, sondern nur die für die Granulierung gängigsten Hilfsstoffe. Mit diesen Stammlösungen wurde dann die Testreihe der SOP analog der Testreihe der Granulate durchgeführt.

Um die Stammlösungen anzufertigen, wurden für Stammlösung 1 (SL1) 100 g Maltodextrin und 10 g Magnesiumstearat in 200 ml deionisiertem Wasser und für Stammlösung 2 (SL2) 10 g Maltodextrin und 0,01 g Magnesiumstearat in 150 ml deionisiertem Wasser gelöst bzw. suspendiert. Zur Imitation der Eigenfarbe der Granulatlösungen wurden die Stammlösungen mithilfe von Wasserfarben eingefärbt. Die genauen Mengen an Wasserfarben, mit welchen die sechs gängigsten Lösungs-Farbkategorien nachgeahmt wurden, können Tabelle 2 entnommen werden.

Um bei den positiven Blindproben das erwartete Testergebnis sicherzustellen, wurden diesen Proben sorgfältig ausgewählte Reinsubstanzen zugesetzt, während für die negativen Blindproben die reine (eingefärbte) Stammlösung verwendet wurde. Um mit der teils schlechten Wasserlöslichkeit der Reinsubstanzen umzugehen, wurden sie bei manchen Tests vor der Zugabe in Methanol oder Ethanol 96% (v/v) gelöst. In diesen Fällen wurde stets die gleiche Menge an zusätzlichem Lösungsmittel auch der Negativ-Blindprobe zugesetzt, um auftretende Verdünnungseffekte in Bezug auf die Farbintensität auszugleichen. In Einzelfällen wurden die Proben-Eprouvetten auch mit Ultraschall behandelt, um die Löslichkeit zusätzlich zu verbessern. Eine detaillierte Auflistung der Stammlösung und Reinsubstanz pro Blindprobe kann Tabelle 3 entnommen werden.

Die Ergebnisse der Blindproben-Testreihe wurden bei Tageslicht und bei UV-Licht mit 366 nm Wellenlänge fotografiert und die im Labor wahrgenommenen RAL-Farben der Lösungen im Tageslicht protokolliert. Die erhobenen Daten wurden zu einem Vergleichsdocument zusammengefasst, das zur Interpretation der Granulat-Testreihen herangezogen wurde. Dieses Dokument ist im Anhang dieser Arbeit beigelegt.

Für einen zweiten authentischen Vergleich wurde eine Liste mit Granulaten angefertigt, bei denen bekanntermaßen die einzelnen Tests aus der Testreihe eindeutig positive Ergebnisse aufweisen. Diese Liste ist ebenfalls im Anhang ersichtlich.

Tabelle 2: Verwendete Menge an Wasserfarbe pro Stammlösungskategorie

Farbkategorie Stammlösung	Hinzugefügte Wasserfarbe je 25 ml Stammlösung
Dunkelbraun	0,037 g Braun; 0,011 g Schwarz
Braun	0,056 g Braun; 0,026 g Ocker; 0,001 g Rot; 0,001 g Schwarz
Rot	0,11 g Rot; 0,003 g Braun; 0,001 g Schwarz
Ocker	0,024 g Ocker; 0,01 g Blaugrün
Beige	0,02 g Ocker
Farblos/Weiß	–

Tabelle 3: Verwendete Menge Stammlösung und Reinsubstanz für Positivproben pro Test

Test	Stammlösung	Reinsubstanz für Positivprobe
Test 1 – Saponine	10 ml Stammlösung 2	0,01 g Aescin
Test 2 – Aminosäure	1 ml Stammlösung 2	0,02 g L-Glutaminsäure
Test 3 – red. Substanzen	1 ml Stammlösung 1	0,01 g Ascorbinsäure
Test 4 – Tannin	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Gerbsäure
Test 5 – Anthrachinon	1 ml Stammlösung 2	0,004 g Rhein; 1 ml Methanol
Test 6 – Protein	1 ml Stammlösung 2	0,02 g Knochenleim
Test 7 – Alkaloid	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Chinin; 1 ml Ethanol 96% (v/v)
Test 8 – Flavonoid (Shinoda)	5 ml Stammlösung 2	0,01 g Rutin
Test 9 – Flavonoid (Bleiacetat)	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Quercetin
Test 10 – Steroid/Triterpen	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Stigmasterin bzw. 0,03 g Aescin
Test 11 – Berberin	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Berberin
Test 12 – Flavonoid (Fluoreszenz)	1 ml Stammlösung 2	0,01 g Quercetin; 0,5 ml Methanol

4.4.2 Qualität der Blindproben

Das Ziel der Blindproben war es, authentische Vergleiche für jene Farben zu generieren, die positive Testergebnisse indizieren. Einige Reinsubstanzen wiesen Eigenfarben auf, die in weiterer Folge den Farbunterschied zwischen Positiv- und Negativ-Blindproben beeinflussten. Rhein, Rutin, Quercetin und Berberin zeigten als Reinsubstanzen Farben von RAL 1015 Hellelfenbein bis hin zu RAL 1003 Signalgelb und beeinflussten damit direkt die Ausgänge der Blindproben zu den Tests 5, 8, 9, 11 und 12. Die durch sie verursachte Farbverschiebung wurde im Blindproben-Dokument protokolliert.

Die verwendeten Wasserfarben beeinflussten das Ergebnis der Blindprobe zu Test 1 auf Saponine. Ihre Anwesenheit in der Stammlösung verursachte eine signifikante Zunahme der Schaum-Menge und -Stabilität, wie in Abbildung 4 und Abbildung 5 zu sehen ist. Negative Blindproben, die nicht das Saponin-Gemisch Aescin enthielten (in Abbildung 4 immer die rechte Eprouvette pro Farb-Kategorie), wiesen nach dem Schütteln eine Schaum-Menge auf, die direkt proportional zur verwendeten Menge an Wasserfarbe der Stammlösung war (vergleiche mit Tabelle 2). Selbst nach 10 min Wartezeit konnte in den Eprouvetten der negativen Blindproben eine fast unveränderte Schaum-Menge beobachtet werden (Abbildung 5). Der Einfluss der Wasserfarben schränkte also die Verwendbarkeit der Blindprobe zu Test 1 stark ein. Dies stellte jedoch kein großes Problem dar, nachdem die Beurteilungskriterien für Test 1 sehr genau definiert worden waren und Testergebnisse hier zweifelsfrei und eindeutig interpretiert werden konnten, selbst ohne die Verwendung eines authentischen Vergleiches.

Bei Test 4 konnte bei den Blindproben das zusätzliche Beurteilungskriterium der gallertigen Konsistenz bei positivem Testergebnis sehr gut beobachtet werden. Bei Test 6 und Test 8 wurde die Interpretation von positiven Testergebnissen durch eine dunkle Farbe der Stammlösung besonders erschwert. Diese wichtige Erkenntnis ließ sich später direkt auf die Auswertung der Echtdaten zu den Granulatlösungen übertragen.

Zusammenfassend konnten durch die Blindproben und Positivbeispiele brauchbare Vergleiche für die Tests 2-12 geschaffen werden, die bei der Bewertung der Echtdaten zusätzlich Gewissheit boten.



Abbildung 4: Stammlösung pro Farbkategorie mit (links) und ohne (rechts) Aescin bei Test 1 direkt nach dem Schütteln



Abbildung 5: Stammlösung pro Farbkategorie mit (links) und ohne (rechts) Aescin bei Test 1 nach 10 min Wartezeit

4.5 Auswertung der gesammelten Testergebnisse

Wie bereits in Kapitel 4.3 erwähnt, musste die initiale Beurteilung der Ergebnisse während der Durchführung der Testreihen größtenteils verworfen werden. Der Grund dafür war, dass der Bewertungsschlüssel anfangs noch zu vage definiert war und folglich große individuelle Unterschiede im Bewertungsstil des Durchführenden zuließ. Nachdem jedoch eine standardisierte Vorgehensweise für die Auswertung etabliert worden war und zusätzlich authentische Vergleiche vorlagen, wurden die Testreihen erneut anhand der gesammelten JPEG-Fotodokumentation interpretiert und die Ergebnisse in Excel-Listen organisiert. Das erarbeitete Laborprotokoll wurde stellenweise zur Ergänzung herangezogen, beispielsweise um Niederschlagsmengen oder -farben zu beurteilen, die auf Fotoaufnahmen nur schwer einschätzbar waren. Die bei der Durchführung dokumentierten RAL-Farben der Testergebnisse gelten als verlässlich und konnten in der Auswertung berücksichtigt werden.

Um einen weiteren Schritt der Standardisierung zu setzen und Unterschiede im individuellen Bewertungsstil zu minimieren, wurden die JPEG-Dateien der gesamten 329 Granulate unter Beisein aller projektbeteiligten Studenten bewertet. Das Urteil, ob ein Testausgang als positives oder als negatives Ergebnis zu werten sei, wurde kollektiv gefällt, und in Zweifelsfällen wurde anhand einer Mehrheitsentscheidung gehandelt. Selten konnte kein Konsens innerhalb der Projektarbeitsgruppe gefunden werden. Hier wurde anhand der Beurteilung von Projektleiter Mag. M. Burschowsky (Plantasia GmbH) entschieden.

Zur Auswertung wurde der Beurteilungsschlüssel aus Tabelle 1 herangezogen, der akzeptable RAL-Farben und zusätzliche Kriterien wie etwa charakteristische Niederschläge festschreibt. Nur eindeutige und unmissverständlich positive Testausgänge wurden als positive Ergebnisse interpretiert. Am Beispiel von Test 4 demonstriert bedeutet das, dass nur intensiv dunkelgrüne bis schwarze Verfärbungen der Probelösung als positives Ergebnis gewertet wurden und eine lediglich leicht dunklere Verfärbung dafür nicht ausreichte. Für schwer interpretierbare Ergebnisse wurden die erarbeiteten authentischen Vergleiche herangezogen.

Im Zuge der Auswertung konnte beobachtet werden, dass sich bei Test 8 die verwendete Menge an Zinkstaub direkt proportional zu dem beobachteten Farbumschlag der Reaktion verhält. Weiter fiel auf, dass bei den Testergebnissen unterschiedlicher Chargen des gleichen Granulates teilweise eine sehr gute Vergleichbarkeit herrschte, in gewissen Fällen jedoch nur eine sehr geringe Komparabilität zu beobachten war. Mögliche Gründe hierfür werden in Kapitel 5.4 ausführlicher diskutiert.

An dieser Stelle soll noch festgehalten werden, dass den Beteiligten der Projektarbeitsgruppe bewusst ist, dass durch die gesetzten Maßnahmen mögliche Interpretationsfreiräume bei der Testbewertung nicht vollständig ausgeschlossen werden konnten. Bei der gewählten Vorgehensweise handelt es sich lediglich um den Versuch, eine möglichst standardisierte Methode zu etablieren, die valide und reproduzierbare Ergebnisse liefern soll.

Das Ergebnis der Auswertung waren normierte Daten zu den 329 untersuchten Granulaten, die als Grundlage für den Entscheidungsbaum herangezogen werden konnten.

4.6 Theoretische Grundlagen des Entscheidungsbaumes (ID3)

Im Laufe der Arbeit wurde die Anwendbarkeit der Algorithmen ID3, C4.5 und CART geprüft. Der ID3-Algorithmus kam zum Einsatz, da alle relevanten Rechenschritte problemlos im Programm Microsoft Excel durchgeführt werden können.

Bei der Anwendung des ID3-Algorithmus werden Systeme, hier optionale Aufteilungen von Granulat-Gruppen, evaluiert und miteinander verglichen. Shannon zeigte, dass die Bewertung komplexer Systeme anhand ihrer Entropie erfolgt, definiert durch die relative Häufigkeit von System-Komponenten (Shannon, 1948). Dabei gilt die Entropie als das Maß der Unordnung und sie verhält sich indirekt proportional zu der Information, die über ein betrachtetes System bereits vorliegt (Ulqinaku & Ktona, 2023). Auf den vorliegenden Fall angepasst bedeutet das: Je höher die Entropie an einem betrachteten Knotenpunkt, desto mehr Granulate kommen an dieser Stelle noch in Frage. Die Formel für die Shannon-Entropie, hier Start-Entropie (H_{start}) genannt, wurde als Formel 1 direkt aus der Arbeit von Ulqinaku und Ktona übernommen (Ulqinaku & Ktona, 2023).

Um zu entscheiden, welcher der Tests als Nächstes auf eine betrachtete Granulat-Gruppe angewandt wird, wird als Beurteilungskriterium der Informationsgewinn (IG) eines jeden Tests herangezogen. Der IG quantifiziert die Entropie-Abnahme zwischen Ausgangszustand (betrachtete Granulat-Gruppe) und Endzustand (entstandene Subgruppen nach erfolgter Testanwendung). Wenn der IG durch den nächsten angewandten Test maximiert wird, so wird die betrachtete Gruppe optimal aufgeteilt (Hssina et al., 2014). Der IG durch Test T_k lässt sich mittels Formel 2 berechnen, die aus der Arbeit von Hssina et al. übernommen wurde (Hssina et al., 2014). Der zweite Teil der Formel, $\sum_{j=1}^m p_j \cdot H(p_j)$, kann als gewichtete Gesamtentropie der Testausgänge verstanden werden.

Um den IG ermitteln zu können, muss die Zweig-Entropie der einzelnen Unterzweige für positive und negative Testergebnisse $H(p_j)$ berechnet werden. Dies gelingt mit der Formel für die Shannon-Entropie, wobei nun statt der relativen Häufigkeit des Granulates p_i die relative Häufigkeit positiver bzw. negativer Testergebnisse in der Subgruppe (p_{pos} bzw. p_{neg}) verwendet wird. Die Formel hierfür, Formel 3, wurde ebenfalls aus der Arbeit von Ulqinaku und Ktona entnommen und adaptiert (Ulqinaku & Ktona, 2023).

Eine recht intuitive Veranschaulichung dieses Prozesses: Es wird jener Test auf eine Gruppe von Granulaten angewandt, welcher die Menge am besten in zwei gleich große Untergruppen aufteilt. So wird ein Test, der in einer Gruppe von 10 Granulaten 2 ausgrenzt, weniger IG liefern als ein Test, der die 10 Granulate in zwei Gruppen zu je 5 Kandidaten aufteilt.

Die Einheit des Informationsgewinns ist das Bit. Für eine binäre Aufteilung gilt stets: Je näher der Wert von IG an 1 Bit liegt, desto besser eignet sich der betrachtete Test als nächster Schritt im Entscheidungsbaum. Angewandt auf das Beispiel von zuvor würde jener Test, der die Gruppe in zwei gleich große Untergruppen zu je 5 Granulaten teilt, einen IG von exakt 1 Bit liefern und den optimalen nächsten Schritt darstellen.

Mathematische Definitionen:

Formel 1: Shannon-Entropie, Start-Entropie der Subgruppe S

$$H(S) = H_{start} = - \sum_{i=1}^{n_{used}} p_i \cdot \log_2(p_i)$$

S	Subgruppe, entspricht aktueller Datenmenge; alle Granulate, welche an diesem Knoten noch in Frage kommen.
n_{used}	Klassenanzahl in S ; entspricht Anzahl der verschiedenen Granulate in Subgruppe S .
p_i	Relative Häufigkeit der Klasse i in Subgruppe S . In diesem Fall stellt jedes Granulat eine eigene Klasse dar und kommt genau einmal vor in S . Daraus ergibt sich $p_i = 1/n_{used}$.

Formel 2: Informationsgewinn durch Test T_k

$$Gain(S, T_k) = IG = H(S) - \sum_{j=1}^m p_j \cdot H(S_j) \quad \text{mit } p_1 = \frac{n_{pos}}{n_{used}} \text{ bzw. } p_2 = \frac{n_{neg}}{n_{used}}$$

p_j	Wahrscheinlichkeit, dass ein zufällig ausgewähltes Testergebnis aus Subgruppe S positiv bzw. negativ ist.
m	Maximale Anzahl der möglichen Testergebnisse, bei binärer Beurteilung gilt stets $m = 2$.
$H(S_j)$	Zweig-Entropie H_{pos} bzw. H_{neg} ; entspricht der Entropie der Zweige der positiven bzw. negativen Testergebnisse, siehe Formel 3.

Formel 3: Zweig-Entropie der Unterzweige für positive bzw. negative Testergebnisse

$$H_{pos} = - \sum_{i=1}^{n_{used}} p_{pos} \cdot \log_2(p_{pos}) \quad \text{mit } p_{pos} = \frac{1}{n_{pos}}$$

$$H_{neg} = - \sum_{i=1}^{n_{used}} p_{neg} \cdot \log_2(p_{neg}) \quad \text{mit } p_{neg} = \frac{1}{n_{neg}}$$

n_{pos} bzw. n_{neg}	Anzahl der positiven bzw. negativen Testergebnisse in Subgruppe S .
--------------------------	---

4.7 Algorithmische Strukturierung der Auswertung

4.7.1 Vorstrukturierung anhand optischer Kriterien

Zur Erstellung des Entscheidungsbaumes wurden zu Beginn alle 329 Granulate nach trivialen optischen Unterscheidungsmerkmalen sortiert. Zu diesen Kriterien zählen die Granulatfarbe, die Lösungsfarbe und das Ergebnis von Test 1, der Schaumprobe.

Für den ersten Schritt wurden die beobachteten Granulatfarben in acht getrennte Kategorien eingeteilt, für die auch weitgehend eindeutige RAL-Farben definiert werden konnten. Stellenweise mussten RAL-Farben auch als Akzeptanzkriterium für zwei Granulatfarben-Kategorien zugelassen werden. Eine detaillierte Auflistung dieser Kriterien kann Tabelle 4 entnommen werden.

Bei der Zuordnung der Granulate wurde offensichtlich, dass zwischen gewissen Farbgruppen keine eindeutige Grenze existiert bzw. Granulatfarben mit freiem Auge nicht immer zweifelsfrei einer Farbgruppe zugeordnet werden können. Um eine frühe Fehlzuordnung zu vermeiden, wurden schwer beurteilbare Kandidaten beiden relevanten Gruppen zugeordnet. Daraus ergab sich, dass eine Ausgangsmenge von 329 Granulaten in den acht Granulatfarben-Kategorien zu insgesamt 428 Einträgen führte. Diese Redundanz in der Datenbasis resultiert ausschließlich aus den Mehrfachzuordnungen und nicht aus zusätzlich berücksichtigten Substanzen.

Der zweite Schritt der optischen Kategorisierung orientierte sich an der Lösungsfarbe. Hierfür wurden die Kandidaten wiederum acht verschiedenen Lösungsfarben-Kategorien zugeteilt. Auch hier gab es Fälle, die nicht eindeutig nur einer einzelnen Gruppe zugeordnet werden konnten. Somit führten die 428 Einträge der Granulatfarben-Gruppen zu 465 Einträgen in den Lösungsfarben-Kategorien.

Bemerkenswert ist, dass die meisten Granulate Farben im Bereich der mittleren Brauntöne über Beige bis hin zu Cremefarben zeigen. Der Großteil der Lösungsfarben ist jedoch dunkelbraun oder schwarz, selbst wenn Granulate zuvor helleren Granulatfarben-Gruppen zugeordnet waren. Die genaue Aufteilung der Granulatfarben und Lösungsfarben auf die einzelnen Kategorien kann Tabelle 5 entnommen werden.

Für den letzten Schritt der optischen Zuordnung wurde das Ergebnis von Test 1, der Schaumprobe, herangezogen. Nachdem, wie in Kapitel 4.3 beschrieben, die halbpositive Testbewertung bereits ausgeschlossen war, teilte dieser Test die Kandidaten nunmehr in die Untergruppen „Schaumprobe positiv“ und „Schaumprobe negativ“ auf.

Durch diese Vorgehensweise entstanden 43 Unterkategorien, in 7 davon befand sich nur noch ein einzelner Kandidat. In diesen Fällen galt der Identifikationspfad als abgeschlossen, die Anwendung einer algorithmischen Methode war hier nicht mehr vonnöten. Auf die Unterkategorien, bei denen eine Sortierung durch den ID3-Algorithmus relevant war, wurde die in Kapitel 4.6 beschriebene Rechenlogik angewandt. Zur grafischen Darstellung des Entscheidungsbaumes wurde das Programm Draw.io genutzt. Die durch die optische Vorsortierung entstandenen Pfade sind in Abbildung 6 dargestellt.

Tabelle 4: Granulatfarben-Gruppen und ihre zugehörigen akzeptierten Granulat-RAL-Farben

Granulatfarben-Kategorie	Eindeutig zugeordnete RAL-Farben	Mehrfach zugeordnete RAL-Farben
Beige	1000, 1001, 1002	1011, 1019
Blau	5008	–
Dunkelbraun/Schwarz	7002, 7006, 8002, 8011, 8015, 8017, 8019, 8028	7008, 8025
Grau	7001, 7030, 7036, 7040, 7044	1019
Mittelbraun/Hellbraun	1011, 8000, 8001, 8003, 8004, 8008, 8012, 8023, 8024, 8025	1011, 7008, 8025
Ocker/Gelb	1006, 1012, 1033	–
Off-White/Creme/Weiß	1013, 1014, 1015, 9001, 9002, 9003, 9010, 9012, 9016	–
Rosa/Rot	2001, 3012, 3013, 3014, 3015, 3022	–

Tabelle 5: Übersicht über Granulatfarben-/Lösungsfarben-Kategorien und die Anzahl zugeordneter Kandidaten

Granulatfarben-Kategorie	Anzahl zugeordneter Granulate	Lösungsfarben-Kategorie	Anzahl zugeordneter Granulate
Beige	156	Beige	24
Blau	1	Blau	1
Dunkelbraun/Schwarz	24	Dunkelbraun/Schwarz	291
Grau	43	Grau	1
Mittelbraun/Hellbraun	99	Mittelbraun/Hellbraun	93
Ocker/Gelb	7	Off-White/Weiß/Klar	26
Off-White/Creme/Weiß	82	Rosa/Rot	24
Rosa/Rot	16	Zweifärbig/Viel Niederschlag	5
Gesamt	428	Gesamt	466

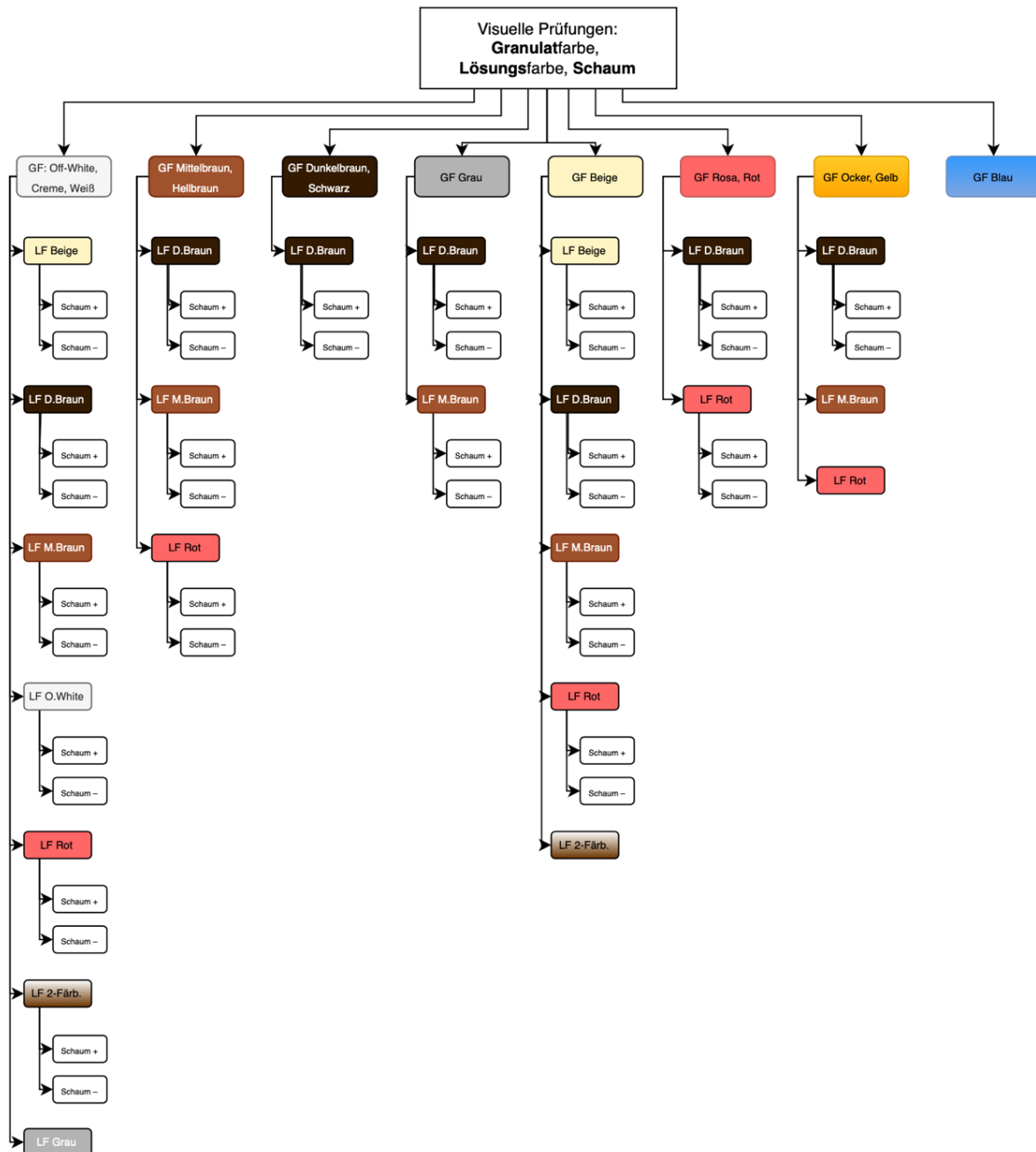


Abbildung 6: Kategorie-Übersicht des Entscheidungsbaumes nach den ersten 3 optischen Bewertungsschritten

4.7.2 Anwendung des ID3-Algorithmus

Zur Durchführung des ID3-Algorithmus wurde die Start-Entropie der betrachteten Gruppe berechnet, jeder infrage kommende Test auf die Gruppe angewandt und anschließend die Entropien nach der Testanwendung für jedes Szenario berechnet. Als optimaler nächster Schritt wurde jener Test gewählt, der den höchsten Informationsgewinn lieferte und somit die betrachtete Gruppe in maximaler Effizienz aufteilte.

Der ID3-Algorithmus ist ein iterativer Vorgang. Wurde ein Test als der nächste Schritt im Entscheidungsbaum erkannt und auf den Knotenpunkt angewandt, so wurden auf die entstandenen Subgruppen alle verbleibenden Tests erneut angewandt und die Evaluation startete von vorne. Dieser Vorgang wurde so lange wiederholt, bis es zur Identifikation aller Kandidaten gekommen war oder, um den Vorgang abzukürzen, leicht handhabbare Subgruppen (empirisch: ≤ 10 Kandidaten) entstanden waren. Aus diesen Subgruppen wurden dann mithilfe von deterministischen Alleinstellungsmerkmalen eindeutige Identifikationen durchgeführt. Als Alleinstellungsmerkmal angesehen werden einzigartige Testergebnisse oder Kombinationen von mehreren Testergebnissen, die für Granulate innerhalb der betrachteten Gruppe eine Abgrenzung ermöglichen.

Diese Entscheidungslogik wurde auf jene 36 Unterkategorien angewandt, die nach der optischen Zuordnung noch nicht gänzlich aufgeklärt waren. Die Berechnungen konnten vollständig im Programm Microsoft Excel durchgeführt werden und sind im Anhang einsehbar. Zur Sortierung der komplexesten Gruppen, also jener mit hoher Kandidatenanzahl, mussten bis zu drei Iterationen des Algorithmus durchgeführt werden. Dabei stieg der Rechenaufwand exponentiell an, da die Anzahl der Subgruppen nach n Testanwendungen dem Schema 2^n folgt, sofern nur Tests mit zwei möglichen Testausgängen zugelassen werden.

Aufgrund des rechnerischen Aufwands des ID3-Algorithmus wurde dieser nur so lange auf eine betrachtete Gruppe angewandt, bis leicht handhabbare Subgruppen entstanden waren. Dies bedeutet, dass die rechnerische Methode nicht konsequent bis zum vollständigen Auflösen durchgeführt wurde, sondern dass beim Erreichen einer Gruppengröße von ungefähr 10 Granulaten gestoppt wurde. Die Empirie zeigte, dass ab dieser Kandidatenanzahl durch die Anwendung von Alleinstellungsmerkmalen (genaue Definition im Anhang, Abschnitt A5) einzelne Granulate identifiziert werden können.

Mittels der beschriebenen Vorgehensweise wurde die maximal mögliche Anzahl an Granulaten identifiziert. Die gesammelten Daten wurden in der Entscheidungsbaum-Struktur organisiert, die im Programm Draw.io grafisch umgesetzt wurde. Der vollständige Entscheidungsbaum ist im Anhang ersichtlich.

4.8 Ergebnisse des Entscheidungsbaumes

Nach dem in Kapitel 4.3 festgeschriebenen Beurteilungsschlüssel zeigte Test 3 eine vernachlässigbare Trennleistung, da er fast ausschließlich positive Testergebnisse lieferte. Dadurch wurde seine Anwendbarkeit als Unterscheidungsmerkmal von Granulaten stark eingeschränkt. Eine alternative Interpretation der gesammelten Daten anhand der Farben der Testausgänge erscheint sinnvoll und sollte für Test 3 angedacht werden. Dieser Ansatz wird in Kapitel 5.6 näher diskutiert. In dem hier erarbeiteten und präsentierten Entscheidungsbaum wurde diese alternative Beurteilungsmethode berücksichtigt, indem an allen relevanten Stellen Daten in Klammern geliefert wurden, die gelten würden, falls die vorgeschlagene Adaption des Tests vorgenommen werden sollte.

Zur Beurteilung seiner Gesamtstruktur lässt sich der Entscheidungsbaum in drei Abschnitte einteilen. Am Anfang steht die visuelle Einstiegslogik, die bis zu 3 Ebenen umfasst. Darauf folgt die Subgruppen-Vorsortierung durch den ID3-Algorithmus, die typischerweise aus 1-2 Ebenen, maximal jedoch aus 3 Ebenen besteht. Abschließend kommt es zum Einsatz der Alleinstellungsmerkmale. Dieser Abschnitt umfasst maximal 5 Ebenen. Zusammenfassend liegt also eine Entscheidungstiefe von bis zu 11 Beurteilungsebenen vor, bevor ein Granulat zweifelsfrei identifiziert werden kann. Der Top-Split, also die erste Entscheidung, welche am Wurzelknoten durchgeführt wird, wird anhand der Granulatfarbe ausgeführt und eröffnet 8 mögliche Wege. Der Baum umfasst 83 Blätter, also Subgruppen nach der Algorithmus-Anwendung, aus denen bei Bedarf per Alleinstellungsmerkmal eine Identifizierung erfolgt.

Die aussagekräftigste Kennzahl des präsentierten Entscheidungsbaumes ist seine Identifikationsrate. Von den 465 Einträgen der Granulatfarben-Lösungsfarben-Kategorien können 240 Granulate eindeutig erkannt werden, 225 Granulate jedoch nicht. Dies entspricht einer eindeutigen Identifikationsrate von etwa 51,6%. Von den 225 unerkannten Kandidaten sind 34 zwei verschiedenen Kategorien zugeordnet. Ein einzelnes Granulat, Moutan cortex, ist drei Kategorien zugeordnet und kann in keiner davon erkannt werden. Werden diese Zahlen von der durch Doppelzuordnungen entstandenen Daten-Redundanz bereinigt, so können 169 der untersuchten 329 Granulate erkannt werden, was einer Rate von etwa 51,4% entspricht. Würde die am Anfang dieses Unterkapitels angemerkte Adaption von Test 3 durchgeführt werden, könnte die Identifizierungsrate auf etwa 60,9% signifikant gesteigert werden.

Eine besonders gute Trennleistung, bezogen auf die Gesamtzahl der untersuchten Granulate, zeigen die Tests 1, 4 und 12. Sie liefern ein sehr ausgewogenes Verhältnis zwischen positiven und negativen Testergebnissen. Test 3 und 6 zeigen die geringste Trennkraft, ihre Ergebnisse waren fast gänzlich positiv bzw. negativ (Diagramm 1). Test 3 lieferte insgesamt nur 7 negative Ergebnisse, Test 6 zeigte lediglich in 10 Fällen einen positiven Testausgang. Mögliche Gründe dafür und Verbesserungsvorschläge werden in Kapitel 5 vorgestellt.

Anhand der Ergebnisse dieses Prototyp-Entscheidungsbaumes können Bereiche mit Verbesserungspotenzial identifiziert werden. Durch die Einführung neuer Methoden und weiterer Tests könnte in Zukunft in Regionen mit niedrigen Identifikationsraten gezielt vorgegangen werden. Am Beispiel der mineralischen Granulate soll im nächsten Abschnitt eine mögliche Vorgehensweise demonstriert werden.

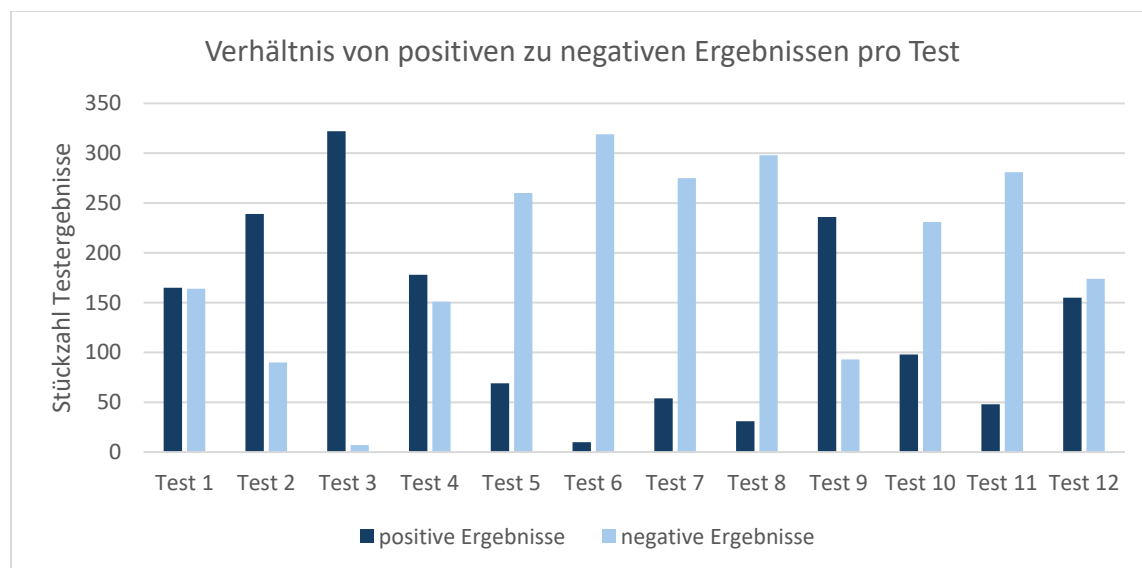


Diagramm 1: Verhältnis von positiven (linke Säule) zu negativen (rechte Säule) Testausgängen pro Test

4.9 Mineralische Granulate, zusätzliche Unterscheidung

Bei der Betrachtung des Entscheidungsbaumes fällt auf, dass die Kombination aus der Granulatfarbe „Off-White/Creme/Weiß“, der Lösungsfarbe „Off-White/Weiß/Klar“ und einer negativen Schaumprobe insgesamt 20 Granulate beschreibt, davon jedoch nur eines eindeutig identifiziert werden kann. Selbst wenn Test 3 in der adaptierten Form zugelassen wird, würde sich die Anzahl an eindeutigen Identifikationen lediglich auf zwei erhöhen. Dies ist eine auffällig niedrige Erkennungsrate für die betrachtete Kategoriengröße. In diesem Unterkapitel sollen die Hintergründe dafür beleuchtet und relevante Lösungsansätze geliefert werden. Die

präsentierte Methodik könnte als Leitfaden dienen, wie zukünftige Arbeiten die effektive Trennkraft des Entscheidungsbaumes gezielt erhöhen können.

Die Granulate der betrachteten Untergruppe sind überwiegend mineralischer Natur. Insgesamt 16 der 329 untersuchten Granulate gelten als mineralisch und nur zwei von ihnen sind nicht in dieser Untergruppe zu finden. Die Ausreißer, Halloysitum rubrum praep. und Haematitum praep., unterscheiden sich in ihrer Lösungsfarbe. Die etablierte SOP liefert in der überwiegend anorganischen Untergruppe deshalb eine geringe Identifikationsrate, weil sie auf die Erkennung (sekundärer) Pflanzenstoffe ausgelegt ist. Um hier eine effektive Identifikation zu gewährleisten, müssen hier andere Tests angewandt werden.

Um eine neue Testreihe, eine mineralische SOP, zu erstellen, wurde ein von der Firma Plantasia erarbeiteter Ansatz übernommen und ergänzt. Die neue SOP untersuchte Proben auf Sulfate, Eisen-Ionen, Aluminiumsalze, Carbonate, Phosphate und Magnesium-Ionen und wird in Kapitel 6.4.2 im Detail beschrieben. Die Akzeptanzkriterien für positive Testausgänge können Tabelle 6 entnommen werden.

Der Ansatz der Firma Plantasia wurde um eine Prüfung auf Magnesium-Ionen ergänzt. Bei der Auswertung der erzielten Testergebnisse ist gewisse Vorsicht geboten, denn durch den Granulierungs-Hilfsstoff Magnesiumstearat schlug dieser Test bei jeder der 16 mineralischen Proben zumindest leicht an. Eindeutig positive Ergebnisse wurden jedoch nur bei zwei Granulaten beobachtet: bei Magnetitum praep. und bei Talcum. Der Magnesiumgehalt von Talcum ist offensichtlich, weil es sich hierbei um Magnesiumsilikat-Hydrat ($\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$) handelt. Magnetitum hingegen ist ein Eisenoxid (Fe_3O_4), welches von Natur aus kein Magnesium enthalten sollte. Man kann annehmen, dass der positive Testauschlag hier etwa auf hohe Mengen des Granulierhilfsstoffes Magnesiumstearat zurückzuführen ist.

Durch die Anwendung dieser neuen mineralischen SOP konnten von den 16 anorganischen Granulaten 7 Kandidaten eindeutig identifiziert werden, während die verbleibenden 9 zumindest in zwei Untergruppen aufgeteilt werden konnten: Untergruppe 1, die positiv auf Sulfat-Test 13 anschlug und die die Granulate Gypsum fibrosum und Natrii sulfas enthält;

Untergruppe 2 hingegen zeigt einen positiven Carbonat-Test 15 und enthält sämtliche untersuchten Muschelschalenpräparate.

Durch die gesetzten Maßnahmen konnte also eine signifikante Erhöhung der Trennleistung in der Subgruppe der mineralischen Granulate erzielt werden. Die gesammelten Erkenntnisse wurden ebenfalls in den Entscheidungsbaum integriert.

Analog dieser Vorgehensweise könnten in kommenden Arbeiten Entscheidungsbaum-Bereiche mit besonders niedriger Identifikationsrate gezielt aufgeklärt werden. Weitere Methoden zur Optimierung des Entscheidungsbaumes werden in Kapitel 5 diskutiert.

Tabelle 6: Kriterien für eine positive Beurteilung der Tests 13-18

Bezeichnung	Färbung	Zus. Beurteilungskriterium
Test 13 – Sulfate	–	Weißer Niederschlag
Test 14 – Eisen-Ionen	(Dunkel-)Blau: Berliner/Thurnbull's Blau	–
Test 15 – Carbonate	–	Blasenbildung, Gasentwicklung
Test 16 – Phosphate	Leuchtendes Gelb	–
Test 17 – Magnesium-Ionen	(Hell-)Rot	–
Test 18 – Aluminiumsalze	–	Grüne Fluoreszenz (UV 366 nm)

5. Diskussion, Schlussfolgerung und Ausblick

5.1 Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

Die Testreihe erwies sich großteils als effektives Mittel zur Bewertung und Unterscheidung der zu identifizierenden TCM-Granulate. Voraussetzung dafür war, dass die Beurteilungskriterien schärfer definiert wurden und somit eine normierte Vorgehensweise für die Auswertung der Testergebnisse geschaffen werden konnte. Hierfür war der wichtigste Schritt das Festlegen der genauen RAL-Farben, die ein positives Testergebnis anzeigen. Dies gelang unter anderem dank der durchgeführten Blindproben und gesammelten Positivbeispiele. Die ausgewählten nasschemischen Tests führten bei manchen Granulat-Subgruppen zu einer akzeptablen Identifikationsrate, in anderen Bereichen zeigt sich Optimierungspotenzial.

Eine hohe Trennschärfe und eine einfache, intuitive Beurteilbarkeit zeigten die Tests 1, 4 und 12, wodurch sie für das Anlegen des Entscheidungsbaumes eine tragende Rolle spielten. Die Tests 3, 6 und 10 hingegen erwiesen sich als anspruchsvoll in der Durchführung oder problematisch in der Auswertung. Die Beurteilung von Test 3 sollte für zukünftige Arbeiten neu definiert werden, um die Trennleistung des Tests zu steigern. Test 6 eignete sich lediglich, um Einzelfälle zweifelsfrei zu interpretieren. Test 10 zeigte sich besonders anspruchsvoll in der Durchführung und könnte in Zukunft ebenfalls zur Identifikation einzelner Kandidaten genutzt werden. Seine standardmäßige Anwendung sorgte oft für Unsicherheit bei der Ergebnisinterpretation.

Der ID3-Algorithmus erwies sich als geeignetes Werkzeug, um die Testergebnisse effizient zu sortieren. Er zeigte ausreichende Durchführbarkeit im Programm Microsoft Excel, wenngleich die zugehörigen Berechnungen sehr arbeitsintensiv waren. Aufgrund des zugrunde liegenden exponentiell steigenden Rechenaufwands wurde der Algorithmus nicht zur endgültigen Identifikation genutzt. Stattdessen eignete sich der ID3-Algorithmus für die Zuordnung von Kandidaten in kleine, leicht handhabbare Granulat-Gruppen, die nach maximal drei Iterationen entstanden waren. Aus diesen Gruppen konnten dann mithilfe von Alleinstellungsmerkmalen Kandidaten eindeutig identifiziert werden.

Der erarbeitete Entscheidungsbaum stellt eine gute Grundlage dar, wie Testergebnisse generell organisiert werden können. Die gesamte Methode inklusive der Testreihe ist aber zweifelsohne noch ausbaufähig. Es konnte eine Identifikationsrate von 51,6% erzielt werden. Wenn Test 3 wie in Kapitel 5.6 vorgeschlagener Weise angepasst und berücksichtigt wurde, konnte sie auf bis zu 60,9% gesteigert werden. Der Entscheidungsbaum zeigte besonders kritische Bereiche auf, in denen die eindeutige Erkennungsrate sehr gering war, wie beispielsweise bei den mineralischen Granulaten. Dies bietet Ansatzpunkte, wie in Zukunft die nasschemische Methodik gezielt verbessert werden könnte. Eine mögliche Vorgehensweise hierfür wurde für den Fall der mineralischen Granulate exploriert. Sie erwirkte eine signifikante Steigerung der Erkennungsrate.

5.2 Bewertung der Ergebnisse und Resümee

Im Zuge dieser Arbeit konnte gezeigt werden, dass das Gesamtsystem aus der nasschemischen Testreihe in Kombination mit dem erarbeiteten Entscheidungsbaum in seinen Grundzügen zur Granulatidentifikation geeignet ist. Die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse zwischen einzelnen Durchgängen der gleichen Proben zeigte sich als hoch, was die reale Anwendbarkeit unterstreicht. Die Identifikationsrate scheint suboptimal, kann aber unter dem Betrachtungsaspekt, dass es sich um qualitative Tests handelt, als adäquat eingestuft werden. Das erarbeitete Verfahren ist praxisnah und stellt keine großen Anforderungen an Apotheken in Bezug auf vorhandene Ausrüstung oder zusätzliche Ausbildung des Personals.

Der heterogene Ursprung des Ausgangsmaterials der Granulate (pflanzlich, tierisch, mineralisch) macht es praktisch unmöglich, mit einer einzelnen standardmäßigen Testreihe zuverlässig jeden Bereich des Entscheidungsbaumes vollständig aufzuklären. Abhängig von der betrachteten Granulat-Subgruppe bedarf es der Ergänzung neuer, angepasster Tests, während andere gestrichen werden können. Unabhängig von der zugrunde liegenden nasschemischen Testreihe werden deren Ergebnisse jedoch stets in den algorithmischen Entscheidungsbaum integrierbar sein. Die übernommene Standardarbeitsanweisung war stark auf die Analytik pflanzlicher Granulate ausgelegt, was angesichts der Tatsache, dass diese Subgruppe auch den größten Teil der insgesamt 329 zu untersuchenden Granulate ausmacht, nämlich knapp 90%, nachvollziehbar ist.

Die in dieser Arbeit genannte Zielsetzung einer laienfreundlichen Identifikationsmethode, die sich auch für die Anwendung im Apothekenalltag eignet, wurde größtenteils erfüllt. Der zweiten Aufgabenstellung einer zweifelsfreien Identifikation der zu untersuchenden Granulate konnte jedoch nur fragmentarisch entsprochen werden. Zusammenfassend kann die erarbeitete Methodik als robust, aber nicht vollständig abgeschlossen beurteilt werden. Die vorliegende Arbeit liefert somit die Basis für zukünftige Optimierungen im Zuge des Projektes.

5.3 Beantwortung der aufgestellten Hypothesen

H1: Die etablierte nasschemische Testreihe besitzt ausreichend Trennschärfe, um die 329 untersuchten TCM-Arzneigranulate eindeutig zu identifizieren, und liefert reproduzierbare, verlässliche Ergebnisse.

Der erste Teil der H1-Hypothese konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht bestätigt werden. Durch Anwendung der übernommenen Testreihe konnten 240 der 465 Granulat-Einträge eindeutig identifiziert werden. Das entspricht einer Identifikationsrate von 51,6%. Werden diese Zahlen von der durch Kategorie-Doppelnennungen entstandenen Daten-Redundanz bereinigt, können 169 der insgesamt 329 untersuchten Granulate erkannt werden. Das entspricht einer Identifikationsrate von 51,4%. Somit kann ein relevanter Anteil erkannt werden, aber bei weitem nicht alle Granulate.

Der zweite Teil der H1-Hypothese konnte teilweise bestätigt werden. Die Testreihe liefert sehr gut reproduzierbare Ergebnisse bei den einzelnen Testreihen-Durchgängen zu demselben Granulat. Wenn aber zwei unterschiedliche Chargen eines Granulates verglichen werden, stimmen die Resultate nicht immer überein. Ein Erklärungsansatz hierfür wird am Ende des Kapitels 5.4 geliefert.

H2: Durch einen algorithmischen Ansatz ist es möglich, einen praxistauglichen Entscheidungsbaum zu erstellen, der die Ergebnisse der Testreihe effizient organisiert und für die maximale Anzahl an Granulaten den optimalen Weg zur eindeutigen Identifizierung darstellt.

Die H2-Hypothese konnte durch die vorliegende Arbeit verifiziert werden. Die algorithmische ID3-Methode fand für jene Granulate, die durch die Testreihe und die optische Unterscheidung eindeutig identifiziert werden können, den optimalen Erkennungspfad, gekennzeichnet durch die minimale Anzahl an benötigten Testergebnissen, um zur eindeutigen Identifizierung zu

gelangen. Der zusätzliche Vorteil, eine beliebig große Anzahl an Testergebnissen organisieren zu können, ergab sich durch die Anwendung ebenfalls.

5.4 Mögliche Begründung kontroverser Ergebnisse

Bei der Auswertung der Testreihen fiel auf, dass die Testergebnisse nur in seltenen Fällen mit dem theoretischen Inhaltsstoffmuster der Ausgangsdrogen korrelieren, das im Fachbuch „Materia Medica“ (Bensky et al., 2004) beschrieben wurde. Dieser Umstand wird vermutlich damit zusammenhängen, dass beim Herstellungsprozess der Granulate hauptsächlich die hydrophilen Anteile der Rohdrogen extrahiert werden. Lipophile Bestandteile hingegen können im Granulat trotz des wässrigen Herstellungsprozesses auch vorkommen, aber nur in geringen Konzentrationen. Dies resultiert daraus, dass gewisse Bestandteile der Rohdrogen apolaren Verbindungen als Lösungsvermittler dienen und ihnen den Übergang in den Extrakt ermöglichen (Information nach mündlicher Befragung von Univ.-Prof. Mag. Dr. S. Glasl-Tazreiter, 16.06.2025). Bei der Herstellung gewisser Granulate gibt es die Praxis, lipophile Stoffgemische wie etwa ätherisches Öl bei der Extraktion aufzufangen und später dem Produkt per Mikroverkapselung erneut zuzuführen. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit war jedoch nicht bekannt, ob und wenn ja bei welchem Granulat dieser Schritt gegebenenfalls erfolgt ist.

Ein weiterer Grund für eine fehlende Korrelation zwischen Testauswertung und theoretischem Inhaltsstoffmuster könnte auf die Hilfsstoffe zurückzuführen sein. Test 3 zeigte fast ausschließlich positive Testergebnisse, wobei nicht jedes Granulat von sich aus reduzierende Substanzen enthalten sollte. Diese Testausgänge werden möglicherweise vom moderat reduzierenden Maltodextrin verursacht, das durch den Herstellungsprozess in jedem Granulat enthalten ist. Doch ob mit diesem Einfluss ein signifikanter Testausschlag, wie er in Abbildung 7 zu sehen ist, erklärt werden kann, bleibt zu beurteilen. Gezeigt wird dieser Umstand am Granulat Gypsum fibrosum, das von Natur aus keine reduzierenden Substanzen enthalten sollte. Um den Einfluss der Hilfsstoffe auf die Testreihe quantifizieren zu können, sollten in zukünftigen Arbeiten auch die zugrunde liegenden Rohdrogen untersucht werden.

Stellenweise können kontroverse Testergebnisse auch durch eine geringe Spezifität der gewählten Tests verursacht werden. Laut SOP soll Test 4 die Anwesenheit von Tanninen in einer Probe feststellen. Als Reagenz wird dafür Eisen(III)-chlorid genutzt, das jedoch generell mit

allen phenolischen Verbindungen reagiert (Serrano et al., 2009). Auch die dunkelgrün-schwarze Verfärbung gilt als unspezifisch und stellt kein Alleinstellungsmerkmal der Reaktion mit Tanninen dar. Folglich kann eine Probe, die laut theoretischem Inhaltsstoffmuster keine Tannine enthalten sollte, trotzdem zu einem positiven Testergebnis führen. Die fehlende Korrelation zwischen theoretischem Hintergrund und praktischen Beobachtungen wird in der Arbeit von C. Duftschmid, B.Sc. ausführlich diskutiert (Duftschmid, 2026 in Bearbeitung).

Eine mögliche Störquelle stellen auch die verwendeten Reagenzien dar. Für Test 5 und 6 der SOP wurden die Proben mit 2N Natronlauge versetzt. Dabei konnte beobachtet werden, dass die Eigenfarbe der Granulatlösung stärker reduziert wurde, als es durch Verdünnungseffekte allein erklärbar wäre. Hierfür können zwei Effekte verantwortlich sein. Einerseits ist eine pH-abhängige Verfärbung möglich, wie sie bei Test 5 auf Anthocyane auch erreicht werden soll. Pflanzliche Farbstoffe wie Anthocyane und Flavonoide reagieren sensibel auf Veränderungen des pH-Wertes im Milieu, was einen reversiblen Farbumschlag bewirken kann. Andererseits kann eine Verfärbung aber auch von chemischer Degradation, also von Bleicheffekten, stammen, wenn organische Moleküle oxidativ oder hydrolytisch zerstört werden (Javaid & Qazi, 2019). So kann der beobachtete Farbumschlag auf ein falsch-positives Ergebnis schließen lassen, wenn er durch Bleicheffekte verursacht wurde. Für die Unterscheidung der Granulat-Proben ist dies kein unmittelbarer Nachteil, da die Ergebnisse reproduzierbar sind und nur nach charakteristischen Farb- und Bewertungsmustern der qualitativen Testreihe gesucht wird. Jedoch verleitet ein entsprechendes Testergebnis möglicherweise zu falschen Rückschlüssen bezüglich des Inhaltsstoffmusters der betrachteten Drogen.

Bei der Auswertung der Testergebnisse konnte beobachtet werden, dass sich die bei Test 8 verwendete Menge an Zinkstaub direkt proportional zum beobachteten Farbumschlag bei positivem Testergebnis zu verhalten scheint. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass der Zinkstaub in dieser Reaktion ein wichtiges Reduktionsmittel darstellt. Wenn zu wenig davon zugegeben wird, wird die Reaktion nicht vollständig ablaufen. Stellenweise führte dies zu starken Farbabweichungen zwischen verschiedenen Testausgängen des gleichen Granulates. Eine detaillierte Betrachtung der beteiligten mikrochemischen Vorgänge kann in der Arbeit von P. Grabarski, B.Sc. nachgelesen werden (Grabarski, 2026 in Bearbeitung).

Die innerhalb eines Granulates durchgeführten unabhängigen Testreihen zeigten in den meisten Fällen hohe Reproduzierbarkeit. Zwischen verschiedenen Chargen desselben Granulates traten jedoch vereinzelt deutliche Abweichungen auf: Während *Eucommiae cortex praep.* eine konstante Testreaktion aufwies (Abbildung 8), ergaben sich bei *Aconiti radix lateralis praep.* starke chargenabhängige Unterschiede (Abbildung 9). Unterschiede in diesem Ausmaß würden sich mit Rezepturveränderungen oder alternativen Herstellungsprozessen erklären lassen. Auch das verwendete Ausgangsmaterial kann eine nicht zu unterschätzende Rolle spielen, wobei die beobachteten Abweichungen wahrscheinlich zu drastisch sind, um durch eine natürliche Varianz (bedingt etwa durch Erntezeitpunkt, Klima oder Witterung) der Rohdrogen erklärt zu werden.

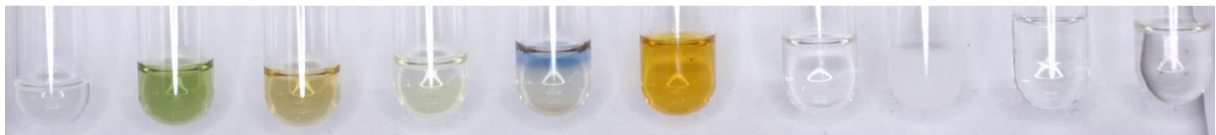


Abbildung 7: Testreihe 2-11 (li.-re.) zu *Gypsum fibrosum*; Test 3, zweite Eprovette von links, zeigt ein klar positives Ergebnis

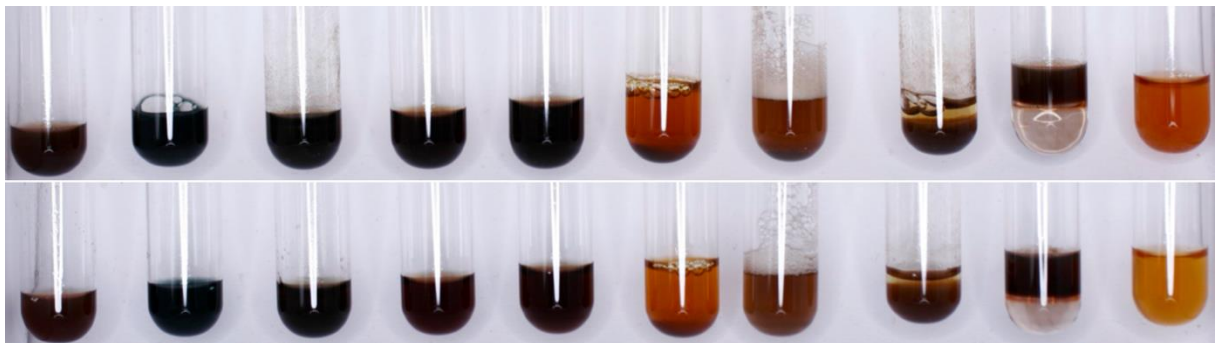


Abbildung 8: Testreihe 2-11 (links-rechts) zu *Eucommiae cortex praep.*: Charge 2020 (oben) vs. Charge 2024 (unten)

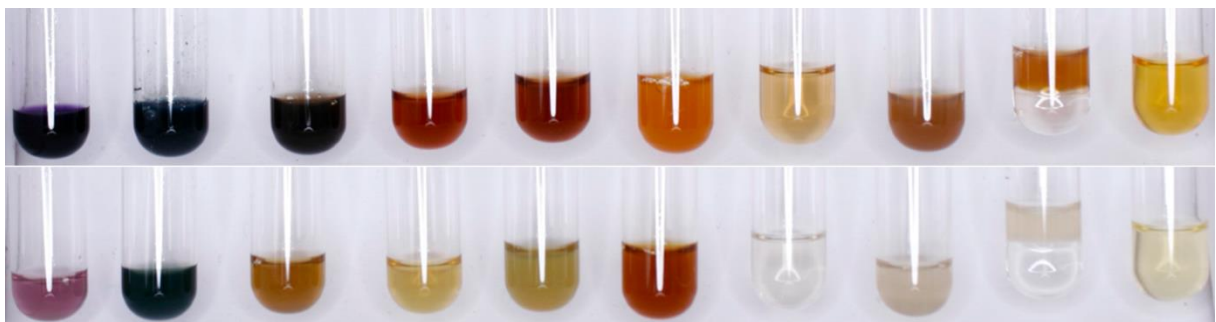


Abbildung 9: Testreihe 2-11 (links-rechts) zu *Aconiti radix lateralis praep.*: Charge 2021 (oben) vs. Charge 2023 (unten)

5.5 Offene Fragen

- **Objektive Farbuordnung:** Eine zentrale offene Frage zur Methodik, welche in dieser Projektarbeit nicht beantwortet werden konnte, thematisiert die Grenzen einer

qualitativen, farbbasierten Bewertungsmethode. Einerseits wurde zwar ein normierter Beurteilungsschlüssel eingeführt, der unter immer gleichbleibenden Bedingungen eine gute Basis für reproduzierbare Ergebnisse liefert. Andererseits wurde nicht quantifiziert, wie stark etwa Unterschiede in den Lichtverhältnissen und in der genauen Durchführung (z.B. zeitsensible Schritte der SOP) oder die subjektive Wahrnehmung des Durchführenden die RAL-Farb-Zuordnung tatsächlich beeinflussen. Hier gibt es unzählige Einflussfaktoren, sodass sogar hinterfragt werden sollte, inwieweit eine objektive Farbzusordnung überhaupt menschlich möglich ist.

- **Verarbeitete Hilfsstoffe:** Der Einfluss der verarbeiteten Hilfsstoffe wurde zwar diskutiert, aber nicht quantifiziert. Testreihen könnten genutzt werden, um den Einfluss von Maltodextrin, Magnesiumstearat und anderen gängigen Granulierungshilfen auf die einzelnen Testreaktionen einzuschätzen. Erstrebenswert könnte auch die Bestimmung von Grenzwerten sein, ab welchen Konzentrationen diese Stoffe signifikanten Einfluss auf die Testergebnisse nehmen.
- **Untersuchte Inhaltsstoffgruppen:** In Kapitel 5.4 wurde bereits die Spezifität der einzelnen Tests infrage gestellt. Darüber hinaus wird für das zukünftige Design von Testreihen von Bedeutung sein, welche genauen chemischen Inhaltsstoffgruppen nun tatsächlich die Testausgänge bestimmen.
- **Erweiterbarkeit der Methode:** Um die praktische Relevanz der Methode zu bestätigen, sollten auch Versuche mit weiteren, noch nicht untersuchten TCM-Granulaten unternommen werden. Selbst wenn durch die 329 berücksichtigten Proben schon ein Großteil der relevanten Substanzen abgedeckt sein sollte, wird es zukünftig weitere Granulate geben, bei denen die erarbeitete Methode greifen muss. Ebenso ist die aus der Theorie postulierte Erweiterbarkeit des Entscheidungsbaumes auf beliebig große Datensätze praktisch zu überprüfen.
- **Praktische Anwendbarkeit:** Der letzte und wahrscheinlich essenziellste offene Punkt ist die kritische Überprüfung der tatsächlichen Umsetzbarkeit der Methode im Apothekenalltag. Ein möglicher Ansatz hierzu wird am Ende von Kapitel 5.6 beschrieben.

5.6 Vorschläge für weitere Optimierungen

- **Detailliertere SOP:** Ein wichtiger Ansatzpunkt für künftige Prozessoptimierung ist die SOP. Eine besonders sinnvolle Erweiterung, wie in Kapitel 4.9 dargestellt, wäre eine Anpassung der SOP an problematische Subgruppen, die aktuell im Entscheidungsbaum noch keine gute Identifikationsrate aufweisen. So könnten vollständig separierte Testreihen etabliert werden, die neben den mineralischen Granulaten gezielt Cluster aufklären, wie beispielsweise Granulate tierischer Herkunft oder Granulatgruppen mit besonders dunkler Lösungsfarbe. Dadurch könnte die Trennschärfe in Bereichen gesteigert werden, wo sie aktuell noch sehr limitiert ist. Zusätzlich könnten weitere Standardisierungen der Durchführung vorgenommen werden. Es sollte eine genaue Regelung zeitlicher Abläufe geben, die Punkte wie Reagenzzugabe, Reaktionszeiten und den Zeitpunkt der Bewertung festschreibt. Dies steigert die Reproduzierbarkeit und reduziert die Abhängigkeit der Ergebnisse vom Durchführenden.
- **Anpassung von Test 3:** Wie bereits angemerkt wurde, sollte Test 3 auf reduzierende Substanzen adaptiert werden. Beispielsweise könnten zukünftige Beurteilungen die Farben der positiven Testausgänge in Blau- und Grüntöne einteilen. Den gemachten Beobachtungen zufolge können die Farben meist eindeutig einer dieser beiden Farbgruppen zugeordnet werden und zusätzlich verhalten sie sich reproduzierbar zwischen den Versuchsdurchgängen. Lediglich bei sehr dunklen Lösungsfarben erweist es sich als schwierig, die Farbtöne verlässlich einzuordnen. Vereinzelt kam es auch zu Mischfarben.
- **Weitere Robustheitstests:** Generell würden die betrachteten Reaktionen von erweiterten Robustheitstests profitieren, wie sie teilweise in den vorangegangenen Projektarbeiten durchgeführt wurden. Versuche mit variierenden Granulatmengen und Reagenzienkonzentrationen würden Rückschlüsse auf die Stabilität der Testergebnisse erlauben. So ließe sich sowohl der Varianzbereich der Ergebnisse als auch die aktuelle Fehlertoleranz bei der Durchführung veranschaulichen.
- **Erweiterung des Entscheidungsbaumes:** Auch der Entscheidungsbaum könnte in Zukunft ausgebaut werden. Es liegen UV-Aufnahmen zu Granulatfarbe, Lösungsfarbe und den Tests 1-11 vor, die in der aktuellen Version des Entscheidungsbaumes nicht berücksichtigt wurden, aber entscheidend zur Unterscheidung beitragen würden. Ebenso könnten

organoleptische Prüfungen zusätzliche verlässliche Unterscheidungsmerkmale schaffen. In manchen Fällen können Granulate am Geruch erkannt werden oder, jedoch nur bei vorsichtig ausgewählten Einzelfällen, auch am Geschmack. Solche Prüfungen eignen sich hervorragend als ergänzende Informationsquelle, welche mit überschaubarem Aufwand verbunden ist.

- **Zusätzliche Methoden:** In absoluten Grenzfällen, in welchen keine verlässliche Differenzierung durch nasschemische oder organoleptische Prüfung möglich ist, könnten weitere analytische Methoden herangezogen werden. Hier bietet sich die Dünnschichtchromatographie an, weil sie ein niedriges Anforderungsprofil hat und somit in jeder Apotheke umsetzbar sein sollte. Zuvor sollte die Durchführbarkeit geprüft werden, denn diese Methode könnte zu zeitaufwendig für den Apothekenalltag sein. Als Alternative könnte auch die IR-Spektroskopie betrachtet werden, die wiederum den Nachteil hat, dass die benötigten Gerätschaften sehr teuer sind und somit nicht in jeder Apotheke zur Verfügung stehen werden. Diese Methoden sollten nicht als Ersatz für die nasschemische Testreihe gesehen werden, sondern als Ergänzung.
- **Künstliche Intelligenz:** Eine KI-gestützte Bildauswertung könnte die Farberkennung und Testbewertung automatisieren und durch eine objektive Klassifikation den Einfluss des Durchführenden weiter reduzieren. Sollte dieser Ansatz praktisch umsetzbar sein, kann auch mit einer erheblichen Zeitersparnis bei der Anwendung der Methode als Eingangskontrolle gerechnet werden.
- **Validierung der Apothekentauglichkeit:** Um die alltägliche Apothekentauglichkeit zu beurteilen, ist als Vorschlag unter den Projektbeteiligten aufgekommen, die gesamte Durchführung der Testreihe samt Auswertung der Ergebnisse mittels Entscheidungsbaum durch unabhängige Dritte praktisch zu erproben. Diese Validierung der Anwendbarkeit würde eine Bewertung des Zeitaufwandes und der Verständlichkeit der Methodik erlauben, aber auch praktische Hürden identifizieren, welche bislang noch unerkannt geblieben sind. Eine solche Erprobung würde Klarheit darüber liefern, ob die Methode verlässlich funktioniert und eine zweifelsfreie sekundäre Identifikation unter vertretbarem Aufwand erlaubt.

6. Experimenteller Teil: Materialien und Methoden

6.1 Verwendetes Probenmaterial

Sämtliches in dieser Arbeit verwendete Probenmaterial wurde von der Firma Tianjiang Pharmaceutical Co. Ltd., China, produziert und durch die Firma Plantasia GmbH, A-5114 Göming, nach Österreich importiert und für Versuche zur Verfügung gestellt.

Tabelle 7 enthält eine Auflistung der 30 Granulate, die im Zuge der vorliegenden Arbeit mit der beschriebenen nasschemischen Testreihe untersucht wurden. Im Abschnitt A1 des Anhangs wird eine vollständige Liste der 329 im Zuge dieses Projektes untersuchten Granulate zur Verfügung gestellt.

Tabelle 7: Granulate, die in dieser Arbeit mit der Testreihe untersucht wurden; inkl. Chargennummer und Voucher Number

Granulatname	Chargennummer	Voucher Number
Acanthopanax cx.	2005562	P050/189
Artemisiae argyi fo.	2102513	P011/10
Aurantii fr. immaturus praep.	2108545	P081/197
Bupleuri rx.	2108546	P081/198
Carthami fl.	23100105	P103/222
Cicadae periostracum	23100025	P024/11
Cimicifugae rh.	2102510	P011/13
Gypsum fibrosum	21081043	P101/300
Hordei fr. germinatus praep.	2108543	P081/202
Jujubae fr.	2009516	P090/380
Lophateri hb.	2005551	P050/212
Lycii fr.	2105548	P051/137
Margaritiferae co. praep.	220301060	P082/132
Myristicae sm.	2309517	P093/198
Ophiopogonis rx.	2108540	P081/207
Oroxylis sm.	2304530	P093/199
Paeoniae rx. rubra	2106505	P051/145
Perillae fr. praep.	2001539	P129/410
Pinelliae rh. praep.	2102504	P011/24
Platycladi cc.	2003521	P050/218
Portulacae hb.	2005550	P050/223
Pyrrosiae fo.	24080495	P084/196
Sanguisorbae rx. carb.	2009507	P090/385
Saposhnikoviae rx.	2102508	P011/27
Sargassum	2009522	P090/386
Scutellariae barbatae hb.	2005526	P050/228
Smilacis glabrae rh.	2106502	P051/149
Vitidis fr. praep.	2005560	P050/235
Zanthoxyli pc.	2005533	P050/236
Ziziphi spinosae sm. praep.	2005565	P050/237

6.2 Verwendete Geräte und Software

Tabelle 8: Auflistung der verwendeten Geräte und Software

Anwendung	Model, Typbezeichnung	Seriennummer	Zusatzinformation
Glas-Eprouvetten	Rotilabo®-Reagenzgläser, dünnwandig		Volumen: 25 ml
Ionenaustauscher	USF Water Purification P18	912049	Deionisiertes Wasser
	Seradest LFM (f. schlutheiss)		Messgerät
Laptops und Computer	MacBook - macOS 10.5.8		Computer Labor
	Acer B193, 1280 x 1024 px	ETLBS08102123042E44233	Bildschirm Labor
	Desktop-PC - Windows 10 Pro 64 Bit		Computer Labor
	MacBook Pro (2019) - 2,4 GHz Quad-Core Intel Core i5 - macOS Sequoia Version 15.6.1 - Intel Iris Plus Graphics 655 (1536 MB)		Computer privat, gesamte Bildauswertung auf diesem Rechner
Lichtring	Samtian RL-12/RL-18 Ring Light		Farbtemperatur: 5500 K
Messpipetten	BLAUBRAND® Typ 2		Volumina: 10 ml, 5 ml Teilung: 0,1
RAL-Farben	RAL-Farbkalender K7 classic, glänzend	ISBN 978-3-949161-12-4	Ausgabe 2024
Tageslicht-Aufnahmen	Kamera Canon EOS 20D: - ISO 100 - Blendenwert F 6.3 - Belichtungszeit 1/30	0630303441	Manueller Aufnahmemodus
	Objektiv Canon Compact MacroLens EF 50 mm	286206	Max. Abbildungsmaßstab 1:2
Ultraschall-Bad	Bandelin Sonorex Digitec DT 100 H	3230.00142740.023	Frequenz: 35 kHz
UV-Aufnahmen	CAMAG TLC Visualizer	150523	UV 366 nm
Waagen	Mettler Toledo PB303-S	1126163415	Ablesbarkeit: 1 mg
	Mettler AE 260 DeltaRange AE260-S	G74940	Ablesbarkeit: bis 60 g: 0,1 mg ab 60 g: 1 mg
Software	visionCats		UV-Licht-Aufnahmen
	Canon EOS Utility, Version 1.2.0.7		Tageslicht-Aufnahmen
	Microsoft Excel, Word, PowerPoint V16		Computer privat
	LibreOffice Writer, Calc V6.1.4.2 (x64)		Computer Labor
	Draw.io, Version 28.2.8		Grafische Darstellung Entscheidungsbaum
Stoppuhr/Timer	Apple iPhone 14 Pro Max Betriebssystem iOS 18.6.2		iPhone Timer-Funktion

6.3 Verwendete Reagenzien, Reinsubstanzen und Lösungsmittel

6.3.1 Reagenzien und Lösungsmittel der Standardarbeitsanweisungen

Tabelle 9: Auflistung der verwendeten Reagenzien und Lösungsmittel für die Testreihe 1-12

Bezeichnung	Hersteller	Reinheit bzw. Qualität	Charge
Aluminiumchlorid	Roth	≥ 98%, wasserfrei	241161146
Bismut(III)-nitrat, basisch	Roth	≥ 71%, p.a., basisch	261173716
Blei(II)-acetat, basisch	Roth	≥ 33%, p.a., ACS	465236559
Deionisiertes Wasser	–	–	–
Eisen(III)-chlorid, kristallin	Fluka AG	puriss. p.a.	258912
Essigsäure, konz.; Eisessig	Roth	Ph. Eur., reinst	504222073 + 359286813
Ethanol 96% (v/v)	SAFC	Ph. Eur., BP, ChP	11379971 504
Isopropanol	Gatt-Koller	PHE 7.0	5201/11124912
Kaliumjodid	E. Merck	Ph. Eur., reinst	310BB243840
Kupfersulfat	Laborchemikalie	–	–
Methanol	VWR	–	220120C001
Molybdätphosphorsäure Hydrat	Roth	p.a.	143197068
Natriumhydroxid	Roth	≥ 98%, Ph. Eur.	265230360
Ninhydrin	Roth	≥ 99%, p.a.	183197676
Salpetersäure, konzentriert	Roth	68%, reinst	264356679
Salzsäure, konzentriert	Sigma Aldrich Roth	puriss. p.a. 37% rauchend, reinst	SZBB0600V 463347467
Schwefelsäure, konzentriert	Roth Roth	Rotipuran® 96%, p.a. 95-98%, Ph. Eur.	093334995 453343714
Zinkstaub	Roth	≥ 98%, Korngröße < 63 µm	496249169

Tabelle 10: Auflistung der verwendeten Reagenzien und Lösungsmittel für die Testreihe 13-18

Bezeichnung	Hersteller	Reinheit bzw. Qualität	Charge
Ammoniummolybdat Tetrahydrat	Fluka Chemie	puriss. p.a. ACS > 99,0%	347836/1 1095
Barium(II)-chlorid Dihydrat	Roth	≥ 99%, p.a. ACS, ISO	404327775
Deionisiertes Wasser	–	–	–
Ethanol 96% (v/v)	SAFC	Ph. Eur., BP, ChP	I1379971 504
Essigsäure, konz.; Eisessig	Roth	Ph. Eur., reinst	504222073 + 359286813
Kaliumhexacyanoferrat(II) Trihydrat (= gelbes Blutlaugensalz $K_4[Fe(CN)_6]$)	Roth	≥ 99%, p.a. ACS, ISO	293199723
Kaliumhexacyanoferrat(III) (= rotes Blutlaugensalz $K_3[Fe(CN)_6]$)	Laborchemikalie	–	–
Morin-Standard	Fluka Chemie	für Mikroskopie	257289 1185
Natriumhydroxid	Roth	≥ 98%, Ph. Eur.	265230360
Salpetersäure, konzentriert	Roth	68%, reinst	264356679
Salzsäure, konzentriert	Sigma Aldrich Roth	puriss. p.a. 37% rauchend, reinst	SZBB0600V 463347467
Titangelb	Laborchemikalie	–	–

6.3.2 Reinsubstanzen und Lösungsmittel der Blindproben

Tabelle 11: Auflistung der verwendeten Reinsubstanzen und Lösungsmittel für die Blindproben

Bezeichnung	Hersteller	Reinheit bzw. Qualität	Charge
Aescin	–	–	–
Ascorbinsäure	Apoforce	–	23282P04
Berberin	Sigma Chemical CO	–	32H0130
Chinin	E. Merck	–	59617
Ethanol 96% (v/v)	SAFC	Ph. Eur., BP, ChP	I1379971 504
Gerbsäure	–	–	–
Knochenleim	Kalk-Laden Kalk-Schule Kenter	–	KL50
L-Glutaminsäure	E. Merck	reinst	731K4312590
Magnesiumstearat	Gatt-Koller	PHE 10.6	22J02150
Maltodextrin	BKMAM LAB	–	3012404004
Methanol	VWR	–	220120C001
Quercetin	E. Merck	krist.	9605930
Rhein	Roth	–	174154100
Rutin	E. Merck	krist., reinst	531K1014517
Stigmasterin	E. Merck	95%	K1478143
Wasserfarben	Pelikan	Qualitätsfarben	DF735/12 802116

6.4 Verwendete Methoden

6.4.1 Standardarbeitsanweisung der nasschemischen Testreihe 1-12

In vorliegender Arbeit wurde nach der SOP-Version vom 28.11.2023 gearbeitet. Pro Durchgang wurden stets 10 Granulate parallel untersucht. Zur allgemeinen Probenvorbereitung wurden die Granulate zu je 1 g in Glas-Eprouvetten genau eingewogen und bei Tageslicht und unter UV-Licht ($\lambda = 366 \text{ nm}$) fotografiert. Anschließend wurde das Granulat mit 15 ml kochendem, deionisiertem Wasser versetzt und mithilfe eines Spatels wurde kontrolliert, dass das gesamte Granulat mit Wasser benetzt ist. Die Epruvette wurde 10 min in einem siedenden Wasserbad erhitzt, um eine vollständige Auflösung des Granulates sicherzustellen. Abschließend wurde die Lösung in einem kalten Wasserbad auf Raumtemperatur gekühlt.

Für den **Saponin-Test (Test 1)** wurde die Glas-Eprouvette mit der gesamten Granulat-Lösung verschlossen und für 10 s händisch kräftig geschüttelt. Nach einer Wartezeit von 10 min, in welcher die Epruvette ruhen gelassen wurde, wurde die verbliebene Schaumsäule bewertet. Zu diesem Zeitpunkt wurden die Lösungsfarbe und die Schaumhöhe (Ergebnis des Tests 1) fotografiert und nach erfolgter Dokumentation die Granulatlösung per Messpipette in 11 unbenutzte Epruvetten aufgeteilt. Jede Epruvette wurde mit 1 ml Granulatlösung befüllt.

Für den **Aminosäure-Test (Test 2)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen 1%-Ninhydrin-Lösung versetzt und anschließend für 5 min im siedenden Wasserbad erhitzt. Vor der Beurteilung wurde die Epruvette in einem kalten Wasserbad auf Raumtemperatur gekühlt. Zur Herstellung der 1%-Ninhydrin-Lösung wurde 1 g Ninhydrin in 100 ml Isopropanol gelöst.

Für den **Test auf reduzierende Substanzen (Test 3)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen 5%-Molybdätosphorsäure-Lösung versetzt und anschließend für 5 min im siedenden Wasserbad erhitzt. Vor der Beurteilung wurde die Epruvette in einem kalten Wasserbad auf Raumtemperatur gekühlt. Zur Herstellung der 5%-Molybdätosphorsäure-Lösung wurden 5 g Molybdätosphorsäure Hydrat in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Tannin-Test (Test 4)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen Eisen(III)-chlorid-Lösung versetzt. Zur Herstellung der Eisen(III)-chlorid-Lösung wurden 5 g Eisen(III)-chlorid in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Anthrachinon-Test (Test 5)**, auch Modifizierte Bornträger-Reaktion genannt, wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen 2N Natronlauge versetzt. Zur Herstellung der 2N Natronlauge wurden 8 g Natriumhydroxid in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Biuret-Protein-Test (Test 6)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen 2N Natronlauge und anschließend mit 10 Tropfen 1%-Kupfersulfat-Lösung versetzt. Zur Herstellung der 1%-Kupfersulfat-Lösung wurde 1 g Kupfersulfat in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Dragendorff-Alkaloid-Test (Test 7)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 1 ml Dragendorff-Reagenz versetzt. Zur Herstellung des Dragendorff-Reagenz wurden unmittelbar vor der Anwendung 1 ml Lösung A mit 1 ml Lösung B, 4 ml Eisessig und 20 ml deionisiertem Wasser gemischt. Für Lösung A wurden 0,85 g basisches Bismut(III)-nitrat in 10 ml Eisessig und 40 ml deionisiertem Wasser gelöst. Für Lösung B wurden 8 g Kaliumjodid in 30 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **modifizierten Shinoda-Flavonoid-Test (Test 8)** wurde in 1 ml der Granulatlösung eine Spatelspitze Zinkstaub gegeben und danach vorsichtig (Achtung: Schaumbildung) mit 1 ml rauchender konzentrierter Salzsäure versetzt.

Für den **Bleiacetat-Flavonoid-Test (Test 9)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 10 Tropfen 10%-Bleiacetat-Lösung versetzt. Zur Herstellung der 10%-Bleiacetat-Lösung wurden 10 g basisches Blei(II)-acetat in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst. Anschließend wurde so viel Eisessig zugegeben, bis die Lösung klar wurde. Aufgrund der Zeitsensibilität wurde Test 9 stets als vorletzter in der Testreihe durchgeführt, kurz vor der Fotodokumentation.

Für den **Steroid-/Triterpen-Salkowski-Test (Test 10)** wurde 1 ml der Granulatlösung vorsichtig mit 1 ml konzentrierter Schwefelsäure unterschichtet, um ein Zwei-Phasen-System zu bilden. Aufgrund der hohen Zeitsensibilität des Testergebnisses wurde Test 10 stets als letzter in der Testreihe durchgeführt, unmittelbar vor der Fotodokumentation.

Für den **Berberin-Test (Test 11)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 1 ml konzentrierter Salpetersäure versetzt.

Für den **Fluoreszenz-Test (Test 12)** wurde 1 ml der Granulatlösung mit 1 ml 1%-Aluminium(III)-chlorid-Lösung versetzt. Zur Herstellung der 1%-Aluminium(III)-chlorid-Lösung wurden 0,5 mg Aluminium(III)-chlorid in 50 ml Ethanol 96% (v/v) gelöst.

Im Anschluss an jede durchgeführte Testreihe wurden die Epruvetten der Tests 2-11 bei Tageslicht und unter UV-Licht ($\lambda = 366 \text{ nm}$) fotografiert, während das Ergebnis von Test 12 ausschließlich unter UV-Licht ($\lambda = 366 \text{ nm}$) dokumentiert wurde.

6.4.2 Standardarbeitsanweisung der mineralischen Testreihe 13-18

Um die mineralische Testreihe zu konzipieren, wurde das Dokument „Identification of inorganic granules“, erstellt von der Firma Plantasia GmbH, in der Version vom 22.04.2021 herangezogen und ausgebaut. Zur Erhöhung der Lösungsgeschwindigkeit der Granulate wurden stellenweise ein siedendes Wasserbad und ein Ultraschallbad verwendet.

Für den **Test auf Sulfate (Test 13)** wurden 0,5 g des Granulates in einer Epruvette in 4,5 ml deionisiertem Wasser und 1,5 ml konzentrierter Salzsäure gelöst. Die Lösung wurde für 10 min ruhen gelassen und anschließend mit 10 Tropfen 10%-Barium(II)-chlorid-Lösung versetzt. Zur Herstellung der 10%-Barium(II)-chlorid-Lösung wurden 0,5 g Barium(II)-chlorid Dihydrat in 5 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Test auf Eisen-Ionen (Test 14.1/14.2)** wurden 0,5 g des Granulates in einer Epruvette in 1,5 ml deionisiertem Wasser und 0,5 ml konzentrierter Salzsäure sauer aufgeschlossen. Die Epruvette wurde für 5 min im siedenden Wasserbad erhitzt und danach auf Raumtemperatur gekühlt. Unmittelbar im Anschluss wurden 20 Tropfen einer 2%-Kaliumhexacyanoferrat(II)-Lösung bzw. einer 2%-Kaliumhexacyanoferrat(III)-Lösung hinzugegeben. Zur Herstellung der 2%-Kaliumhexacyanoferrat-Lösungen wurden 0,2 g Kaliumhexacyanoferrat(II) bzw. Kaliumhexacyanoferrat(III) in 10 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Test auf Carbonate (Test 15)** wurden 0,5 g des Granulates in einem Mörser pulverisiert und in eine Epruvette überführt. Anschließend wurde 1 ml konzentrierte Salzsäure aufgetropft. Aufgrund der Zeitsensibilität der Gasentwicklung, welche ein positives Testergebnis anzeigt, wurde Test 15 stets als letzter in der Testreihe durchgeführt, unmittelbar vor der Fotodokumentation.

Für den **Test auf Phosphate (Test 16)** wurden 0,5 g des Granulates in einem Mörser pulverisiert und in eine Epruvette überführt. Anschließend wurden 1 ml konzentrierte Salpetersäure und 1 ml 8%-Ammoniummolybdat-Lösung hinzugegeben. Um die 8%-Ammoniummolybdat-Lösung herzustellen, wurden 8 g Ammoniummolybdat Tetrahydrat in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Test auf Magnesium-Ionen (Test 17)** wurden 0,1 g des Granulates in einem Mörser pulverisiert und in eine Eprovette überführt. Das Pulver wurde mit 2,5 ml deionisiertem Wasser versetzt und mit 5 Tropfen 10%-iger Salzsäure angesäuert. Anschließend wurde 1 Tropfen einer 0,1%-Titangelb-Lösung hinzugegeben und mit 10 Tropfen einer 2N Natronlauge neutralisiert. Zur Herstellung der 10%-igen Salzsäure wurden 22,7 ml konzentrierte Salzsäure mit deionisiertem Wasser im Messkolben auf 100 ml aufgefüllt. Zur Herstellung der 1%-Titangelb-Lösung wurden 0,01 g Titangelb in 10 ml deionisiertem Wasser gelöst. Zur Herstellung der 2N Natronlauge wurden 8 g Natriumhydroxid in 100 ml deionisiertem Wasser gelöst.

Für den **Test auf Aluminiumsalze (Test 18)** wurden 0,5 g des Granulates in einer Eprovette in 5 ml 2M Essigsäure gelöst. Anschließend wurden 5 ml Morin-Lösung hinzugegeben. Zur Herstellung der 2M Essigsäure wurden 5,68 ml Eisessig mit deionisiertem Wasser im Messkolben auf 50 ml aufgefüllt. Zur Herstellung der Morin-Lösung wurde eine Spatelspitze von festem Morin-Standard in 10 ml Ethanol 96% (v/v) gelöst.

Im Anschluss an jede durchgeführte Testreihe wurden die Eprovetten der Tests 13-18 bei Tageslicht und unter UV-Licht ($\lambda = 366 \text{ nm}$) fotografiert.

6.4.3 Aufbau der Tageslicht-Fotoapparatur

Der Aufbau der Tageslicht-Fotoapparatur wurde unverändert aus den vorangegangenen Arbeiten übernommen, um die Vergleichbarkeit aller Tageslicht-Aufnahmen des Projektes zu gewährleisten. Der Aufbau ist schematisch dargestellt in Abbildung 10.

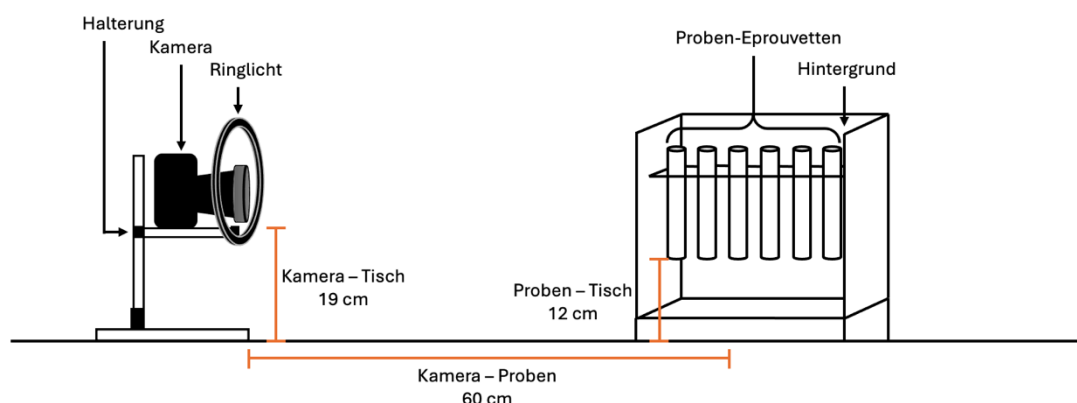


Abbildung 10: Schematischer Aufbau der Tageslicht-Foto-Apparatur samt aller relevanten Abstände; nicht maßstabsgetreu

Literaturverzeichnis

- Bensky D., Clavey S., Stöger E. (2004) Chinese Herbal Medicine: Materia Medica. 3. Auflage, Eastland Press, Inc., Seattle, Washington.
- Duftschnid C. (präliminärer Titel) Identitätsprüfung von TCM-Granulaten mit Hilfe nasschemischer Verfahren und Beurteilung der Korrelation zwischen Testergebnissen und Inhaltsstoffen. Masterarbeit, Universität Wien, 2026 in Bearbeitung
- Ebert P. (2026) Forschungsdaten zur Masterarbeit "Etablierung strukturierter Entscheidungsprozesse zur validen Identifizierung und Differenzierung von TCM-Extraktgranulaten". PHAIDRA, Universität Wien. Verfügbar unter: <https://phaidra.univie.ac.at/o:2344208>
- Grabarski P. (präliminärer Titel) Nasschemische Mikroreaktionen zur sekundären Identifizierung von Arzneimittelgranulaten der Traditionellen Chinesischen Medizin. Masterarbeit, Universität Wien, 2026 in Bearbeitung
- Hssina B., Merbouha A., Ezzikouri H., Erritali M. (2014) A comparative study of decision tree ID3 and C4.5. *Int. J. Adv. Comput. Sci. Appl.* 4(2), 13-19. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.14569/SpecialIssue.2014.040203>
- Javaid R., Qazi U.Y. (2019) Catalytic Oxidation Process for the Degradation of Synthetic Dyes: An Overview. *Int. J. Environ. Res. Public Health* 16(11), 2066, 1-27. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.3390/ijerph16112066>
- Österreichische Apothekerkammer (2005) Apothekenbetriebsordnung 2005. *Österreichische Apothekerkammer*. Verfügbar unter: <https://www.apothekerkammer.at/infothek/rechtliche-hintergruende/apothekenrecht/apothekenbetriebsordnung-2005-abo-2005#%C2%A77>, abgerufen am 13.08.2025
- Serrano J., Puupponen-Pimiä R., Dauer A., Aura A., Saura-Calixto F. (2009) Tannins: Current knowledge of food sources, intake, bioavailability and biological effects. *Mol. Nutr. Food Res.* 53(S2), 310-329. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.1002/mnfr.200900039>
- Shannon C.E. (1948) A Mathematical Theory of Communication. *Bell Syst. Tech. J.* 27(3), 379-423. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>
- Simmer K. (präliminärer Titel) Entwicklung nasschemischer Methoden zur Identitätsprüfung von TCM-Granulaten. Masterarbeit, Universität Wien, 2026 in Bearbeitung
- Sun X. (2025) Advantages and Application Prospects of Traditional Chinese Medicine Granules. *Proc. Anticancer Res.* 9(1), 8-13. Verfügbar unter: <https://doi.org/10.26689/par.v9i1.9453>
- Ulqinaku M., Ktona A. (2023) Entropy-Based Decision Trees. *J. Nat. Sci.* 34, 149-167.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Granulatfarben der Proben 1325-1334 (links-rechts) unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)	8
Abbildung 2: Lösungsfarben und Test 1 der Proben 1325-1334 (links-rechts) unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)	8
Abbildung 3: Durchgeführte Testreihe 2-11 der Probe 1326 Ophiopogonis rx. unter Tageslicht (oben) und UV 366 nm (unten)	8
Abbildung 4: Stammlösung pro Farbkategorie mit (links) und ohne (rechts) Aescin bei Test 1 direkt nach dem Schütteln.....	14
Abbildung 5: Stammlösung pro Farbkategorie mit (links) und ohne (rechts) Aescin bei Test 1 nach 10 min Wartezeit.....	14
Abbildung 6: Kategorie-Übersicht des Entscheidungsbaumes nach den ersten 3 optischen Bewertungsschritten	20
Abbildung 7: Testreihe 2-11 (li.-re.) zu Gypsum fibrosum; Test 3, zweite Epruvette von links, zeigt ein klar positives Ergebnis.....	31
Abbildung 8: Testreihe 2-11 (links-rechts) zu Eucommiae cortex praep.: Charge 2020 (oben) vs. Charge 2024 (unten).....	31
Abbildung 9: Testreihe 2-11 (links-rechts) zu Aconiti radix lateralis praep.: Charge 2021 (oben) vs. Charge 2023 (unten).....	31
Abbildung 10: Schematischer Aufbau der Tageslicht-Foto-Apparatur samt aller relevanten Abstände; nicht maßstabsgetreu.....	41
Abbildung 11: Auszug aus der Gesamtliste der Testbewertungen	66
Abbildung 12: Auszug aus der Rechentabelle: Beispiel "Rechenblock", der alle relevanten Berechnungen für den IG enthält.....	69
Abbildung 13: Auszug aus der Rechentabelle: Beispiel Gesamtübersicht der erzielten Informationsgewinne	69

Hinweis zu den Bildrechten:

Sämtliche Bildrechte der in dieser Arbeit verwendeten Abbildungen liegen bei der Plantasia GmbH, Göming, Österreich, oder beim Autor selbst. Zur Verwendung der abgebildeten Aufnahmen wurde von der Plantasia GmbH zugestimmt. Sollte dennoch eine Urheberrechtsverletzung bekannt werden, wird um entsprechende Mitteilung ersucht.

Anhang

Inhaltsverzeichnis

A0. Abkürzungsverzeichnis	45
A1. Gesamtliste der Granulate	46
A2. Authentischer Vergleich: Blindproben	51
A3. Authentischer Vergleich: Positivbeispiele	65
A4. Liste der Testauswertungen	66
A5. Excel-Berechnung der Entscheidungsbaum-Logik	67
A6. Vollständiger Entscheidungsbaum.....	70

Hinweis zu ergänzenden Forschungsdaten:

Zusätzliche Forschungsdaten, die aufgrund ihres Umfangs nicht in schriftlicher Form abgebildet werden, wie in den Abschnitten A4 und A5 beschrieben, wurden dauerhaft und frei zugänglich über das digitale institutionelle Repositorium der Universität Wien (PHAIDRA) zur Verfügung gestellt. Sie können unter dem hier angeführten Link abgerufen werden:
<https://phaidra.univie.ac.at/o:2344208>

A0. Abkürzungsverzeichnis

Aq. pur.	Aqua purificata	Kand.	Kandidat
B	Blau (Farbkategorie)	LF	Lösungsfarbe
bb.	bulbus	LF-Kat.	Lösungsfarben-Kategorie
BG	Beige (Farbkategorie)	MB (M.Braun)	Mittelbraun (Farbkategorie)
carb.	carbonisata, carbonisatum	md.	medulla
cc.	cacumen	MeOH	Methanol
cl.	caulis	NDS	Niederschlag
co.	concha	od.	oder
cx.	cortex	OK	Ocker (Farbkategorie)
DB (D.Braun)	Dunkelbraun (Farbkategorie)	OW (O.White)	Off-White (Farbkategorie)
DD	Dragendorff	pc.	pericarpium
Epi.	Eprouvette	praep.	praeparatum
EtOH	Ethanol	R	Rot (Farbkategorie)
fl.	flos	rh.	rhizoma
fo.	folium	rm.	ramulus
fr.	fructus	rx.	radix
G	Grau (Farbkategorie)	SL	Stammlösung
GF	Granulatfarbe	sm.	semen
GF-Kat.	Granulatfarben-Kategorie	TX	Test Nummer X
Gran.	Granulat	2-Färb.	Zweifärbig (Farbkategorie)
hb.	herba		

A1. Gesamtliste der Granulate

Tabelle 12 zeigt eine vollständige Liste der 329 Granulate, die im Zuge dieses Projektes untersucht wurden. Neben dem lateinischen Namen der Ausgangssubstanz sind die Chargennummer und die Voucher Number angeführt.

Tabelle 12: Vollständige Liste der insgesamt 329 untersuchten Granulate; inkl. Chargennummer und Voucher Number

Granulatname	Chargennummer	Voucher Number
Acanthopanax cx.	2005562	P050/189
Acanthopanax senticosi rx.	2005535	P050/190
Achyranthis rx.	2208551	P082/112
Aconiti rx. lateralis praep.	23050595	P073/150
Aconiti rx. lateralis praep.	2102507	P011/7
Aconiti rx. praep.	2005542	P050/191
Acori tatarinowii rh.	24030625	P034/44
Adenophorae rx.	2208545	P082/113
Agrimoniae hb.	2203571	P032/55
Ailanthi cx. praep.	2009513	P090/370
Akebiae cl.	23050325	P073/100
Albiziae cx.	23100095	P103/218
Albiziae fl.	2208556	P082/114
Alismatis rh.	2208502	P082/115
Allii macrostemonis bb.	2103506	P051/129
Allii macrostemonis bb.	24010105	P024/10
Alpiniae officinarum rh.	2009505	P090/371
Alpiniae oxyphyllae fr. praep.	23110345	P113/250
Amomi fr.	2011534	P011/9
Amomi fr. rotundus	2007541	P090/372
Andrographis hb.	2002512	P010/51
Andrographis hb.	23050335	P073/101
Anemarrhenae rh.	23100075	P103/219
Angelicae dahuricae rx.	2203569	P032/56
Angelicae pubescens rx.	2208552	P082/116
Angelicae sinensis rx. praep.	2208546	P082/117
Angelicae sinensis rx. caudae	2202513	P012/2
Angelicae sinensis rx.	2005537	P050/194
Arcae co. praep.	23100195	P103/220
Arctii fr. praep.	24040235	P044/93
Arecae pc.	23070175	P073/102
Arecae sm.	2105551	P051/130
Arisaema cum Bile	2005534	P070/340
Arisaema cum Bile	2108544	P081/195
Arisaematis rh. praep.	2210511	P092/190
Armeniaca sm. amarum praep.	23060055	P073/103
Artemisiae annuae hb.	2105543	P051/131
Artemisiae argyi fo. carb.	2105518	P081/196
Artemisiae argyi fo.	2102513	P011/10
Artemisiae scopariae hb.	2204703	P082/118
Asparagi rx.	23100065	P103/221
Asteris rx. praep.	24030095	P034/46
Astragali complanati sm.	23070145	P073/104
Astragali complanati sm.	2110522	P101/292
Astragali rx.	2302532	P013/4
Astragali rx. praep.	2102505	P011/11
Atractylodis macrocephalae rh.	2302534	P013/5
Atractylodis macrocephalae rh. praep.	23070155	P073/105
Atractylodis rh. praep.	2208549	P082/119
Aucklandiae rx.	2209509	P112/244
Aucklandiae rx.	2212502	P122/244
Aurantii fr. immaturus praep.	2108545	P081/197
Aurantii fr. praep.	23070085	P073/106
Bambusae cl. in taeniam praep.	23120245	P113/268
Bambusae concretio silicea	24030635	P034/47

Belamcandae rh.	2102511	P011/12
Benincasae sm.	24030175	P034/48
Bombyx batryticatus praep.	2210504	P092/191
Broussonetiae fr.	2210516	P092/192
Bubali cornu	2203572	P032/57
Buddlejae fl.	2006504	P060/297
Bupleuri rx.	2108546	P081/198
Cannabis sm.	23050305	P113/269
Carthami fl.	23100105	P103/222
Caryophylli fl.	2203549	P032/58
Cassiae sm. praep.	2001540	P129/393
Cassiae sm. praep.	2209549	P092/193
Celosiae sm.	2204658	P082/120
Centipediae hb.	2002511	P010/56
Centipediae hb.	2208554	P082/121
Cervi cornu	23100135	P103/223
Chaenomelis fr.	23100115	P103/224
Chebulae fr.	2006507	P060/298
Chrysanthemi fl.	2005531	P050/202
Chrysanthemi indici fl.	2005555	P050/203
Chuanxiong rh.	2202501	P012/4
Cicadae periostracum	23100025	P024/11
Cimicifugae rh.	2102510	P011/13
Cinnamomi cx.	23080095	P083/177
Cinnamomi rm.	2207559	P082/122
Cirsi hb.	2207550	P082/123
Citri exocarpium rubrum	2002516	P010/58
Citri exocarpium rubrum	24011255	P024/12
Citri reticulatae viridae pc. praep.	23040085	P073/107
Citri reticulati pc.	2110508	P101/293
Citri sarcodactylis fr.	23070185	P073/108
Clematidis rx.	23040055	P073/109
Cnidii fr.	2102518	P011/14
Codonopsis rx.	2211606	P112/232
Coicis sm.	2210503	P092/194
Coptidis rh.	2208548	P082/124
Corni fr. praep.	23070115	P073/110
Corydalis rh. praep.	2211608	P112/233
Crataegi fr.	24030145	P034/50
Crataegi fr. praep.	2105546	P051/133
Curculiginis rh.	2002503	P010/60
Curcuma longae rh.	2110501	P101/294
Curcuma rh. praep.	2202515	P012/5
Curcuma rx.	2102502	P011/15
Cuscutae sm.	2202505	P012/6
Cyathulae rx.	2209546	P092/195
Cynanchi atrati rx.	2102506	P011/16
Cynanchi paniculati rx.	2108547	P081/199
Cynanchi stauntonii rh.	2208550	P082/125
Cynomorii hb.	2112519	P012/7
Cyperii rh. praep.	2110505	P101/295
Descurainiae sm.	23110335	P113/251
Dianthi hb.	23100165	P103/225
Dictamni cx.	2102515	P011/18
Dioscoreae hypoglaucae rh.	2009519	P090/376
Dioscoreae rh.	2001523	P129/399
Dipsaci rx.	23070015	P073/111
Drynariae rh. praep.	2207561	P082/126
Eckloniae thallus	2211609	P112/234
Ecliptae hb.	23110355	P113/252
Epimedii hb.	2108536	P081/200
Equiseti hiemalis hb.	2102503	P011/19
Eriobotryae fo. praep.	24030225	P034/52
Eucommiae cx.	23070065	P073/112
Eucommiae cx. praep.	2002517	P010/62
Eucommiae cx. praep.	24030235	P034/53
Eupolyphaga	2110515	P101/296
Euryales sm.	2203573	P032/59
Evodiae fr. praep.	2108539	P081/201

Evodiae fr. praep.	2001541	P129/401
Foeniculi fr. praep.	2111597	P012/8
Forsythiae fr.	2110509	P101/297
Fraxini cx.	2211607	P112/235
Fritillariae cirrhosae bb.	2110513	P101/298
Fritillariae thunbergii bb.	2110504	P101/299
Ganoderma	2009518	P090/379
Ganoderma	24040275	P044/99
Gardeniae fr.	2102517	P011/20
Gastrodiae rh.	2202502	P012/9
Gentianae macrophyllae rx.	23090355	P083/183
Gentianae rx.	2001525	P129/403
Gentianae rx.	2208553	P082/127
Ginkgo sm.	2210515	P092/196
Ginseng rx.	23050295	P073/151
Gleditsiae spina	23070045	P073/113
Gleditsiae spina	2006510	P060/300
Glehniae rx.	23100055	P103/226
Glycyrrhizae rx.	2302535	P013/7
Glycyrrhizae rx. praep.	2208547	P082/128
Gypsum fibrosum	21081043	P101/300
Haematitum praep.	23110375	P113/253
Haliotidis co. praep.	2302539	P023/26
Halloysitum rubrum praep.	2208558	P082/129
Hordei fr. germinatus praep.	2108543	P081/202
Houttuyniae hb.	2210514	P092/197
Imperatae rh.	2108537	P081/203
Indigo naturalis	2205514	P082/130
Inulae fl.	23040075	P073/114
Isatidis fo.	2108548	P081/204
Isatidis rx.	2108510	P081/205
Juglandis sm.	2209552	P092/198
Jujubae fr.	2009516	P090/380
Junci md.	2105544	P051/134
Kaki calyx	24030165	P034/55
Kaki calyx	2009514	P090/381
Kochiae fr.	2110521	P101/301
Lablab sm. album praep.	2212545	P122/245
Leonuri fr.	2202506	P012/10
Leonuri hb.	23040065	P073/115
Ligustici rh.	23100155	P103/227
Ligustri lucidi fr.	2111588	P012/11
Lilii bb.	2211605	P112/236
Linderae rx.	23120195	P113/271
Liquidambaris fr.	2105549	P051/135
Litchi sm.	2001512	P129/407
Longan arillus	2202519	P012/12
Lonicerae cl.	24040195	P044/101
Lonicerae japonicae fl.	2005530	P050/211
Lonicerae japonicae fl.	2208505	P082/131
Lophateri hb.	2005551	P050/212
Luffae fr. retinervus	2105547	P051/136
Lycii cx.	2002515	P010/68
Lycii fr.	2105548	P051/137
Lycopi hb.	2111556	P032/60
Lygodii spora	2209551	P092/199
Lysimachiae hb.	2211610	P112/246
Magnetitum praep.	23090365	P083/184
Magnoliae fl.	2005554	P050/213
Magnoliae officinalis cx.	2203567	P032/61
Mantidis ootheca	2006509	P060/302
Mantidis ootheca	23080055	P083/185
Margaritiferae co. praep.	220301060	P082/132
Massa medicata fermentata praep.	2204709	P082/133
Mastodi fossilia ossis	220201084	P082/134
Mastodi fossilia ossis praep.	23090385	P083/186
Menthae hb.	24030115	P034/56
Meretricis seu Cyclinae co.	2006508	P060/303
Mori cx. praep.	24040215	P044/102

Mori fo.	2102514	P011/22
Mori fr.	2302538	P013/8
Mori rm.	2108549	P081/206
Morindae officinalis rx.	2210517	P112/237
Moutan cx.	23090375	P083/187
Mume fr.	23100125	P103/228
Myristicae sm.	2309517	P093/198
Myrrha praep.	23050285	P083/188
Natrii sulfas	2207552	P082/135
Nelumbinis fo.	2009512	P090/383
Nelumbinis fo.	2208541	P082/136
Nelumbinis sm.	24030155	P034/57
Notoginseng rx.	2110514	P101/302
Notopterygii rh.	2210512	P092/202
Oldenlandiae diffusae hb.	23100045	P113/273
Olibanum praep.	2204655	P082/137
Ophiopogonis rx.	2108540	P081/207
Oroxyli sm.	2304530	P093/199
Ostreae co.	2303561	P073/116
Ostreae co. praep.	220301059	P082/138
Paeoniae rx. alba	2208503	P082/139
Paeoniae rx. alba praep.	24040155	P044/103
Paeoniae rx. rubra	2106505	P051/145
Panacis quinquefolii rx.	2108550	P081/208
Paridis rh.	2110506	P101/303
Patriniae hb.	2105545	P051/138
Perillae cl.	2108532	P081/209
Perillae fo.	2202518	P012/13
Perillae fr. praep.	2001539	P129/410
Persicae sm. praep.	24040265	P044/104
Peucedani rx.	23110315	P113/256
Phaseoli sm.	2108542	P081/210
Phaseoli sm.	2002520	P010/71
Phellodendri chinensis cx.	2208555	P082/140
Pheretima	24012115	P034/58
Phragmitis rh.	2302537	P013/10
Pinelliae rh. praep.	2102504	P011/24
Piperis kadsurae cl. cx.	2105542	P051/140
Piperis kadsurae cl.	2302533	P013/11
Plantaginis sm. praep.	23040095	P073/118
Platicladi cc.	2003521	P050/218
Platycodi rx.	23110305	P113/257
Pogostemonis hb.	2203570	P032/62
Polygalae rx. praep.	2106553	P051/146
Polygonati odorati rh.	2202514	P012/14
Polygonati rh. praep.	2106551	P051/147
Polygoni avicularis hb.	2110519	P101/304
Polygoni cuspidati rh.	2105541	P051/141
Polygoni multiflori rx. praep.	23080065	P083/178
Polygoni multiflori cl.	2202517	P012/15
Polyporus	2210513	P092/203
Poria	21091051	P101/305
Poriae sclerotium paradiscis	23070165	P073/120
Portulacae hb.	2005550	P050/223
Prunellae spica	2207560	P082/141
Pseudostellariae rx.	2106555	P051/148
Psoraleae fr. praep.	2005532	P050/224
Puerariae lobatae rx.	2110518	P101/306
Pulsatillae rx.	2302536	P013/13
Pyrrosiae fo.	24080495	P084/196
Raphani sm. praep.	2006506	P060/304
Raphani sm. praep.	2110511	P101/307
Rehmanniae rx.	2208501	P082/142
Rehmanniae rx. praep.	2110503	P101/308
Rhei rx. et rh.	24040295	P044/105
Rhei rx. et rh. praep.	2110517	P101/309
Rosae laevigatae fr.	2110512	P101/310
Rosae rugosae fl.	2005557	P050/226
Rosae rugosae fl.	2202504	P012/16

Rubi fr.	2102519	P011/26
Salviae miltiorrhizae rx.	2110502	P101/311
Sanguis draconis	2009520	P090/377
Sanguisorbae rx.	1708550	P087/175
Sanguisorbae rx.	2005523	P050/227
Sanguisorbae rx. carb.	2009507	P090/385
Saposhnikoviae rx.	2102508	P011/27
Sappan lignum	2202516	P012/17
Sargassum	2009522	P090/386
Sargentodoxae cl.	1801506	P018/24
Sargentodoxae cl.	2108541	P081/211
Schisandrae chinensis fr. praep.	23070105	P073/119
Schizonepetae hb.	2009511	P090/387
Scolopendra	2202507	P012/18
Scolopendra	24030015	P034/61
Scorpio	2202509	P012/19
Scrophulariae rx.	2202511	P012/20
Scutellariae barbatae hb.	2005526	P050/228
Scutellariae rx.	23050025	P073/121
Sepiae endochoncha	21071033	P101/312
Sesami sm. nigrum	2204708	P082/143
Setariae fr. germinatus praep.	1806563	P078/207
Siegesbeckiae hb.	23080085	P083/179
Sinapis sm. praep.	2006512	P060/306
Smilacis glabrae rh.	2106502	P051/149
Sojae sm. praep.	2006514	P060/307
Sojae sm. praep.	23120215	P113/274
Sophorae flavescentis rx.	2202512	P012/21
Sophorae fl. praep.	23050425	P073/122
Sophorae tonkinensis rx.	2009508	P090/388
Sophorae tonkinensis rx.	23100085	P103/231
Sparganii rh. praep.	2203568	P032/63
Spatholobi cl.	2009510	P090/389
Stachyuri md.	23120235	P113/275
Stellariae rx.	2106552	P051/150
Stemonae rx. praep.	2209547	P092/204
Stephaniae tetrandrae rx.	23070025	P073/123
Stephaniae tetrandrae rx.	2009504	P090/390
Succinum	2207551	P082/144
Talcum	2208506	P082/145
Taraxaci hb.	2110507	P101/313
Taxilli hb.	2208504	P082/146
Toosendan fr. praep.	2209548	P092/205
Trachelospermi cl.	2108535	P081/212
Tribuli fr. praep.	2302506	P113/248
Trichosanthis fr.	2109760	P032/64
Trichosanthis pc.	2202503	P012/22
Trichosanthis rx.	2001526	P129/418
Trichosanthis rx.	2302501	P013/14
Trichosanthis sm. praep.	2001545	P129/419
Tritici fr. levis	23100185	P103/232
Trogopterori faeces praep.	2208557	P082/147
Tsaoko	2006505	P060/309
Typhae pollen	2110520	P101/315
Typhonii rh. praep.	2105540	P051/142
Uncariae rm. cum uncis	24030105	P034/62
Vaccariae sm. praep.	2006513	P060/310
Verbenae hb.	2001530	P129/421
Violae hb.	2005549	P050/234
Vitidis fr. praep.	2005560	P050/235
Xanthii fr. praep.	2202521	P012/23
Zanthoxyli pc.	2005533	P050/236
Zaocys praep.	2202508	P012/24
Zingiberis rh.	2202510	P012/25
Zingiberis rh. praep.	23070035	P073/124
Zingiberis rh. recens	23040715	P073/152
Ziziphi spinosae sm. praep.	2005565	P050/237

A2. Authentischer Vergleich: Blindproben

Bei dem hier bereitgestellten Blindproben-Dokument handelt es sich um eine Sammlung visueller Referenzen, die als authentischer Vergleich für die Auswertung der Granulat-Testergebnisse herangezogen wurde. Dieses Dokument wurde genutzt, um eine direkte Vergleichbarkeit zwischen Positiv- und Negativreaktionen der einzelnen nasschemischen Tests herzustellen.

Das erste Blatt enthält generelle Informationen zur Durchführung der Blindproben und eine Visualisierung der imitierten 6 gängigen Lösungsfarb-Kategorien, wie in Kapitel 4.4.1 beschrieben. Positivproben sind in diesem Dokument mit einem „+“ gekennzeichnet und befinden sich stets in der linken Epruvette einer Farbkategorie; Negativproben sind entsprechend mit einem „–“ gekennzeichnet und in der rechten Epruvette zu finden.

Die darauffolgenden Seiten präsentieren links oben den behandelten Test und Informationen zur entsprechenden Blindprobe, wie sie auch in Tabelle 3 gelistet sind. Rechts oben ist ein Ausschnitt aus der originalen SOP platziert, der die genaue Durchführung des Tests beschreibt (Achtung: bei Test 1 ist noch die obsolete (+)-Bewertung gelistet). Außerdem werden die Tageslicht- und UV-Fotodokumentationen zu den durchgeführten Blindproben samt der Durchführung im Labor beobachteten RAL-Farben gezeigt. UV-Aufnahmen wurden bei einer Wellenlänge von 366 nm aufgenommen und gelten für die Tests 1-11 als Ergänzung, für Test 12 als authentische Referenz. Wenn die Reinsubstanz signifikanten Einfluss auf die Eigenfarbe der Probelösung hatte, wurde dieser in einer zusätzlichen Zeile, beschriftet mit „Vorher“, zum Vergleich dargestellt.

Bei allen bereitgestellten Informationen handelt es sich um qualitative Bewertungen. Einzig bei Test 1 auf Saponine wurde die Schaumhöhe quantifiziert. Die dadurch gefundenen Bewertungsgrenzen wurden jedoch aufgrund des Einflusses der Wasserfarben als unbrauchbar erklärt, wie bereits in Kapitel 4.4.2 erwähnt.

Generelle Information

- **Stammlösung 1:** 200ml Aq.pur. + 100g Maltodextrin + 1g MgStearat
- **Stammlösung 2:** 150ml Aq.pur. + 10g Maltodextrin + 0,01g MgStearat
- Gefärbt in 6 Farben mithilfe von Wasserfarben:
dunkelbraun (DB), braun (BR), rot (R), ocker (O,OK), beige (BG) und farblos (FL)
- Aufbau Fotos generell: Proben beider Farben nebeneinander: + links, - rechts
- + Probe wie im Titel beschrieben, - Probe reine Stammlösung

Stammlösung 1



Test 1: Saponine – 10ml SL2 + 0,01g Aescin
Achtung! Einfluss der **Wasserfarben beachten**
→ siehe Epi farblos

Schaum nach Schütteln, vor Abwartezeit (Minute 0):

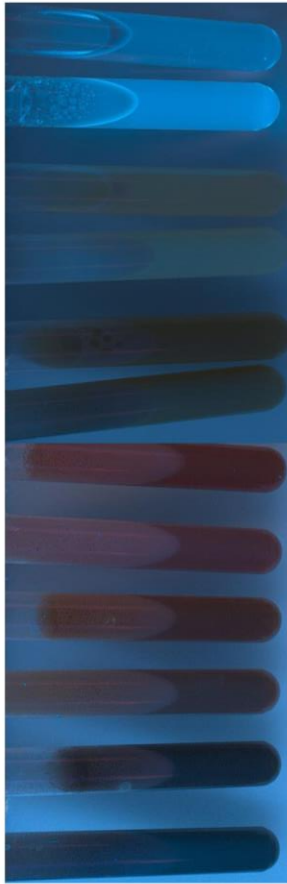


Schaum nach Schütteln, nach Abwartezeit (Minute 10):



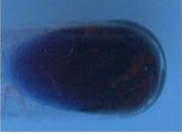
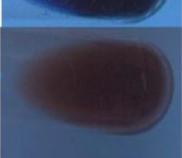
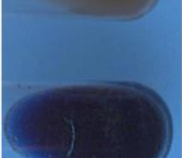
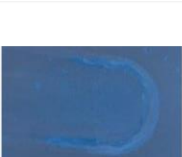
Saponin-Test:
1) **Schaum-Test:**
Das abgekühlte Reagenzglas 1 wird für 10 Sekunden kräftig geschüttelt.
Der Test ist positiv wenn 1-10 cm hoher Schaum gebildet wird, der nach 10 Minuten noch nicht verschwunden ist.
+ Schaum > 1 cm
(+) Schaum ~ 1 cm
- Schaum < 1 cm

Höhe [cm]	DB	BR	R	OK	BG	FL
positiv	+7,5	+6,5	+6,0	+5,7	+5,0	+2,0
negativ	+1,7	+2,5	+3,0	+1,2	-0,3	-0,2



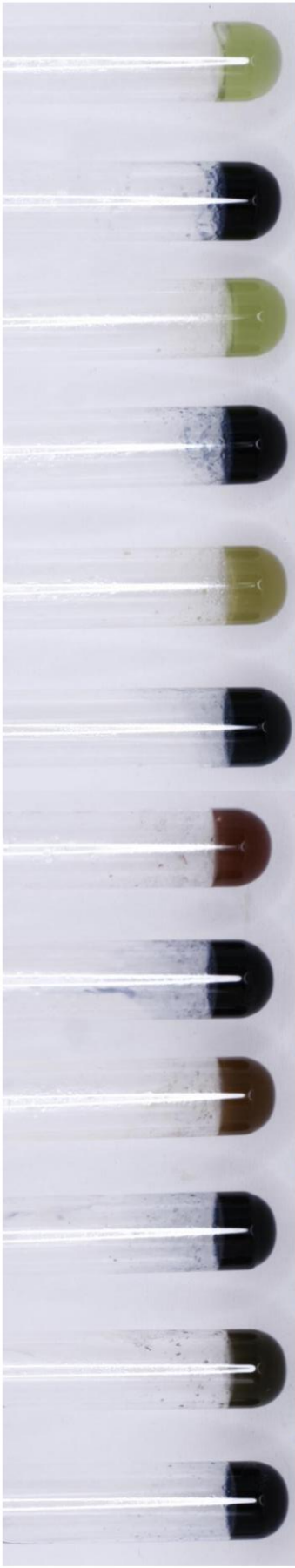
Test 2: Ninhydrin – 1ml SL2 + 0,02g L-Glutaminsäure

Aminosäure-Test:
2) 1% Ninhydrin in 2-Propanol: (Reagenz vor Gebrauch herstellen)
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 2 gegeben, mit 10 Tropfen 1% Ninhydrin-Lösung versetzt und für 5 Minuten im siedenden Wasserbad erhitzt.
Der Test ist positiv wenn sich die Lösung violette verfärbt.
(1 g Ninhydrin in 100 ml Isopropanol gelöst).

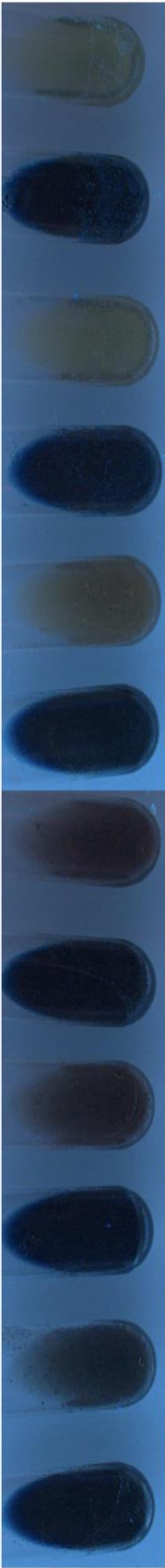
											
DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
5004/4005	8014	4007/4005	8001	4007/4005	8004	4007/4005	1002	4007/4005	1014	4007/4005	4009/FL
											

Test 3: Molybdat – 1ml SL1 + 0,01g Ascorbinsäure

Test auf reduzierende Substanzen:
3) 5% Molybdatophosphorsäure
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 3 gegeben, mit 10 Tropfen 5% Molybdatophosphorsäure-Lösung versetzt und für 5 Minuten im siedenden Wasserbad erhitzt. Der Test ist positiv wenn sich die Lösung grün bis blau verfärbt.
(5 g Molybdatophosphorsäure in 100 ml Wasser dest. gelöst).

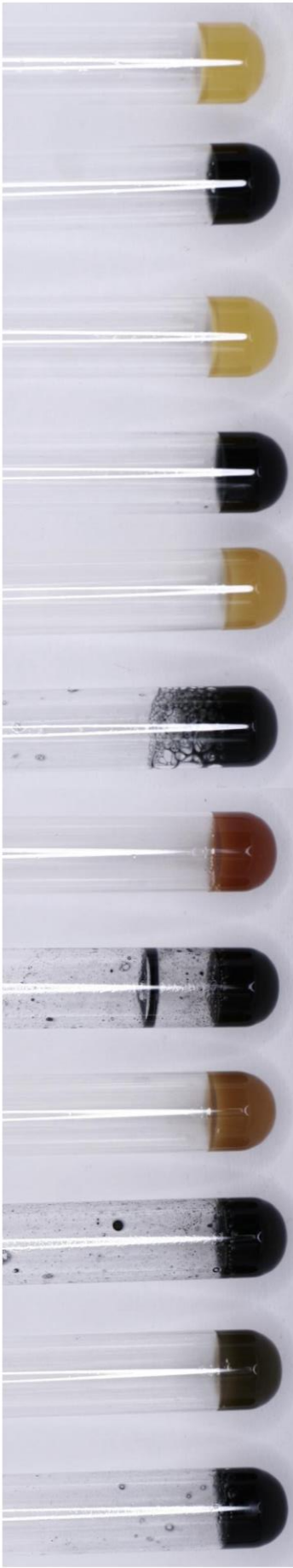


DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
5004/5010	7013	5004/5010	8008	5004/5010	8004	5004/5010	1027 +Grünstich	5004/5010	6039	5004/5010	6039

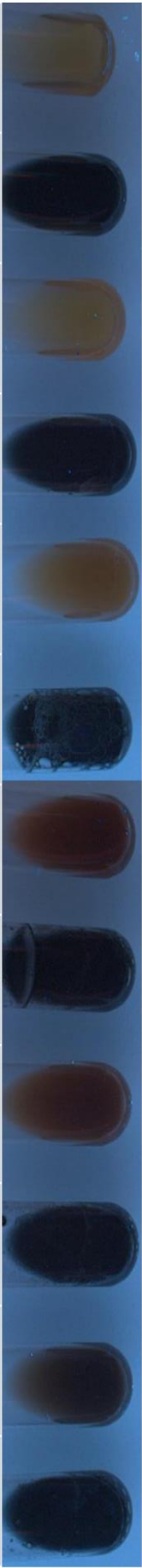


Test 4: FeCl3 – 1ml SL2 + 0,01g Gerbsäure

Tannin-Test:
4) Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 4 gegeben und mit 10 Tropfen 5% Eisen(III)-chlorid-Lösung versetzt.
Der Test ist positiv wenn sich die Lösung dunkelgrün bis schwarz verfärbt.
(5 g Eisen(III)-chlorid in 100 ml Wasser dest. gelöst).



DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
9005/5008	7008 (dunkel)	9005/5008	8001 (biss heller)	9005/5008	8023/8004	9005/6009	1017 + Gelb	9005/6012	1004	9005/6012	1004



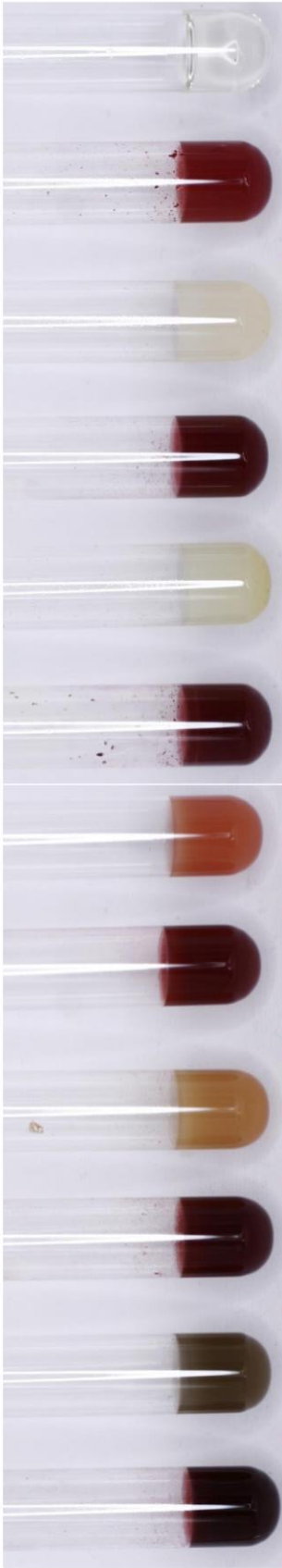
Test 5: NaOH – 1 ml SL2 + (0,004g Rhein + 1ml MeOH)
MeOH für Löslichkeit

Anthrachinon-Test:
5) Modifizierte Bornträger-Reaktion:
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 5 gegeben und mit 10 Tropfen 2N Natronlauge versetzt.
Der Test ist positiv wenn sich die Lösung rot verfärbt.
(8 g NaOH in 100 ml Wasser dest. gelöst = 8%)

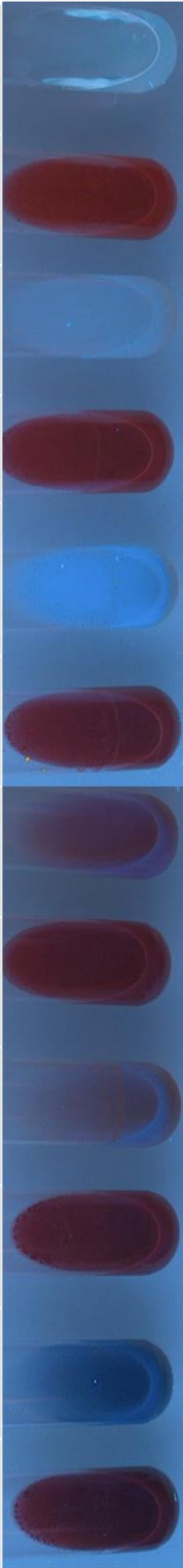
Fotos vorher (Rhein = gelb):



Fotos nachher:

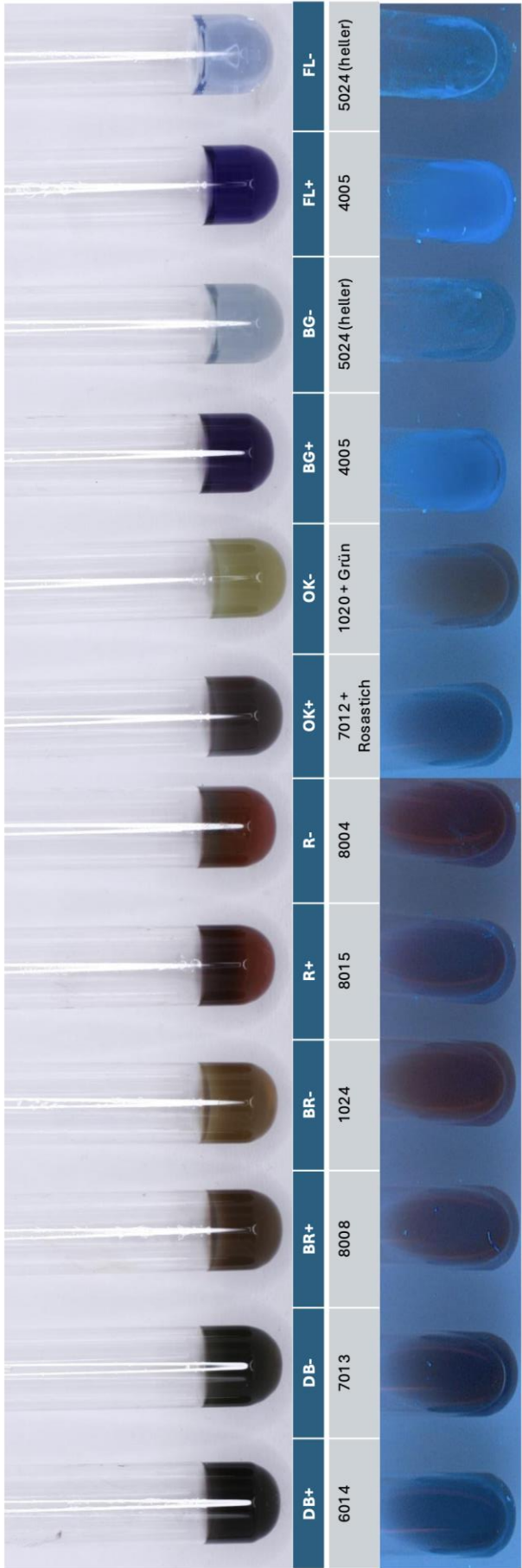


DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
3005	7008	3004	1034	3004	2012	3004	1001/ 1013	3004	1015	3027 + Rot	Farblos



Test 6: CuSO4/NaOH – 1ml SL2 + 0,02g Knochenleim

Protein-Test:
6) Biuret-Test:
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 6 gegeben und mit 10 Tropfen 2N Natronlauge und anschließend mit 10 Tropfen 1% Kupfersulfat-Lösung versetzt. Der Test ist positiv wenn sich die Lösung pink, lila bis violett verfärbt. Der Test ist negativ wenn sich die Lösung blau verfärbt (Vorsicht: Nach einiger Zeit kommt es bei einem negativen Test zu einer Farbveränderung von blau nach rot.)
(1 g CuSO₄ in 100 ml Wasser dest. gelöst).



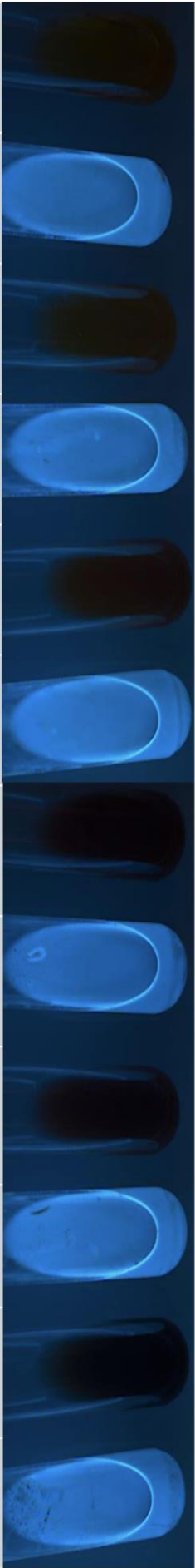
Test 7: Dragen – 1ml SL2 + 0,01g Chinin + 1ml EtOH 96%

pos: immer NDS, teilweise fein verteilt wie Suspension
neg: orange Färbung von DD-Reagenz, kein NDS

Alkaloid-Test:
7) Dragendorff Reagenz:
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 7 gegeben und mit 1 ml Dragendorff Reagenz versetzt.
Der Test ist positiv wenn sich ein **oranget** Niederschlag bildet.
(Lösung A: 0.85 g basisches Bismut(III)-nitrat in 10 ml Eisessig und 40 ml Wasser dest. lösen.
Lösung B: 8 g Kaliumjodid in 30 ml Wasser dest. lösen
Vor Anwendung: je 1 ml von Lösung A und Lösung B mit 4 ml Eisessig und 20 ml Wasser dest. Mischen.)



DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
8023 o.-br. NDS	8007	2000 o. NDS	2010	2010 rot-o. NDS	2001	2011 o. NDS	2000	2003 o. NDS	1007	2003 o. NDS	1006



Test 8: Zn/HCl – 5ml SL2 + 0,01g Rutin
Wasser-/Ultraschallbad

Flavonoid-Tests:
8) **Modifizierter Shinoda-test:**
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 8 gegeben und eine Spatelspitze Zinkstaub wird zugegeben. Dann wird das Reagenzglas vorsichtig mit 1 ml rauchender konzentrierte Salzsäure versetzt (Schaumbildung).
Der Test ist positiv wenn sich die Lösung nach einigen Minuten rosa bis rot verfärbt.

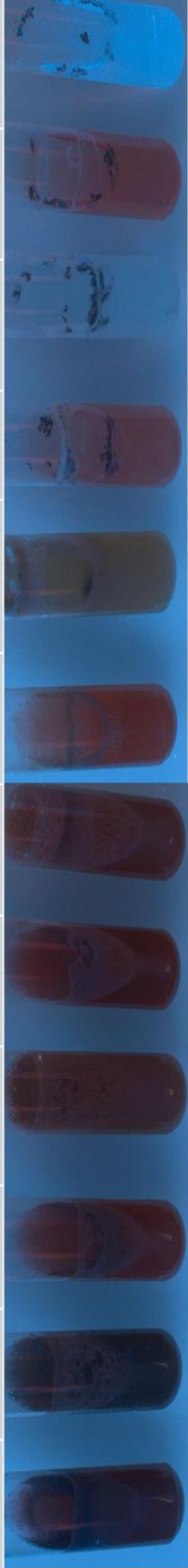
Fotos vorher (Rutin = gelb):



Fotos nachher:



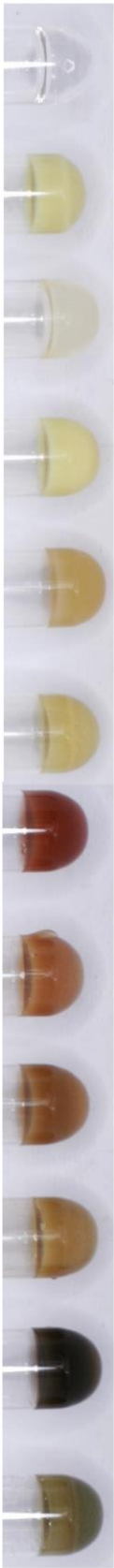
DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
8012	7008 (dunkel)	2013	8023 (hell)	2002	2001	2001	1012 (v. heller) od. 1014 + Gelb	2012 (hell)	1015	3014 (hell)	Farblos



Test 9: PbAc – 1ml SL2 + 0,01g Quercitin

9) 10% Bleiacetat:
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 9 gegeben und mit 10 Tropfen 10 % Bleiacetat-Lösung versetzt.
Der Test ist positiv wenn sich ein gelber bis rotbrauner Niederschlag bildet.
(10 g Blei(II)-acetat, basisch in 100 ml Wasser dest. gelöst). Eisessig zugeben bis Lösung klar wird.

Fotos vorher (Quercitin = gelb):



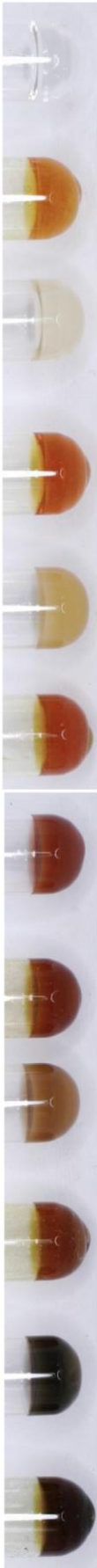
Fotos nachher:

DB+	DB-	BR+	BR-	R+	R-	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
1027 grü.-br. NDS	6014 (hell)	1024(hell) gelb. NDS	8001	1034(dunkel) gelb. NDS	3022 (dunkel)	1018(hell) gelb. NDS	1017 (hell)	1016 hellgel. NDS	1014 (klar)	1016 hellgel. NDS	Farblos

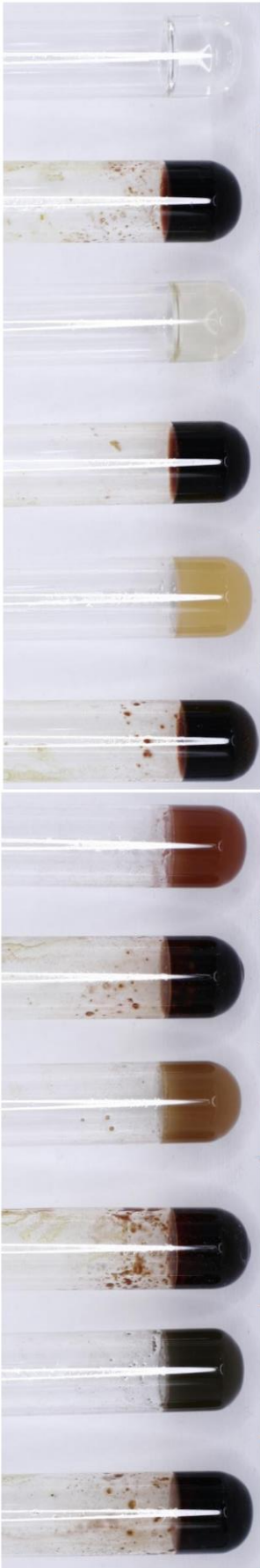
Test 11: HNO3 – 1ml SL2 + 0,01g Berberin

Berberin-Test:
11) Salpetersäure -Test:
Etwa 1 ml von Lösung 1 werden in Reagenzglas 11 gegeben und vorsichtig mit 1 ml konzentrierter Salpetersäure versetzt.
Der Test ist positiv wenn sich die Lösung rot verfärbt.

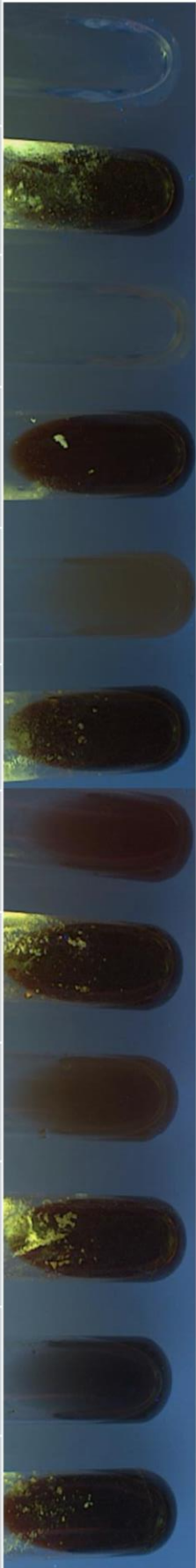
Fotos vorher (Berberin = gelb):



Fotos nachher:



DB+	DB-	BR+	BR-	R +	R -	OK+	OK-	BG+	BG-	FL+	FL-
3007 blutrot	7008 (dunkler)	3007 blutrot	8001	3007 blutrot	8004	3007 blutrot	1017	3007 blutrot	1015	3007 blutrot	Farblos



A3. Authentischer Vergleich: Positivbeispiele

Die hier angeführte Tabelle dient als Referenz zur Interpretation schwer zuordenbarer Testergebnisse. Erstellt wurde sie im April 2025 und die angeführten Angaben basieren auf den Erfahrungswerten des Projektleiters Mag. M. Burschowsky (Plantasia GmbH). Die Granulate der Spalte „Positives Testergebnis“ zeigen Ausgänge, die laut dem in Kapitel 4.3 definierten Beurteilungsschlüssel eindeutig positive Testergebnisse darstellen. Granulate der Spalte „Negatives Testergebnis“ zeigen entweder keine Reaktion oder ihre Beurteilungskriterien liegen außerhalb der durch den Beurteilungsschlüssel definierten Grenzen. In der Spalte „Auffälligkeiten“ sind Details notiert, die bei der Erstellung der Liste aufgefallen sind und für die gelisteten Granulate als zusätzliche Erkennungsmerkmale dienen können.

An dieser Stelle sollte erwähnt werden, dass es sich hierbei nicht um eine vollständige Liste aller Granulate mit positiven bzw. negativen Testergebnissen handelt, sondern lediglich um ausgewählte authentische Vergleiche, die der methodischen Auswertung der Testausgänge dienen.

Tabelle 13: Auflistung der Granulate pro Test, die bekanntermaßen positive, negative bzw. auffällige Ergebnisse liefern

Bezeichnung	Positives Testergebnis	Negatives Testergebnis	Auffälligkeit
Test 1 – Saponine	Anemarrhenae rh.	Meretricis seu Cyclinae co.	–
Test 2 – Aminosäuren	Aconiti lateralis rx. praep. Acori tatarinowii rh.	Bambusae concretio silicea Arecae sm.	–
Test 3 – red. Substanzen	Polygalae rx. praep. (blau) Anemarrhenae rh. (blaugrün) Euryales sm. (grün)	–	Besonders gallertig: - Amomi fr. - Alpiniae officinarum rh. - Alpiniae oxyphylla fr.
Test 4 – Tannine	Arecae sm.	Gastrodiae rh. Asparagi rx.	–
Test 5 – Anthrachinon	Rhei rx. et rh. Cassiae sm. praep.	Hordei fr. germinatus praep. Jujubae fr.	–
Test 6 – Proteine	Cervi cornu Persicae sm. praep. Armeniacae sm. amarum praep. Pheretima	Pinelliae rh. praep. Lycii fr.	–
Test 7 – Alkaloide	Pinelliae rh. praep. Fritillariae cirrhosae bb. Fritillariae thunbergii bb.	Adenophorae rx. Alpiniae oxyphyllae fr. praep.	–
Test 8 – Flavonoide (Shinoda)	Epimedii hb. Evodiae fr. praep.	Peucedani rx. Glycyrrhizae rx.	Farbumschlag grün: - Oldenlandiae diffusae hb. - Morindae officinalis rx.
Test 9 – Flavonoide (Bleiacetat)	Epimedii hb. Evodiae fr. praep.	Peucedani rx. Glycyrrhizae rx.	
Test 10 – Steroide/Triterpene	Ginseng rx. (rot) Arisaema cum Bile (gelb)	Gypsum fibrosum Pinelliae rh. praep.	Untere Phase gelb: - Glycyrrhizae rx.
Test 11 – Berberin	Corydalis rh. praep. Phellodendri chinensis cx.	Lophateri hb. Myristicae sm.	–

A4. Liste der Testauswertungen

Die vollständige Liste der Testauswertungen umfasst 329 individuelle Einträge; für jedes untersuchte Granulat gibt es einen Eintrag. Die Daten wurden von den vier projektbeteiligten Masterstudenten der Universität im Zeitraum Sommer 2023 bis Sommer 2025 gemäß der in Kapitel 6.4 beschriebenen Methoden erhoben. Die Auswertung der Daten erfolgte durch die gesamte Projektarbeitsgruppe im Zeitraum 07.08.-10.08.2025.

Pro Tabellenblatt ist eine Granulatfarben-Kategorie gelistet. Am Anfang jedes Tabellenblattes befindet sich eine Gesamtübersicht, wobei jede Zeile einem Granulat entspricht. Auch werden die Einträge Lösungsfarben-Kategorien zugeordnet und anhand des Ergebnisses der Schaumprobe (Test 1) organisiert. Einträge, die auf mehreren Tabellenblättern zu finden sind, sind mehreren Granulatfarben-Kategorien zugeordnet, wie auch schon in Kapitel 4.7.1 beschrieben. Diese Einträge sind hellblau markiert. Hellrosa markierte Einträge gehören mehreren Lösungsfarben-Kategorien an. Multiple Kategorie-Zuordnungen sind zusätzlich in den Spalten Q und R der Tabelle dokumentiert. Die Ergebnisse von Test 3 sind in Spalte G gelistet. Hier wurde zusätzlich die Farbkategorie der Ergebnisse dokumentiert. Test-3-Ausreißer, deren Ergebnis als negativ interpretiert wurde, sind orange markiert.

Die gesammelten Informationen sind nach dem folgenden Schema in den Spalten angeordnet (Datenauszug in Abbildung 11):

Granulatname/-charge	Granulatfarbe	Lösungsfarbe	Testergebnisse 1-12	Weitere GF-Kat.	Weitere LF-Kat.
Name, Chargennummer	RAL-Farbe, Bezeichnung	(RAL-Farbe), Bezeichnung	Positiv „+“ bzw. negativ „-“ Bei Test 3: Farbe v. Ergebnis	Sofern zutreffend	Sofern zutreffend
Spalte B	Spalte C	Spalte D	Spalte E-P	Spalte Q	Spalte R

Im Tabellenblatt „Mineralische“ wurden zusätzlich die Testergebnisse zu den 16 mineralischen Granulaten zusammengefasst. In den Spalten S-X sind hier zusätzlich die Interpretationen der Tests 13-18 angeführt, die nur bei dieser Granulat-Untergruppe durchgeführt wurden. Gelb markierte Einträge stellen in ihrer Kombination Alleinstellungsmerkmale (genaue Definition in Abschnitt A5) für das betrachtete Granulat dar.

Die vollständige Datentabelle ist als Excel-Datei („Auswertung_Testergebnisse_gesamt.xlsx“) über das institutionelle Repositorium der Universität Wien abrufbar (Ebert, 2026).

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
1	Granulat-Name/-Charge	Granulat-Farbe	Lösungs-Farbe	Test 1 – Sag	Test 2 – Nin	Test 3 – Mo	Test 4 – Fe	Test 5 – Na	Test 6 – Cu	Test 7 – DD	Test 8 – Zn	Test 9 – Pb	Test 10 – H ₂	Test 11 – H ₂	Test 12 – Al	weitere GF-Kat.	weitere LF-Kat.
2	Acanthopanax Senticos R 1001 beige	hellbraun	–	–	+	+ grün	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
3	Allii macrostemonis Bb 231 1001 beige	hellbraun	–	–	+	+ blau	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
4	Angelicae sin. Rx preap 22C 1001 beige	mittelbraun	–	–	+	+ blau	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
5	Angelicae sinensis Rad Cd 1001 beige	dunkelbraun	–	–	+	+ blau	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
6	Arisaema cum bile 210854 1001 beige	dunkelbraun	–	–	+	+ grün	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
7	Astragali complanati Semic 1001 beige	dunkelbraun	–	–	+	+ grün	–	–	–	–	–	–	–	–	–		
8	Aucklandiae Rx 2209509 1001 beige	mittelbraun	–	–	+	+ blau	–	–	–	–	–	–	–	–	–		

Abbildung 11: Auszug aus der Gesamtliste der Testbewertungen

A5. Excel-Berechnung der Entscheidungsbaum-Logik

Durch die Kombination aus Granulatfarbe, Lösungsfarbe und Schaumproben-Ergebnis entstanden insgesamt 43 Granulat-Subgruppen. In 7 dieser Gruppen war nach der optischen Zuordnung nur noch ein einzelner Kandidat vorhanden, für sie war die Identifizierung abgeschlossen. 17 Gruppen hatten eine geringe Kandidatenanzahl (meist ≤ 10 Granulate) und konnten direkt anhand von Alleinstellungsmerkmalen aufgeklärt werden. Auf die verbleibenden 19 Untergruppen wurden die in Kapitel 4.6 beschriebenen Berechnungen angewandt. In diesen Untergruppen befanden sich bis zu 61 Granulate, die mithilfe des ID3-Algorithmus sortiert wurden. Die gesamten Berechnungen wurden im Zeitraum September bis Dezember 2025 durchgeführt und erfolgten ausschließlich anhand der definierten Formeln.

Für die 36 Granulat-Subgruppen mit mehr als einem Kandidaten wurde je eine Excel-Datei erstellt. Diese Dateien sind über das institutionelle Repositorium der Universität Wien abrufbar (Ebert, 2026). Die Beschriftung der Dateien erfolgte nach dem folgenden Schema:

„Berechnungen_GF_X_LF_Y_Schaum_Z.xlsx“

wobei **X** der Granulatfarbe (beige, dunkelbraun, gelb (ocker), grau, mittelbraun, off-white, rot), **Y** der Lösungsfarbe (beige, dunkelbraun, mittelbraun, off-white, rot, zweifärbig) und **Z** der Bewertung der Schaumprobe (positiv, negativ) für diese Untergruppe entspricht.

Das erste Tabellenblatt jeder Datei zeigt eine Gesamtübersicht. Hier sind alle der Subgruppe zugehörigen Granulate samt deren binärer Testauswertung aus Abschnitt A4 gelistet. Jede Zeile entspricht hierbei einem Granulat. Die Spalten N-V enthalten zudem eine Übersicht der Berechnungsergebnisse der Entscheidungsebene 1 (Abbildung 13). Im Anschluss an die Auflistung folgt eine sukzessive Aufteilung der Granulate anhand der Tests, die bei den Berechnungen (auf den folgenden Tabellenblättern) als optimal identifiziert wurden. Je weiter unten in der Tabelle, desto mehr Entscheidungsebenen sind bereits berücksichtigt. In der jeweils letzten Entscheidungsebene sind die Untergruppen klein genug (empirisch: ≤ 10 Kandidaten), dass die eindeutige Identifizierung der Granulate per Alleinstellungsmerkmalen erfolgen kann. Testergebnisse, die zur eindeutigen Erkennung beitragen, sind gelb markiert.

Aufgrund der in Kapitel 4.8 beschriebenen limitierten Trennleistung von Test 3 (liefert fast ausschließlich positive Testergebnisse) wurde dieser Test stets als letzter angewandt.

Abschließend, wenn alle Zuordnungen nach dem ID3-Algorithmus erfolgt waren und mithilfe der Alleinstellungsmerkmale die maximale Anzahl an Granulaten eindeutig identifiziert worden war, wurde Test 3 analog der in Kapitel 5.6 vorgeschlagenen Adaption angewandt. Die Kombinationen aus Testergebnissen, die unter diesen Umständen zu zusätzlichen Identifikationen führten, sind hellblau markiert.

Die Tabellenblätter, beschriftet mit „Test **X**“, wobei **X** einer Testnummer (2-12) entspricht, enthalten die in Kapitel 4.6 beschriebenen Berechnungen, wenn Test X auf die Subgruppe angewandt wird. Es wurden nur Tabellenblätter für jene Tests angelegt, die auch einen Informationsgewinn für die betrachtete Gruppe liefern.

Für Subgruppen mit mehr als einer Entscheidungsebene gibt es Tabellenblätter, die mit „**TXY**“ beschriftet sind, wobei **X** einer Testnummer (2-12) und **Y** einer Bewertung dieses Tests (positiv: „+“; negativ: „-“) entspricht. Sie behandeln ausschließlich jene Kandidaten, für die diese Testbewertung TXY gilt. Hier sind die Berechnungen der gesamten zweiten Entscheidungsebene angeführt. Ein Rechenblock, welcher sich jeweils über 8 Spalten erstreckt (Abbildung 12), enthält alle relevanten Berechnungen für den Informationsgewinn durch Test X. Zur Übersichtlichkeit sind die erzielten Informationsgewinne in den Spalten der jeweiligen Tests zusätzlich zusammengetragen. Der hellgrün markierte Test bringt innerhalb der betrachteten Entscheidungsebene den größten Informationsgewinn. In den Fällen, in denen es eine dritte Entscheidungsebene gibt, wurde analog zu dieser Vorgehensweise gearbeitet.

Jegliche Farbmarkierung dient ausschließlich der Nachvollziehbarkeit und hat keinen Einfluss auf die Berechnungen.

Definition der deterministischen Alleinstellungsmerkmale:

Als Alleinstellungsmerkmal gilt ein exklusives Testergebnis oder eine eindeutige Kombination mehrerer Testergebnisse, die eine zweifelsfreie Identifikation eines Granulates innerhalb der betrachteten Gruppe zulässt. Kein Alleinstellungsmerkmal wurde gefunden, wenn zwei oder mehrere Kandidaten das exakt gleiche Testmuster aufweisen und somit innerhalb der betrachteten Subgruppe nicht voneinander unterschieden werden können. Als zusätzliches Kriterium soll ein Alleinstellungsmerkmal stets die geringstmögliche Anzahl von Testergebnissen miteinbeziehen, um zu einer eindeutigen Abgrenzung zu gelangen.

Übersicht der in den Dateien verwendeten Parameter (Reihenfolge entspricht Abbildung 12):

n_used	Anzahl verwendeter Granulate, identisch mit Kandidatenzahl der Subgruppe
pi	Relative Häufigkeit des Granulates in der Subgruppe; hier: $pi = 1/n_used$
count_pos	Zähler für die positiven Testergebnisse des betrachteten Tests
count_neg	Zähler für die negativen Testergebnisse des betrachteten Tests
p_pos	Relative Häufigkeit eines positiven Testergebnisses in der Subgruppe
p_neg	Relative Häufigkeit eines negativen Testergebnisses in der Subgruppe
n_pos	Anzahl der positiven Testergebnisse der Subgruppe; Summe count_pos
n_neg	Anzahl der negativen Testergebnisse der Subgruppe; Summe count_neg
H_start	Start-Entropie, Shannon-Entropie des Ausgangszustandes
H_pos	Zweig-Entropie der Gruppe der positiven Testergebnisse
H_neg	Zweig-Entropie der Gruppe der negativen Testergebnisse
H_cond	Anhand H_pos und H_neg gewichtete Rest-Entropie nach Testanwendung
IG TX	Informationsgewinn durch den Test Nummer X; Differenz H_start und H_cond

N	O	P	Q	R	S	T	U
n_used	Kontrolle	Hilfszeile	pi	count_pos	count_neg	p_pos	p_neg
11	1	Agrimoniae H	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Alpiniae offic	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Amomi Fr 201	0,09090909	0	1	0	0,33333333
	1	Mume Fr 231	0,09090909	0	1	0	0,33333333
	1	Nelumbinis F	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Polygoni cus	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Rhei Rx et Rh	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Sanguisorbae	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Smilacis glab	0,09090909	1	0	0,125	0
	1	Spatholobi C	0,09090909	0	1	0	0,33333333
	1	Taxilli Hb 220	0,09090909	1	0	0,125	0
				n_pos	n_neg		
				8	3		
			H_start	H_pos	H_neg	H_cond	IG T4
			3,45943162	3	1,5849625	2,61408068	0,84535094

Abbildung 12: Auszug aus der Rechentabelle: Beispiel "Rechenblock", der alle relevanten Berechnungen für den IG enthält

N	O	P	Q	R	S	T	U	V
Test	n_used	n_pos	n_neg	H_start	H_pos	H_neg	H_cond	IG [bit]
Test 2	56	22	34	5,8073549	4,4594316	5,0874628	4,8407363	0,9666186
Test 4	56	46	10	5,8073549	5,523562	3,3219281	5,1304131	0,6769419
Test 5	56	18	38	5,8073549	4,169925	5,2479275	4,9014267	0,9059282
Test 7	56	1	55	5,8073549	0	5,7813597	5,6781211	0,1292338
Test 8	56	10	46	5,8073549	3,3219281	5,523562	5,1304131	0,6769419
Test 9	56	53	3	5,8073549	5,7279205	1,5849625	5,5059763	0,3013786
Test 10	56	21	35	5,8073549	4,3923174	5,129283	4,8529209	0,954434
Test 11	56	23	33	5,8073549	4,523562	5,0443941	4,8304809	0,976874
Test 12	56	14	42	5,8073549	3,8073549	5,3923174	4,9960768	0,8112781

Abbildung 13: Auszug aus der Rechentabelle: Beispiel Gesamtübersicht der erzielten Informationsgewinne

A6. Vollständiger Entscheidungsbaum

In diesem Abschnitt des Anhangs wird der erarbeitete Entscheidungsbaum in vollem Umfang präsentiert. Die vollständigen Identifikationswege aus optischer Zuordnung, algorithmischer Aufteilung und Alleinstellungsmerkmalen sind aufgeschlüsselt. Sämtliche Entscheidungsstufen und identifizierbare Granulate werden gezeigt.

Auf Seite 1 des Dokuments wird die Struktur abgebildet, die sich aus der optischen Zuordnung nach Granulatfarbe, Lösungsfarbe und Ergebnis der Schaumprobe ergibt. Die optimierte Aufteilung der Subgruppe mineralischer Granulate wird als eigener Abschnitt angedeutet und ist am Ende des Entscheidungsbaumes im Detail aufgeschlüsselt. Auch bei diesem Dokument gilt, dass positive Testergebnisse mit einem „+“, negative mit einem „–“ gekennzeichnet sind.

Die Seiten 2-63 enthalten die visuelle Darstellung der berechneten Entscheidungsstruktur aus Abschnitt A5. Die betrachtete Granulat-Subgruppe ist der Überschrift zu entnehmen. Jede Subgruppe wird mittels ID3-Algorithmus aufgeteilt und anhand der deterministischen Alleinstellungsmerkmale dargestellt. Falls beide Schritte auf einer Seite Platz fanden, wurden sie zusammengelegt.

Im ersten Schritt ist die Aufteilung der Granulatsubgruppen anhand des Informationsgewinns angeführt. Notiert ist die Anzahl der Kandidaten, die an einem Knotenpunkt noch in Frage kommen. Jede Entscheidungsebene ist durch eine Bifurkation des Baumes dargestellt. Das Testergebnis, das als Grundlage dieser Entscheidung dient, kann den neu entstandenen Knoten entnommen werden. Welche Tests später Alleinstellungsmerkmale bilden, ist an dieser Stelle ebenfalls notiert.

Im zweiten Schritt erfolgt die Darstellung der Alleinstellungsmerkmale anhand der Information, welche Testergebnisse welches Granulat eindeutig identifizieren. Die Zusatzinformation, ob und wenn ja wie viele Kandidaten innerhalb der betrachteten Subgruppe nicht erkannt werden können, wird ebenfalls gegeben.

Alle identifizierbaren Granulate können dieser Übersicht namentlich entnommen werden. Nicht eindeutig identifizierbare Granulate weisen ein mit mindestens einem weiteren Granulat der Subgruppe identisches Testmuster auf. Eine Unterscheidung ist aufgrund der Grenzen der

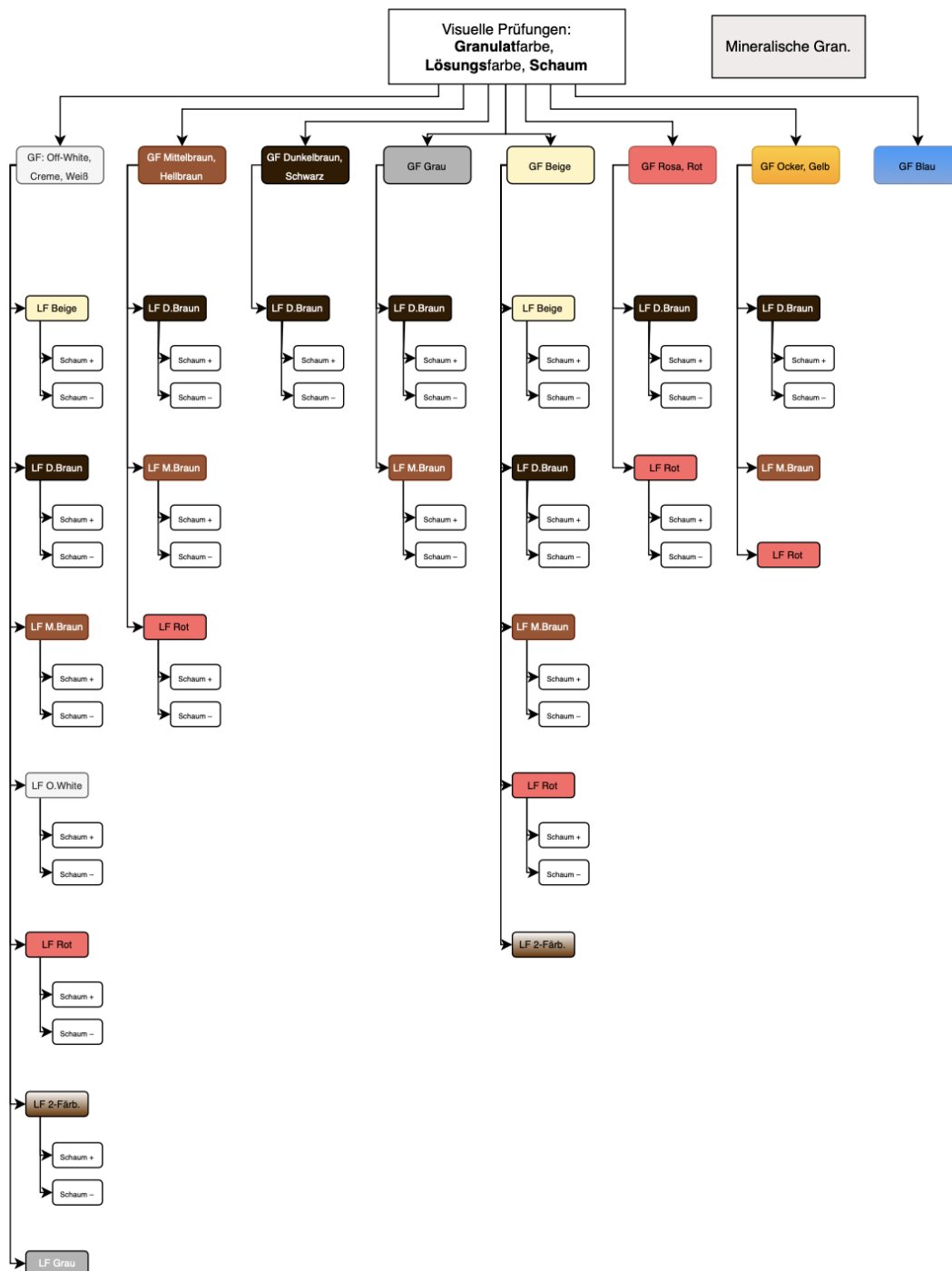
angeführten Methode nicht möglich. Um welche Granulate es sich hierbei genau handelt, kann in den bereitgestellten Listen aus Abschnitt A5 nachgelesen werden.

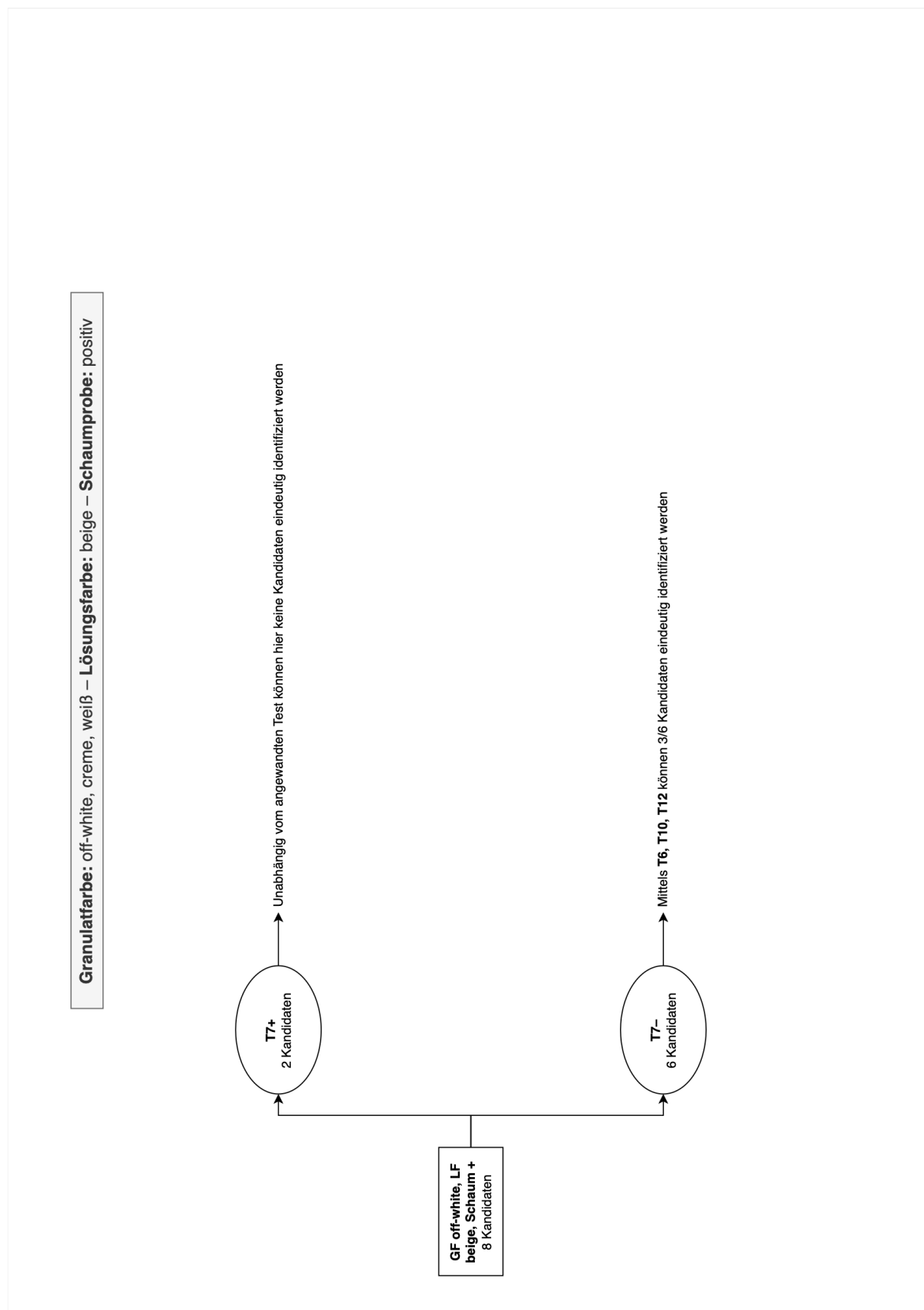
Tests in runden Klammern stellen zusätzliche Differenzierungen dar, die greifen, wenn Test 3 auf die in Kapitel 5.6 vorgeschlagene Weise angepasst wird. Zahlen in Klammern beziehen sich ausschließlich auf die modifizierte Test-3-Variante.

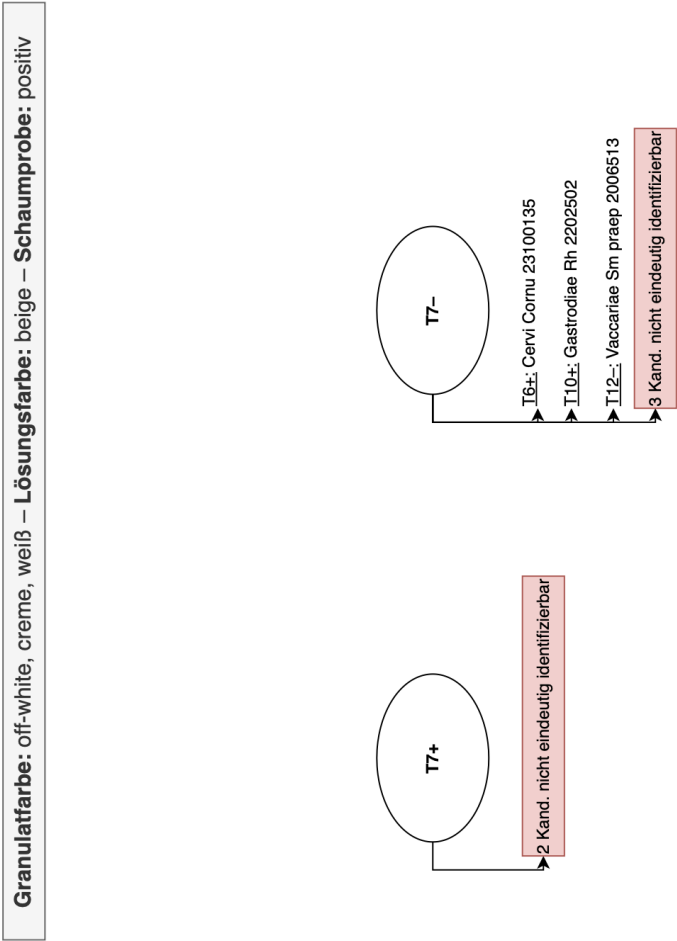
An einigen Stellen werden mehrere gleichwertige Identifikationswege angedeutet. Sie beziehen sich auf unterschiedliche Tests, liefern aber stets die gleiche Erkennungsrate.

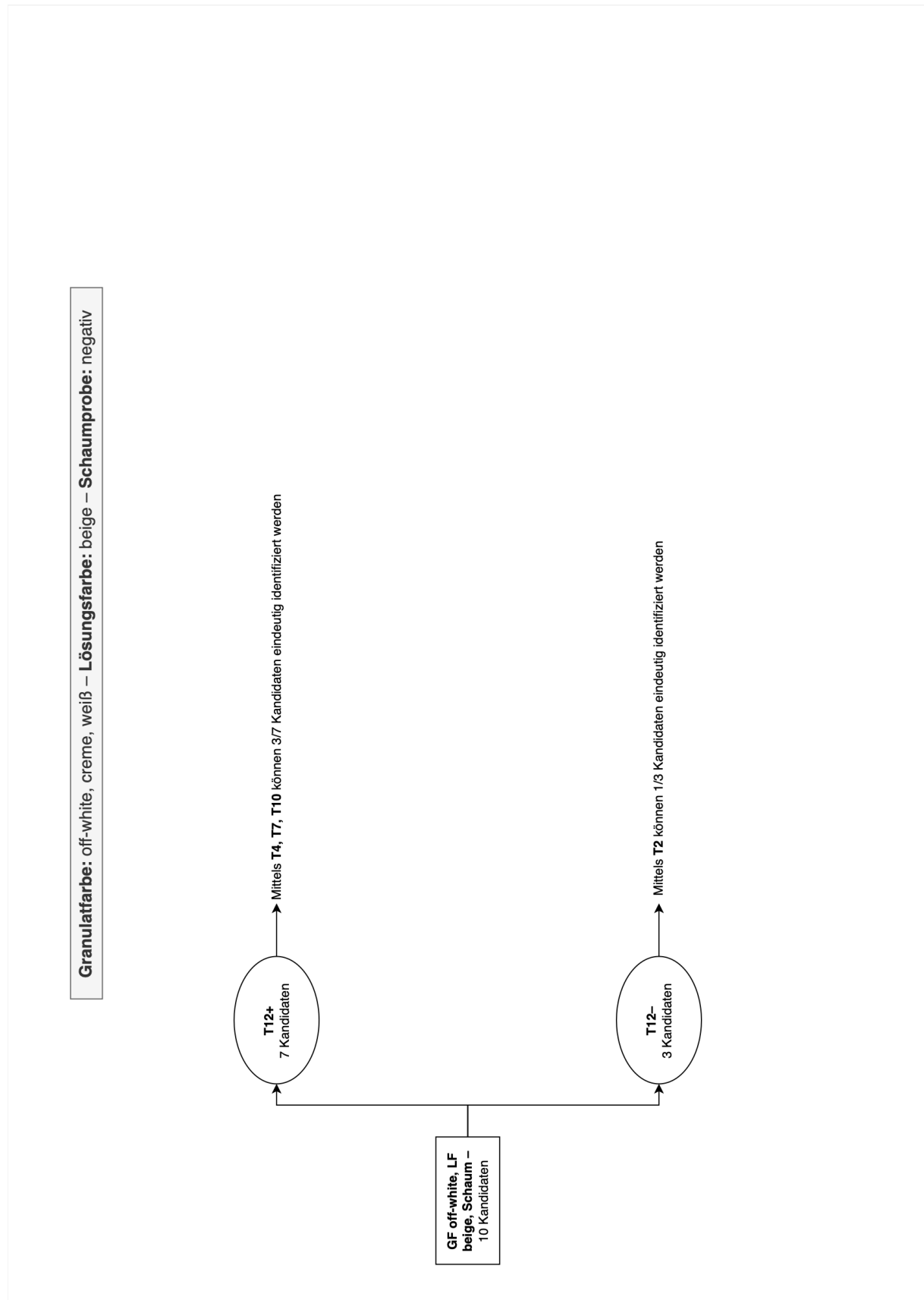
Seite 64 behandelt die Subgruppe der Mineralischen Granulate im Detail. 7 der 16 Kandidaten werden mittels Alleinstellungsmerkmalen aus den Tests 14-18 eindeutig identifiziert. Mittels der Tests 13 und 15 können die verbleibenden 9 Kandidaten in zwei Untergruppen in der Größe von 2 und 7 Kandidaten unterteilt werden, wie in Kapitel 4.9 beschrieben. Die gesonderte Abhandlung der mineralischen Granulate ist als Erweiterung des Entscheidungsbaumes zu sehen. Die behandelten Granulate werden im Hauptteil auf den Seiten 1-63 ebenfalls berücksichtigt.

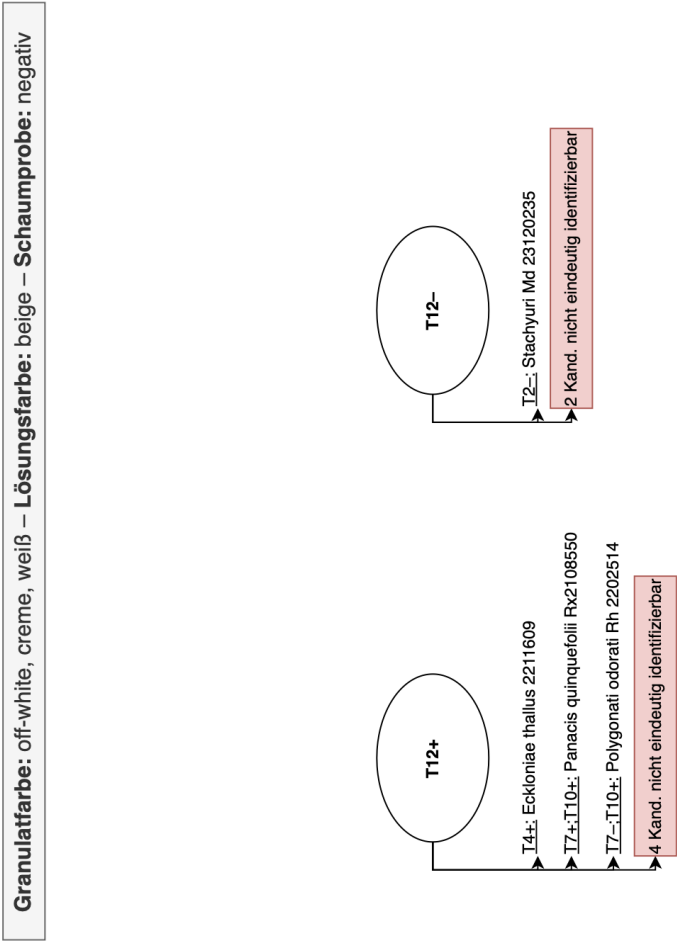
Übersicht: Struktur des Entscheidungsbaumes

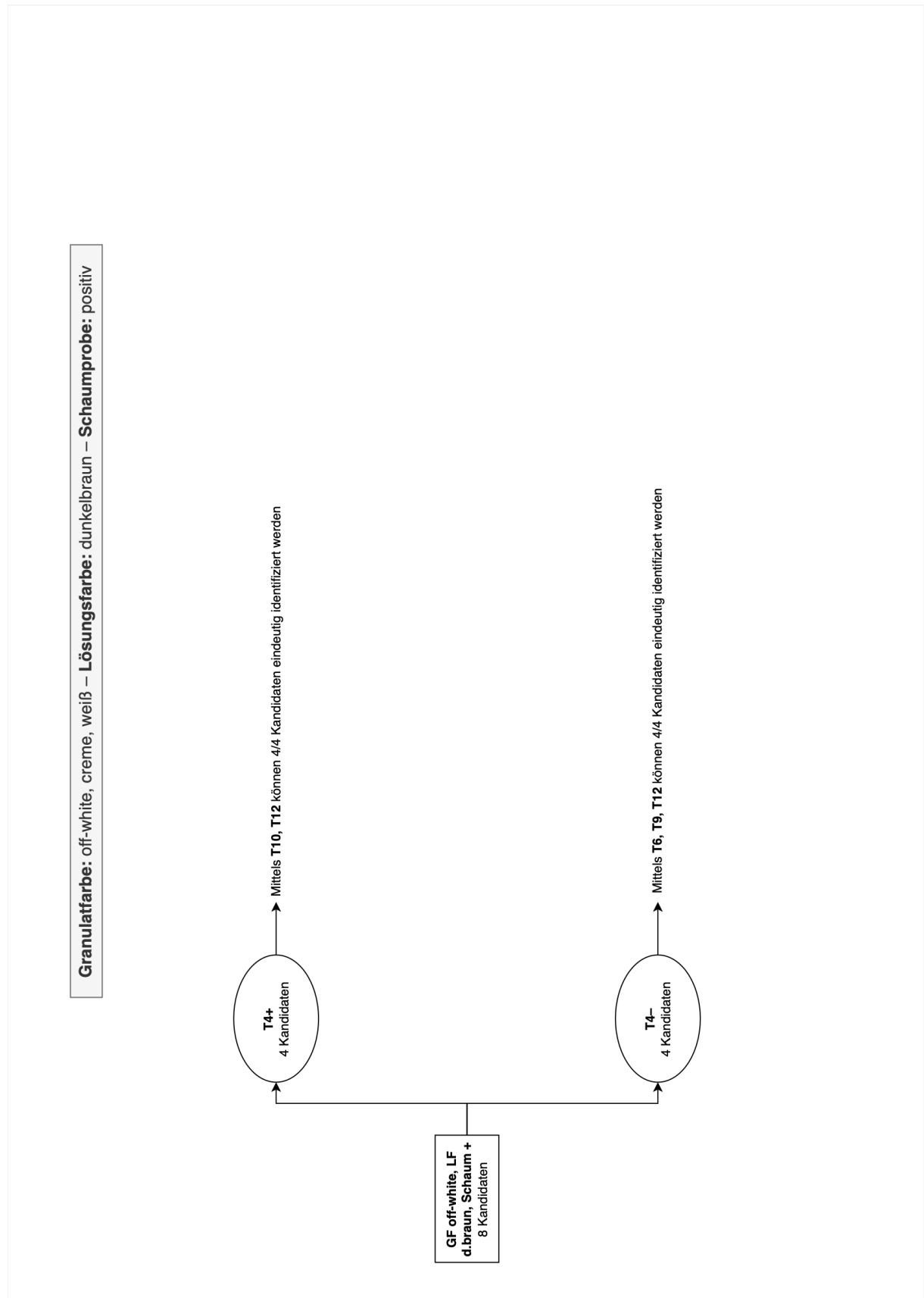




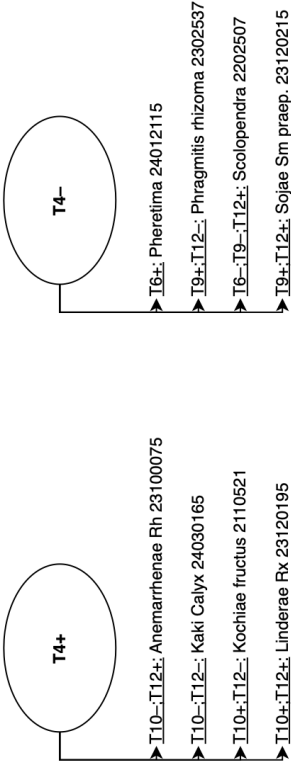


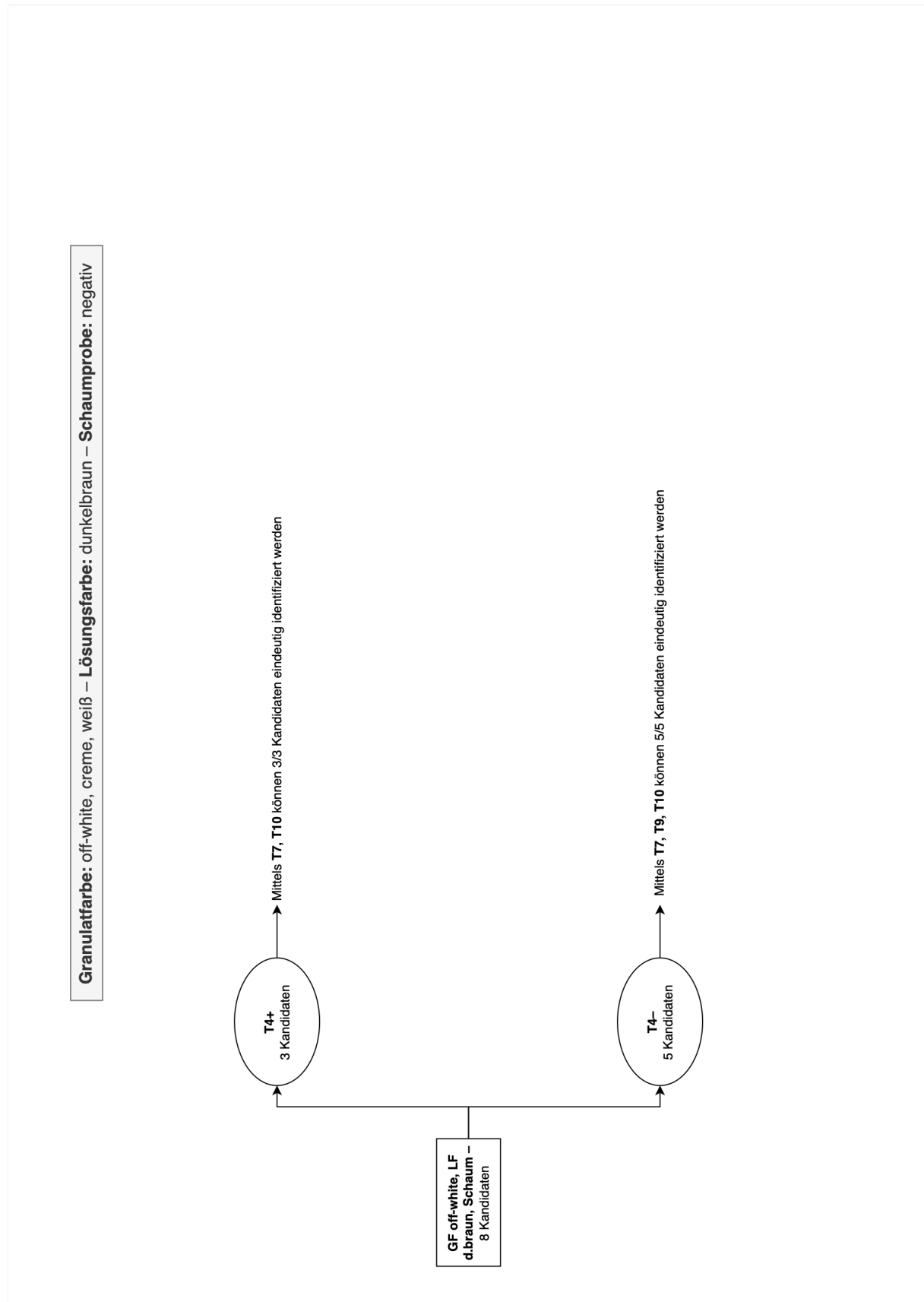




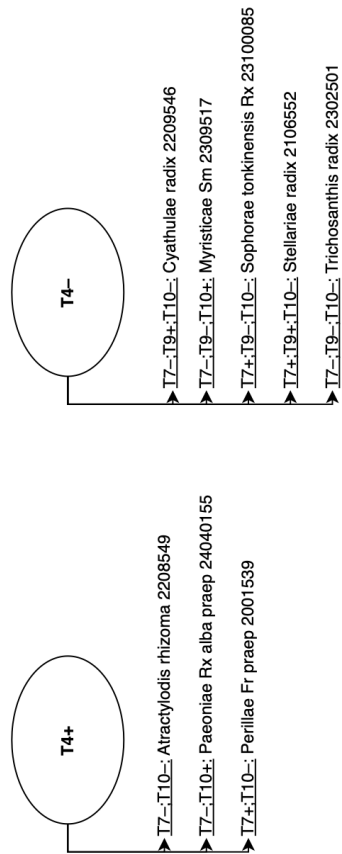


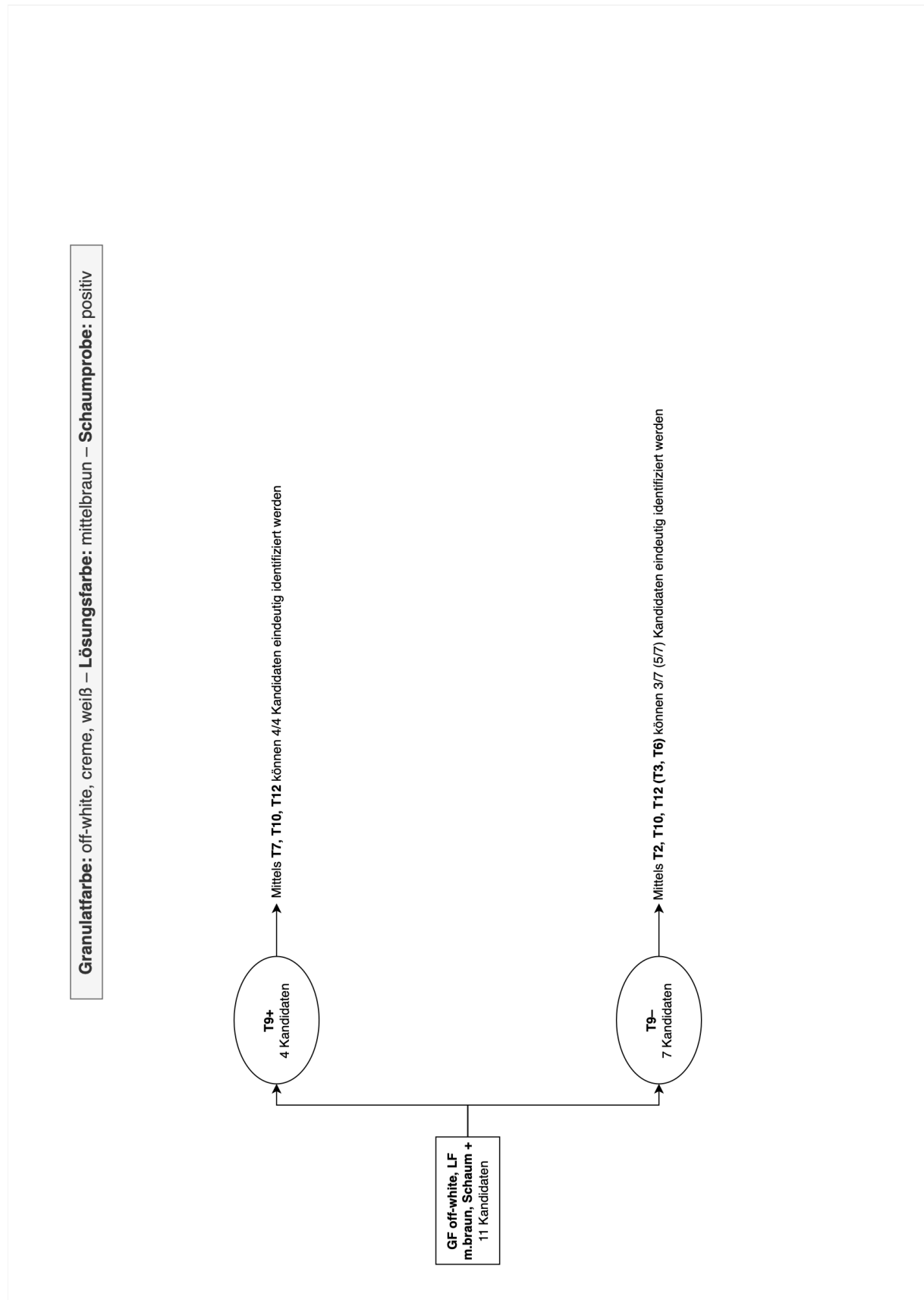
Granulatfarbe: off-white, creme, weiß – Lösungsfarbe: dunkelbraun – Schaumprobe: positiv

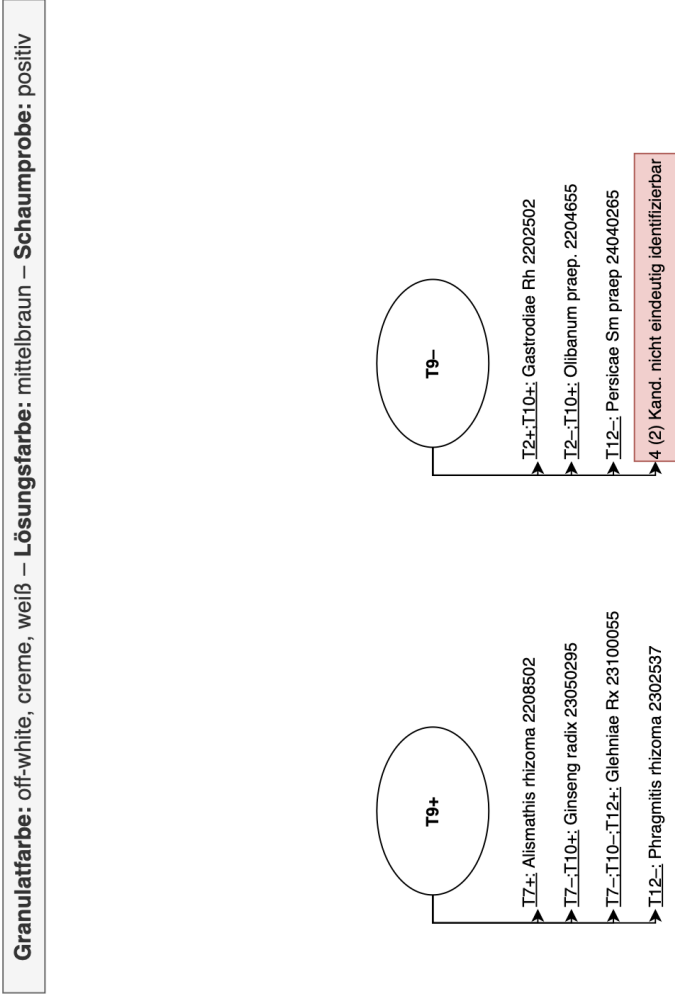


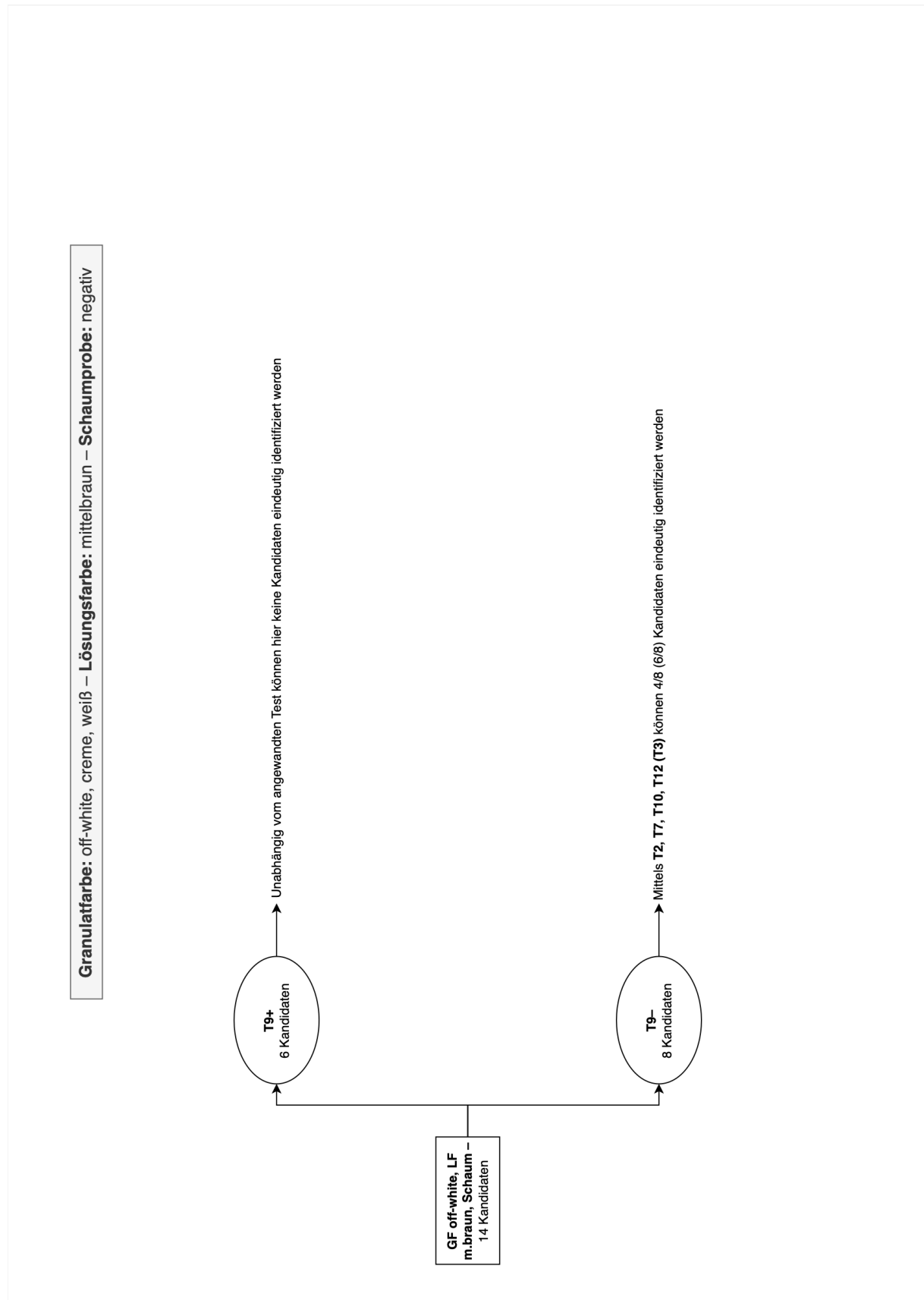


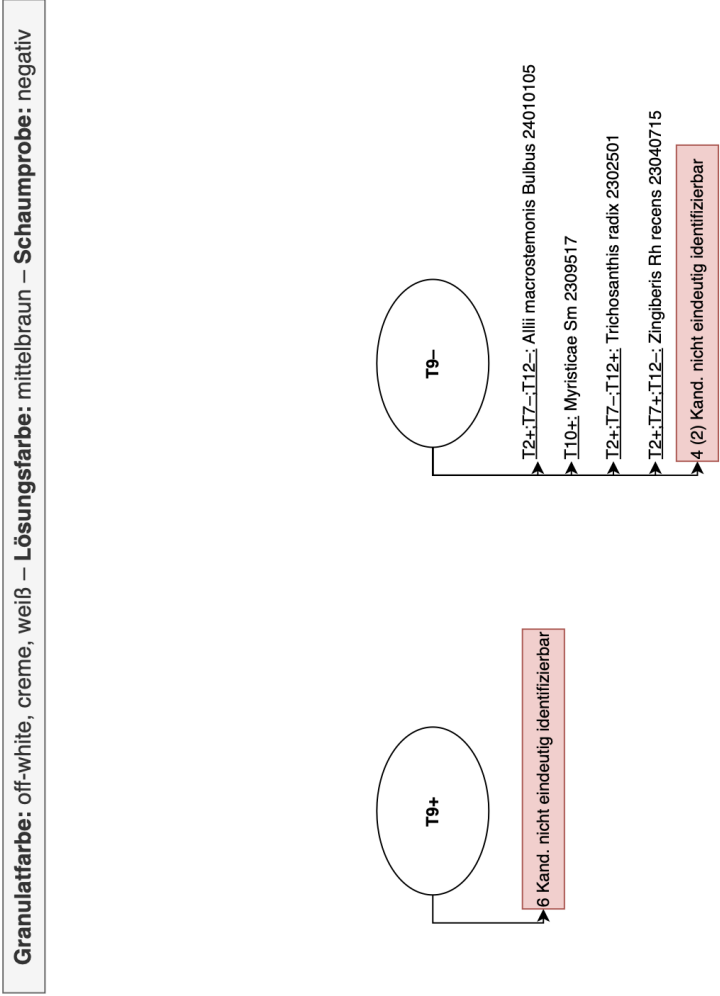
Granulatfarbe: off-white, creme, weiß – **Lösungsfarbe:** dunkelbraun – **Schaumprobe:** negativ

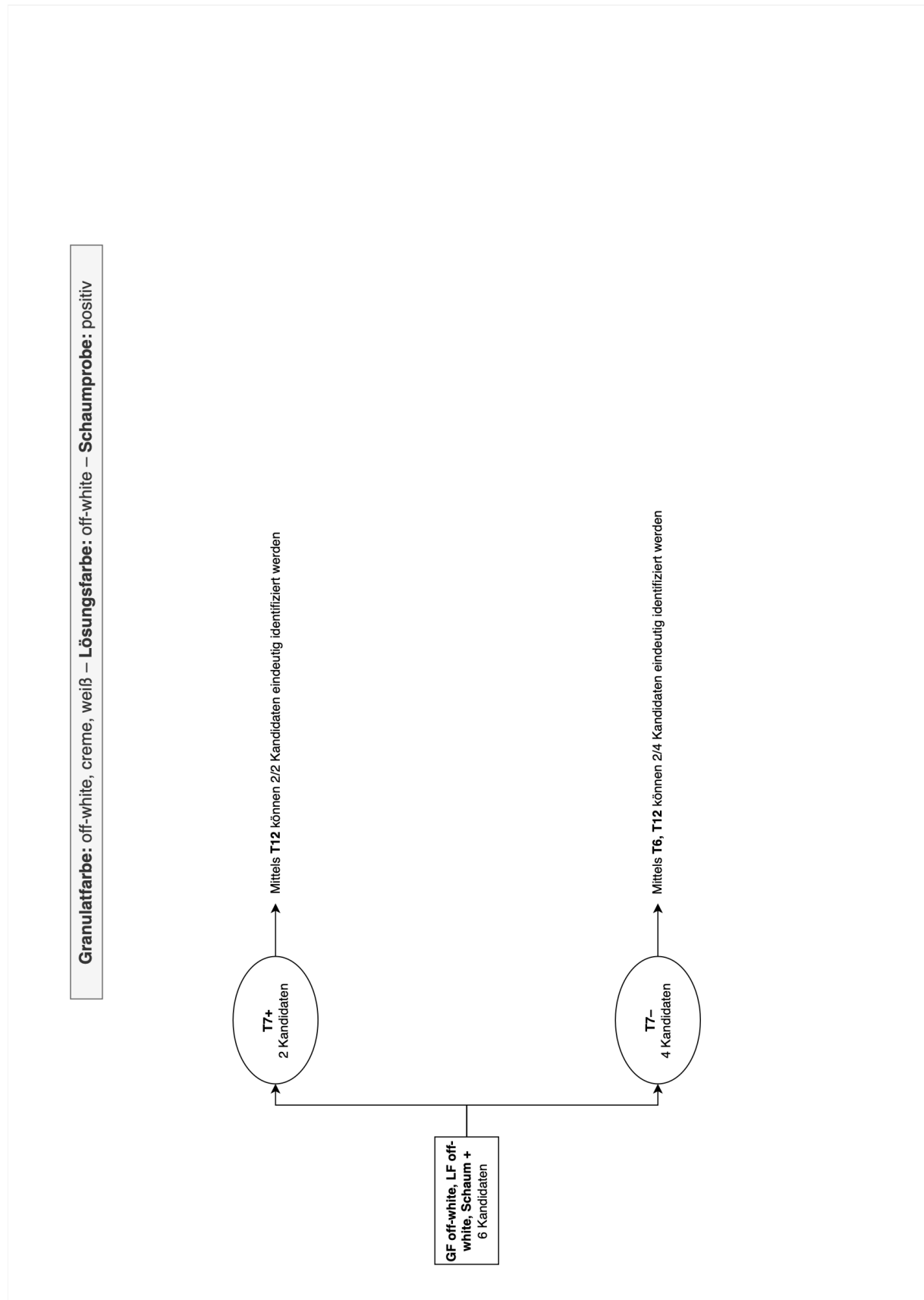


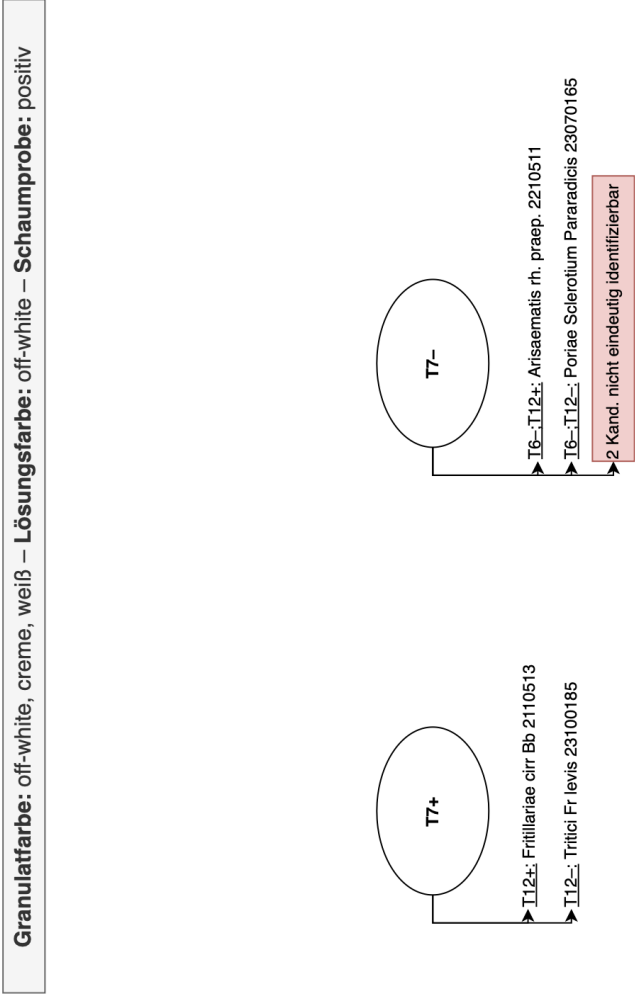


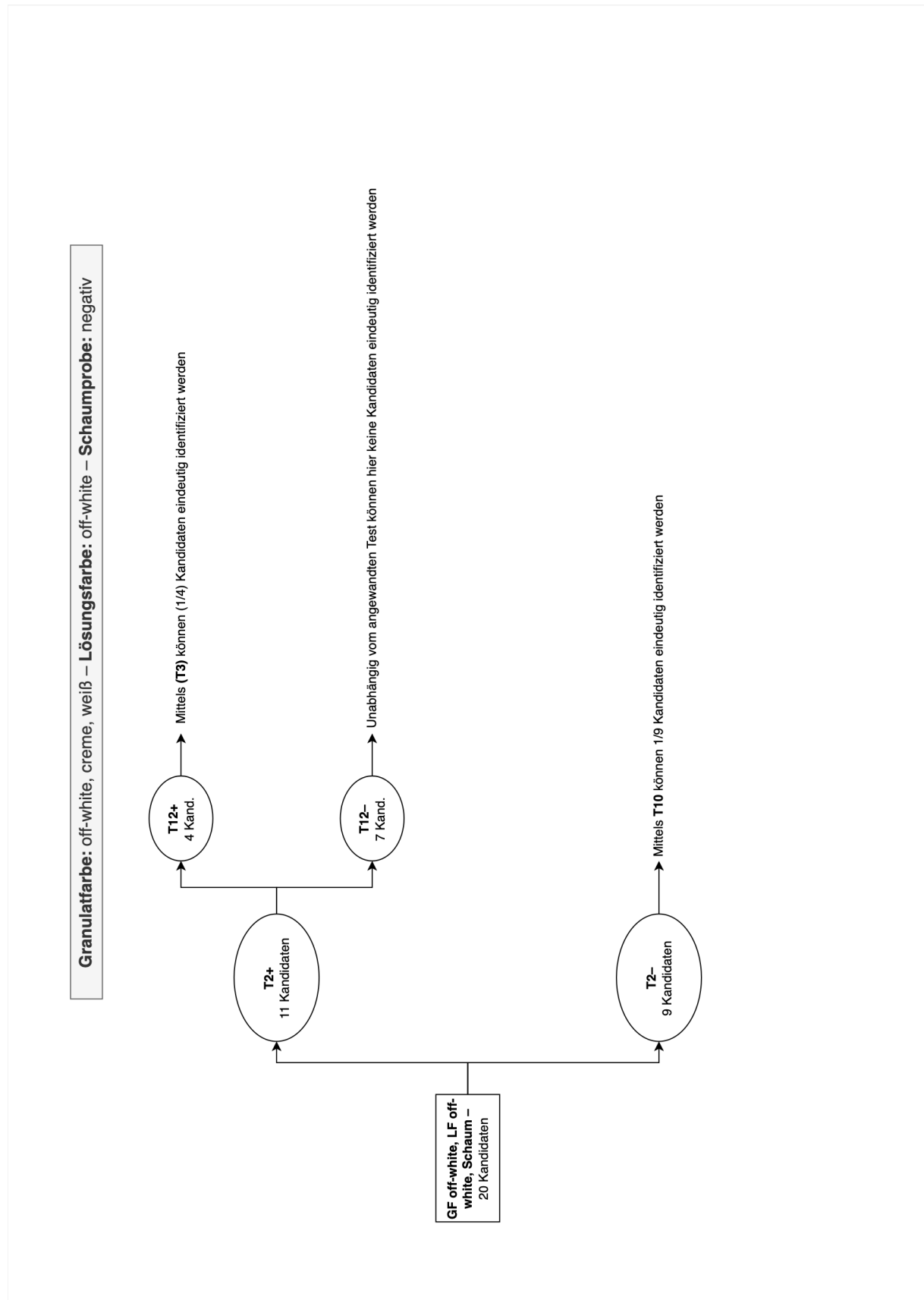


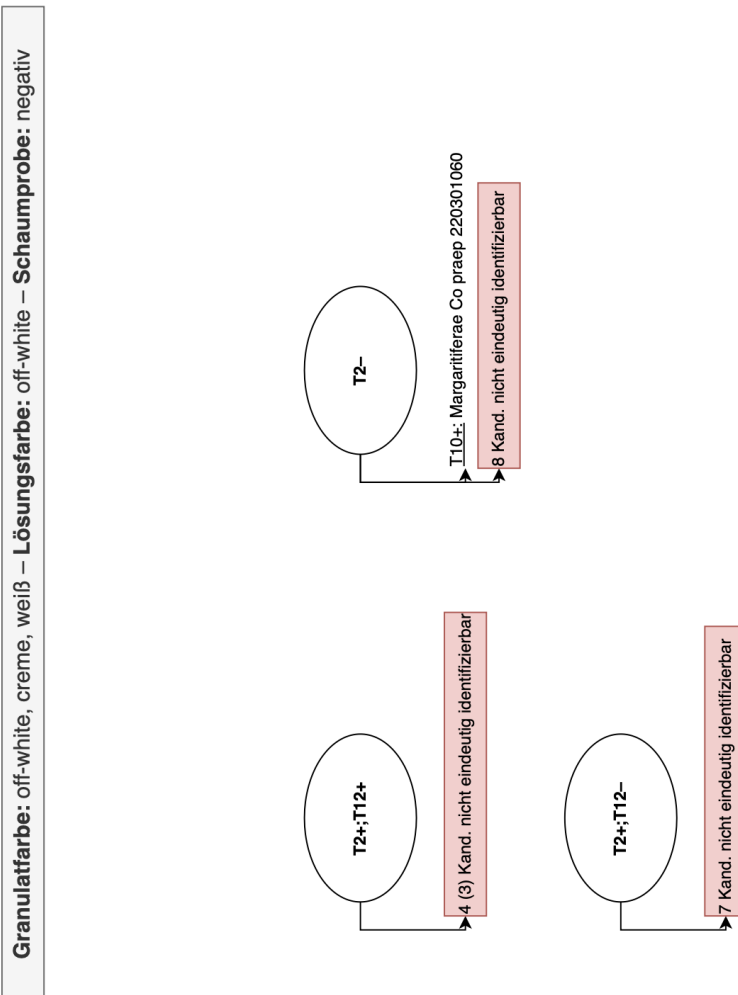


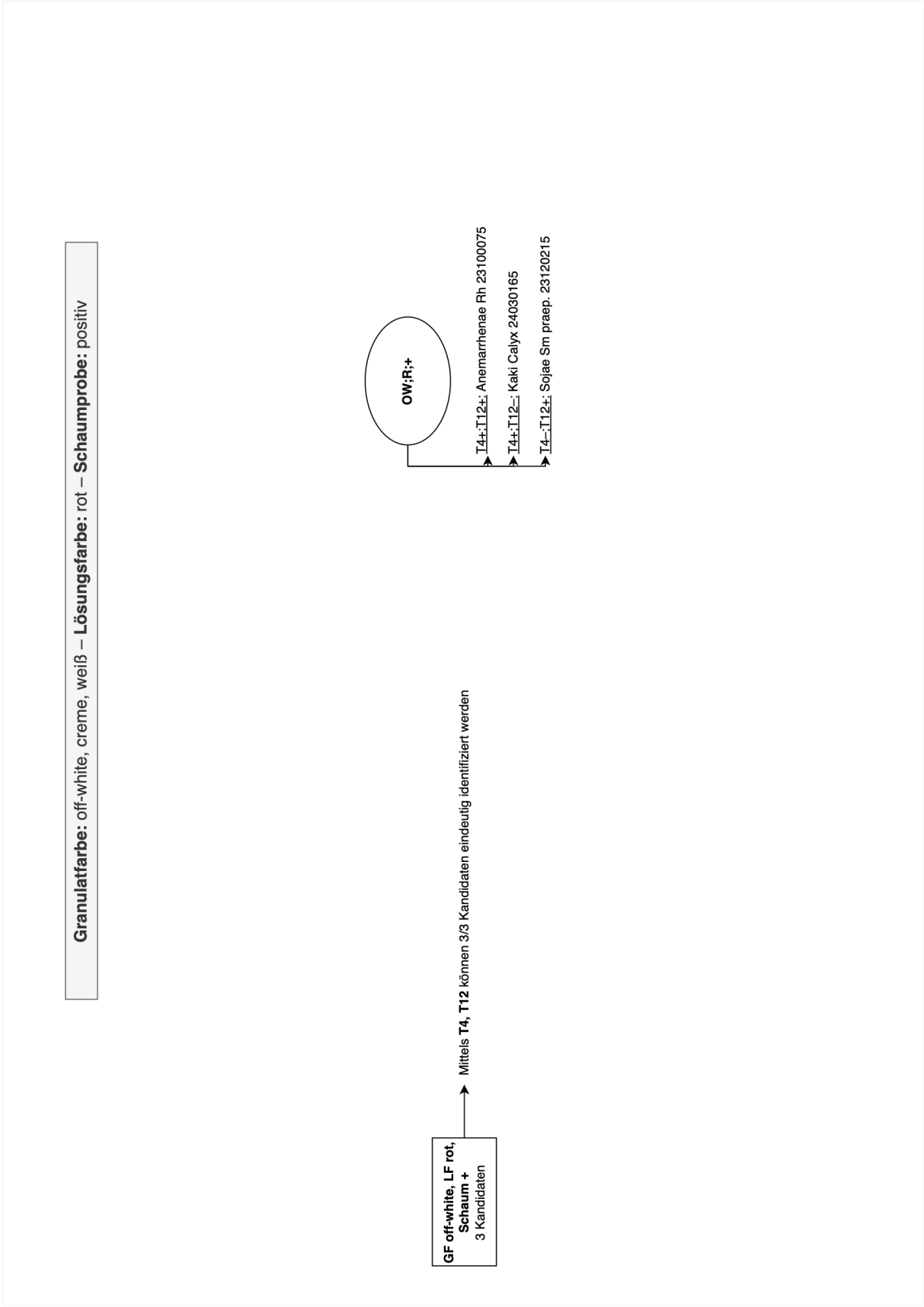


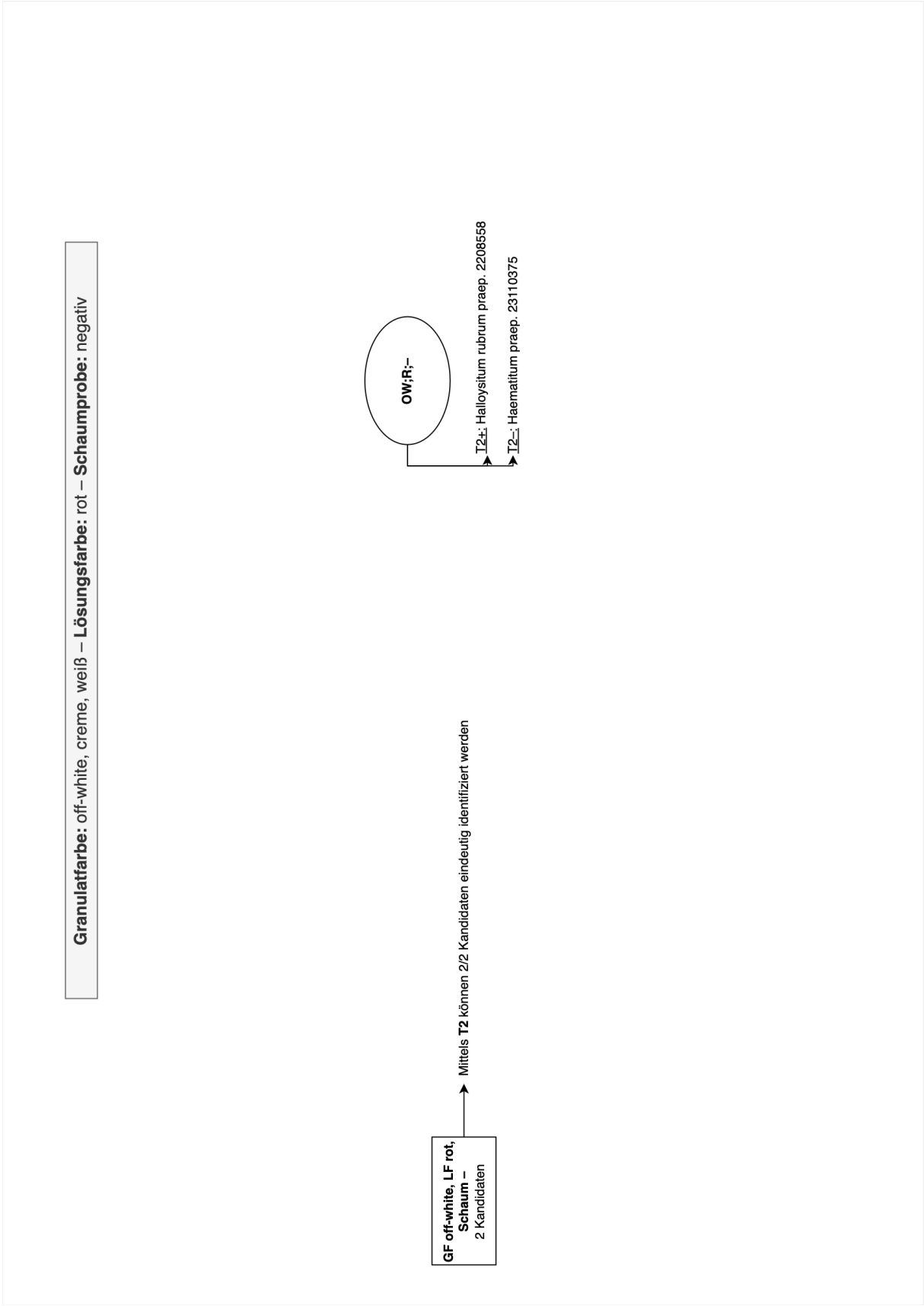


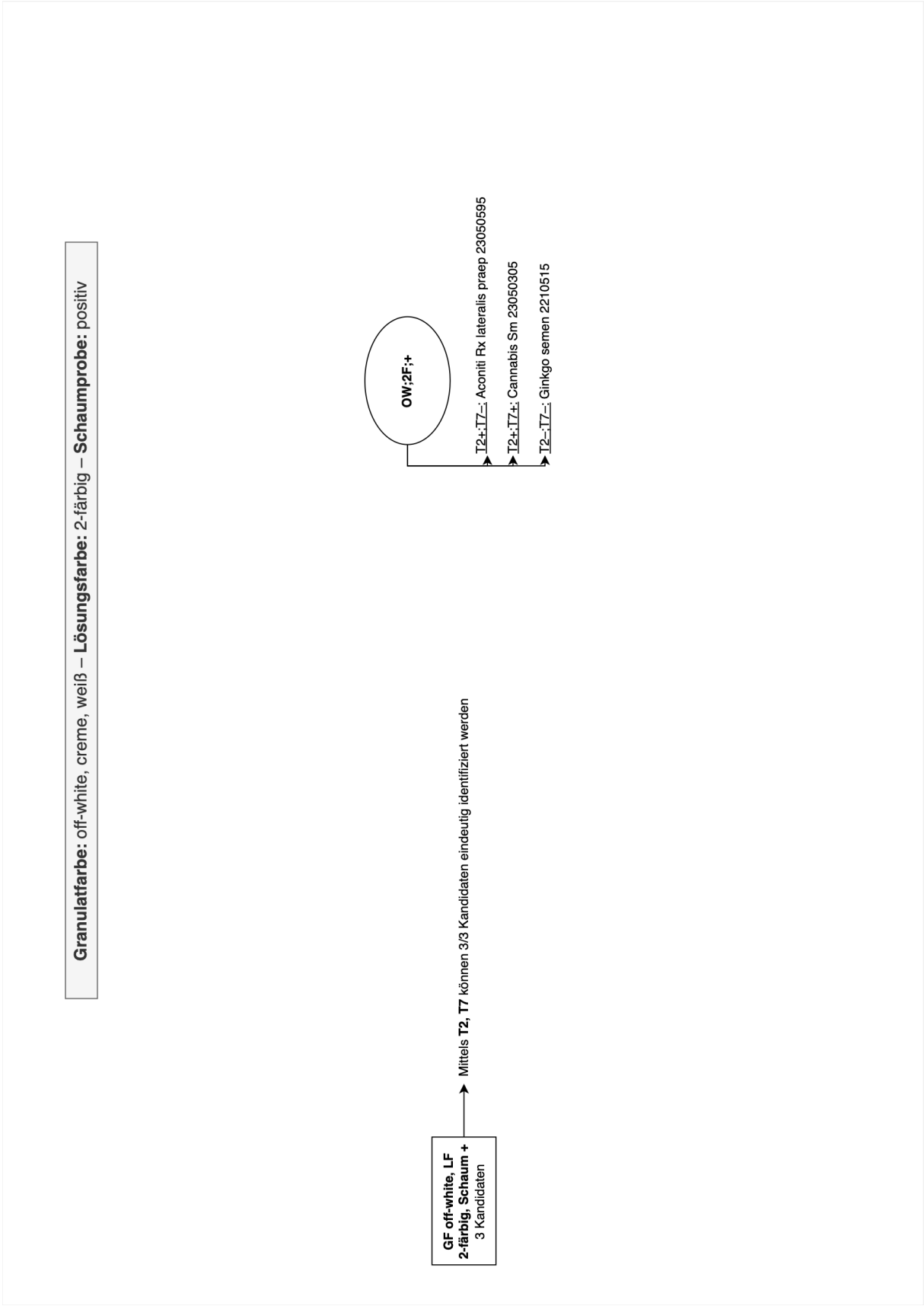












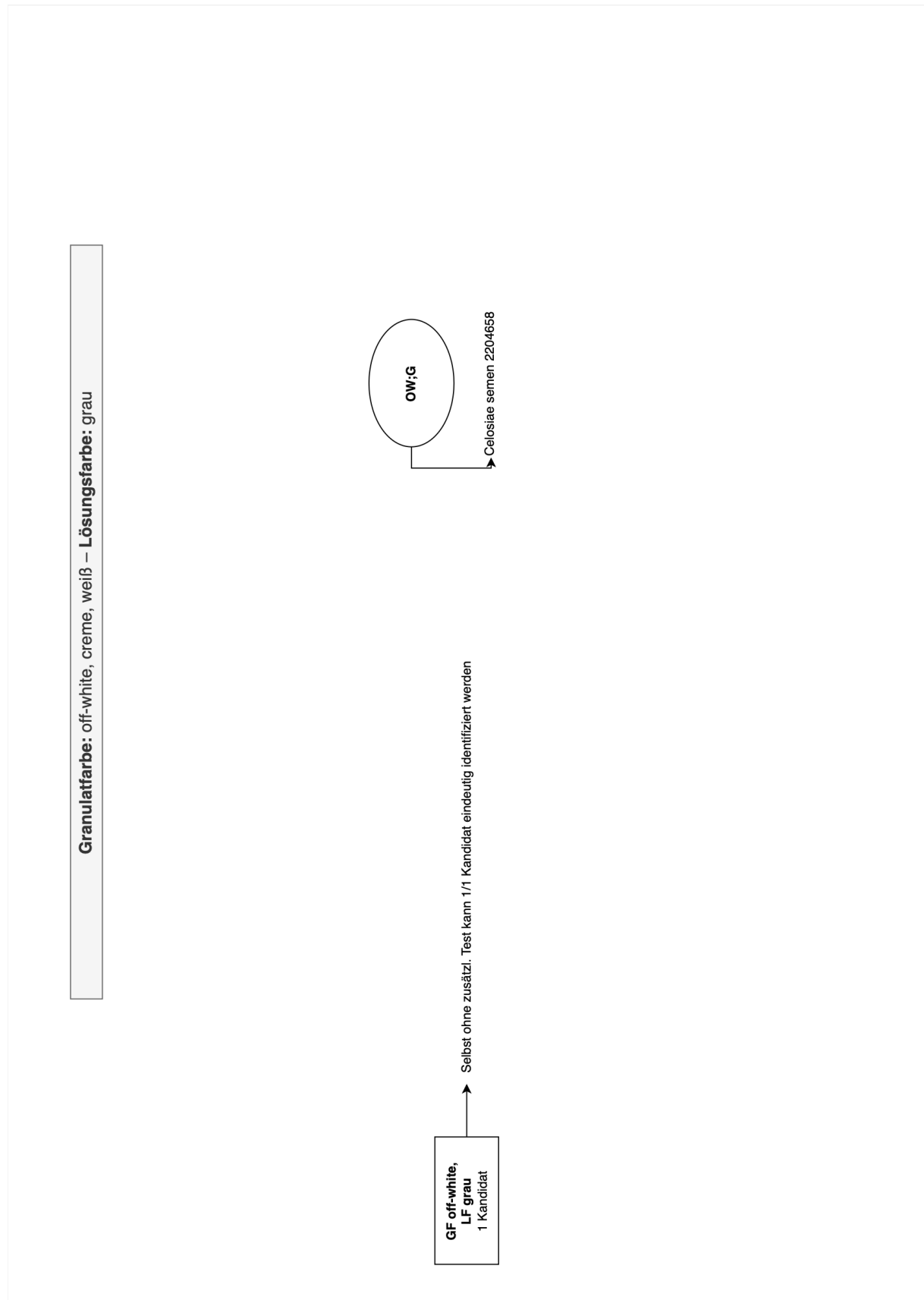
Granulatfarbe: off-white, creme, weiß – **Lösungsfarbe:** 2-färbig – **Schaumprobe:** negativ

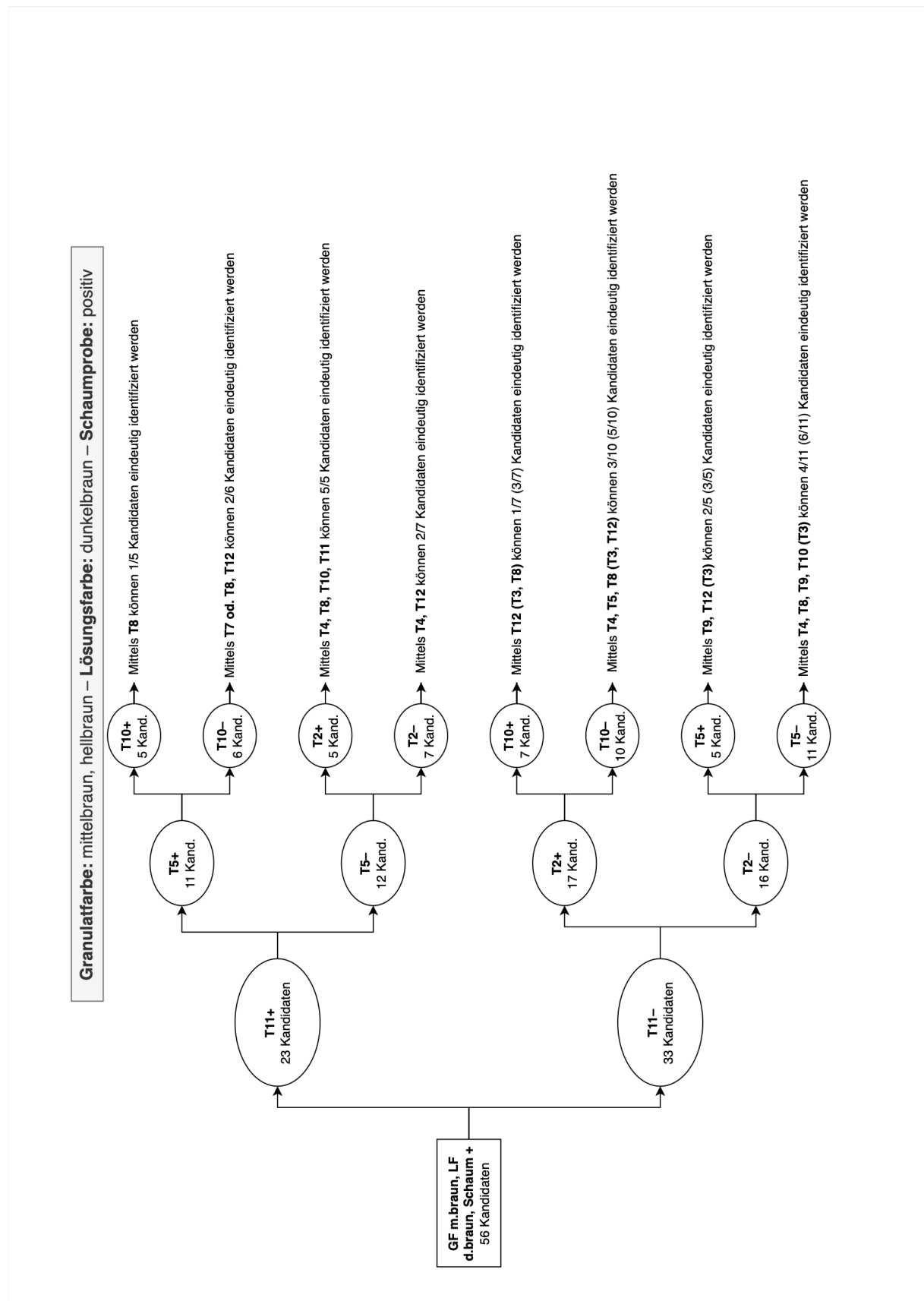
**GF off-white, LF
2-färbig, Schaum –
1 Kandidat**

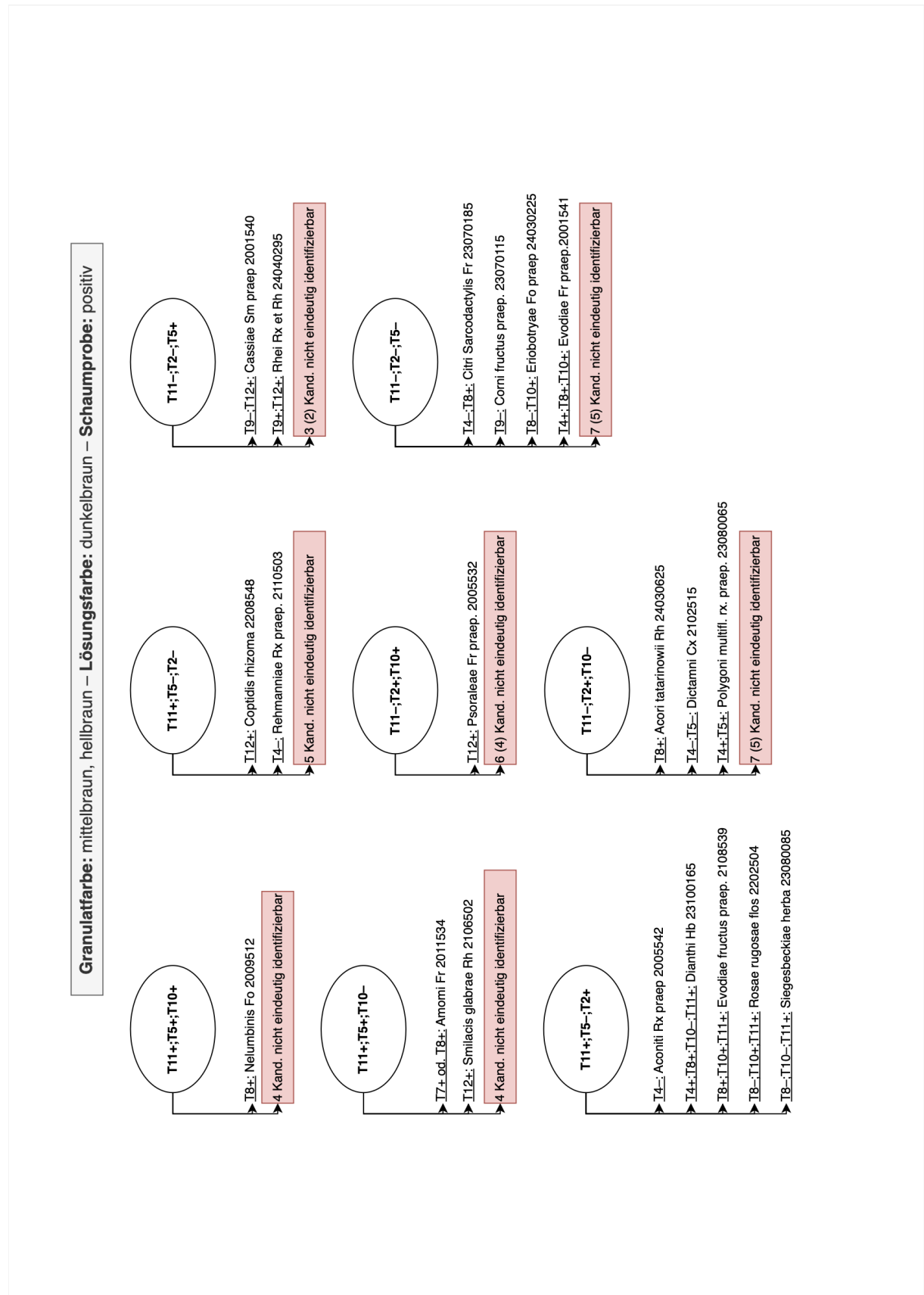
Selbst ohne zusätzl. Test kann 1/1 Kandidat eindeutig identifiziert werden

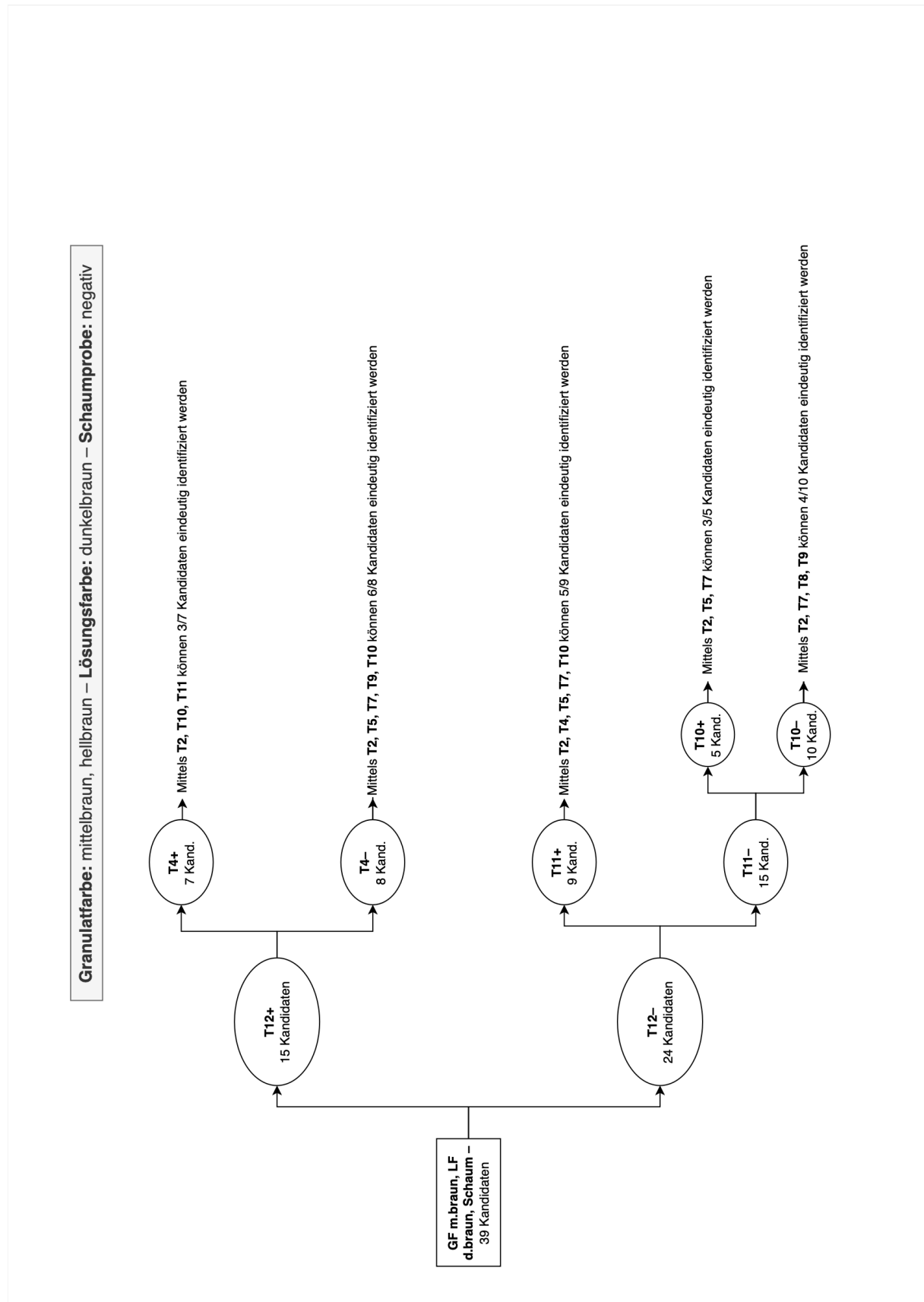
OW;2F;-

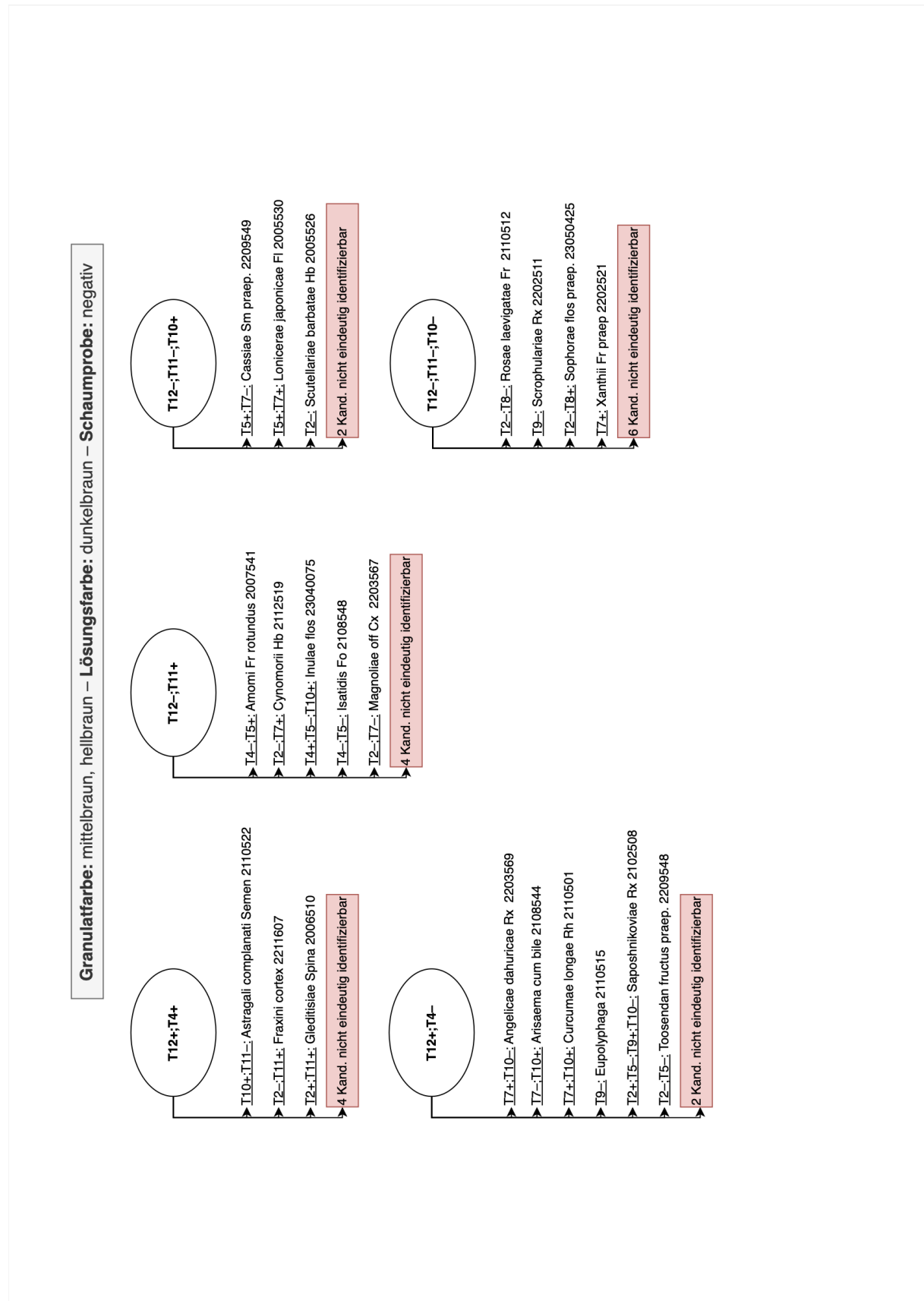
Succinum 2207551

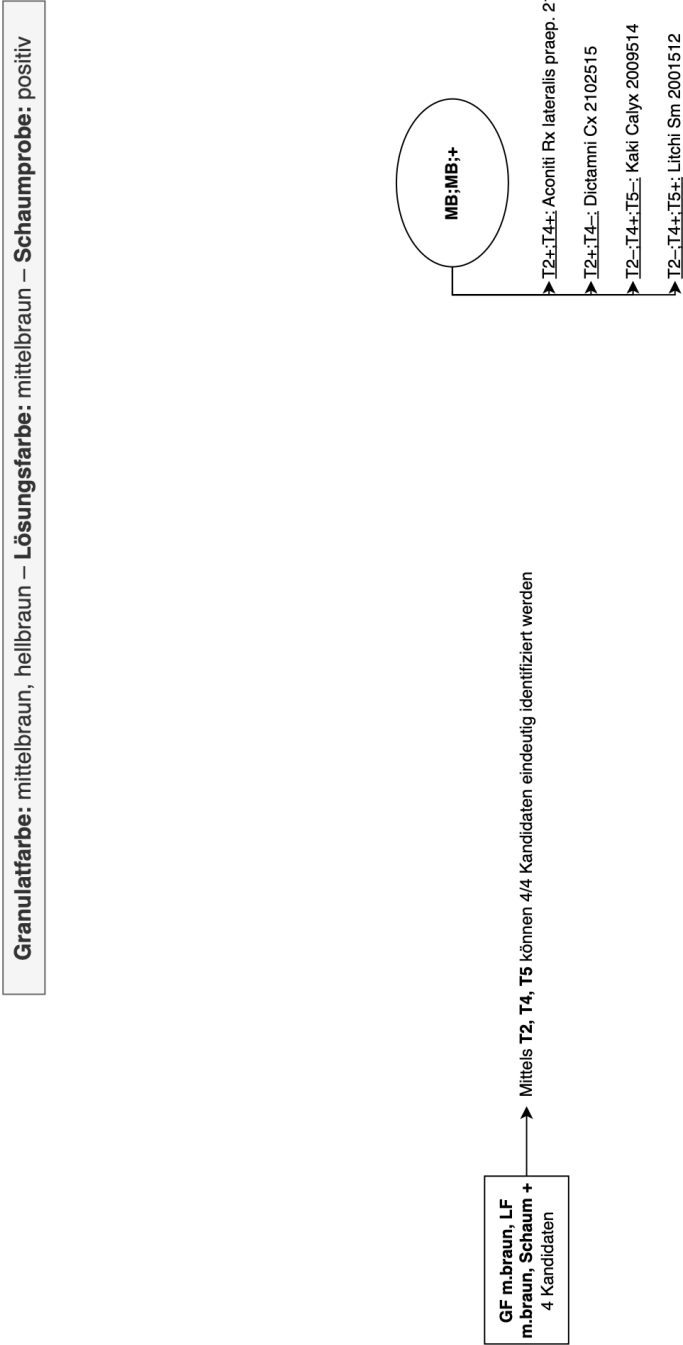


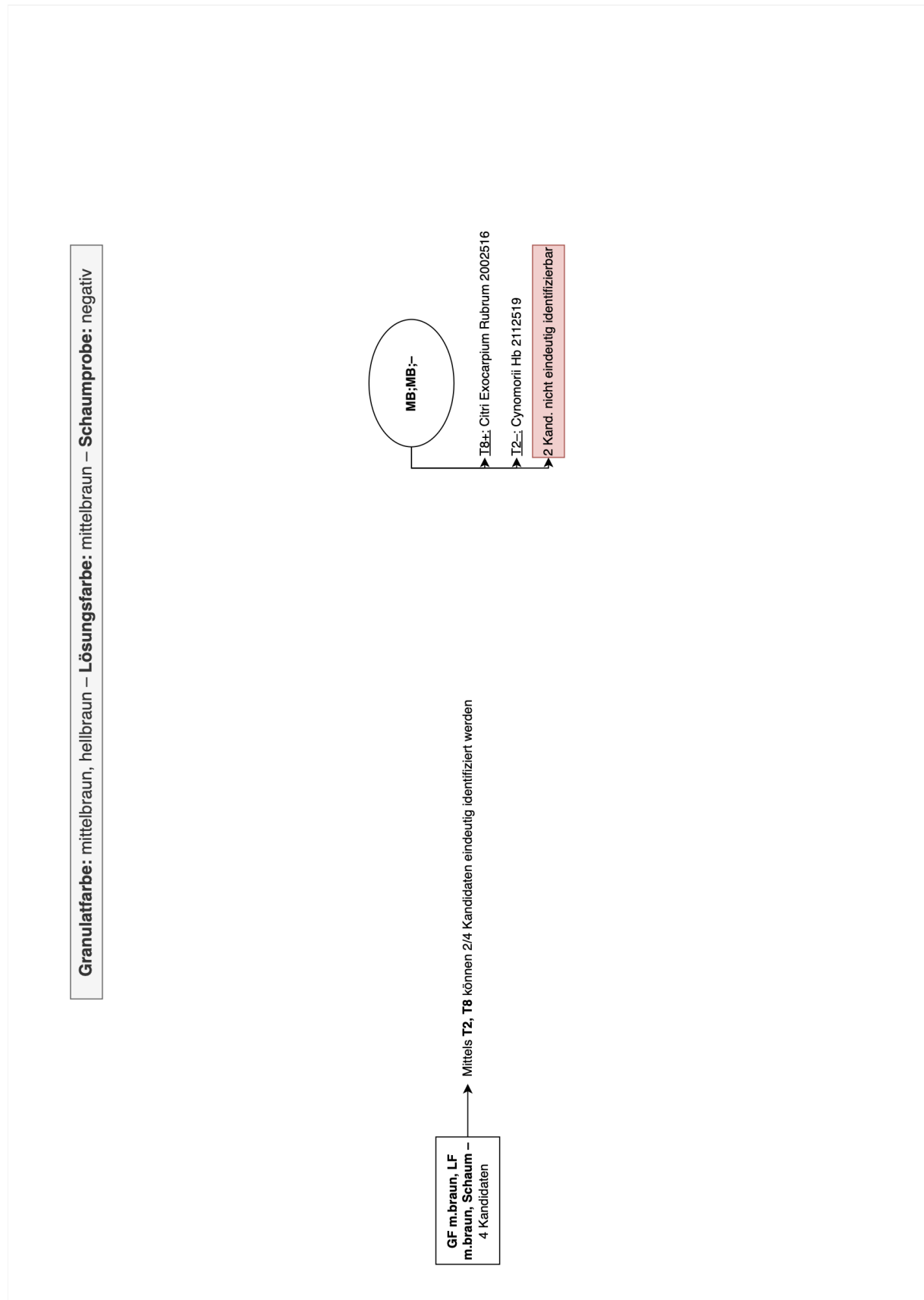


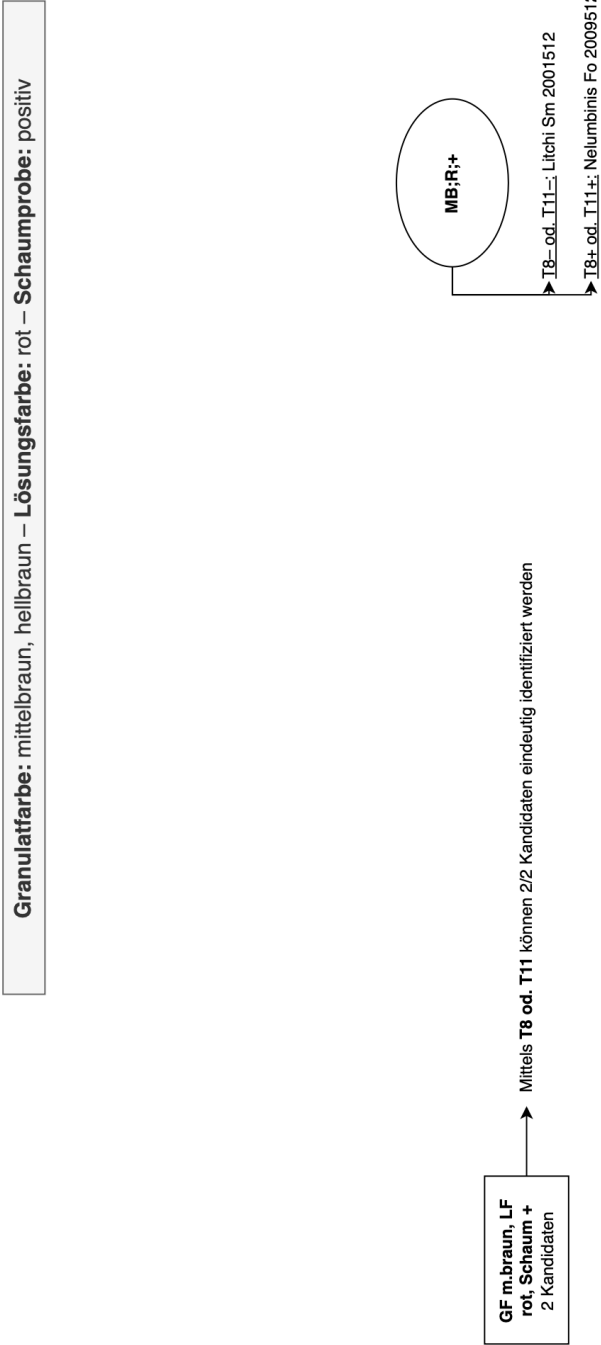


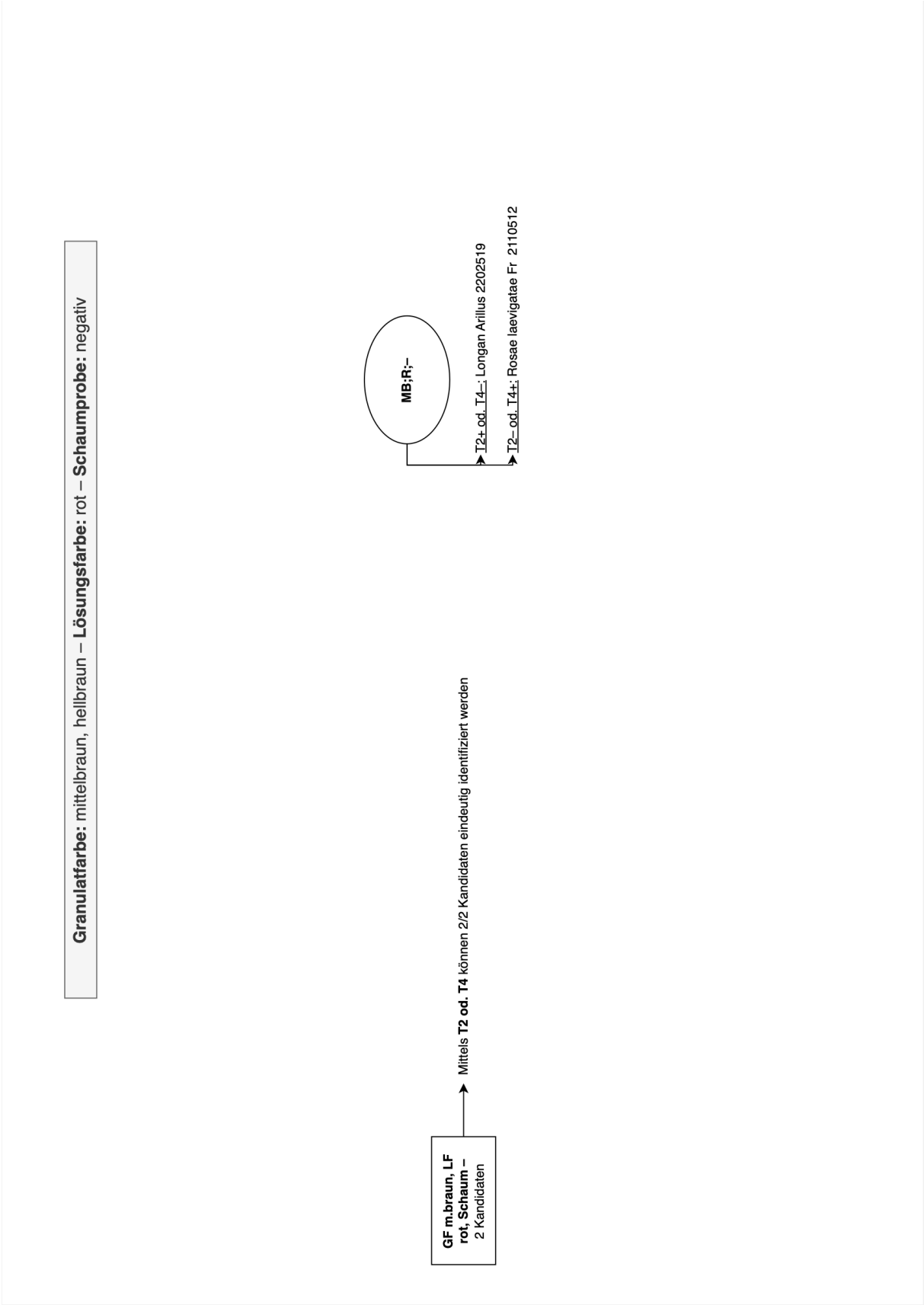


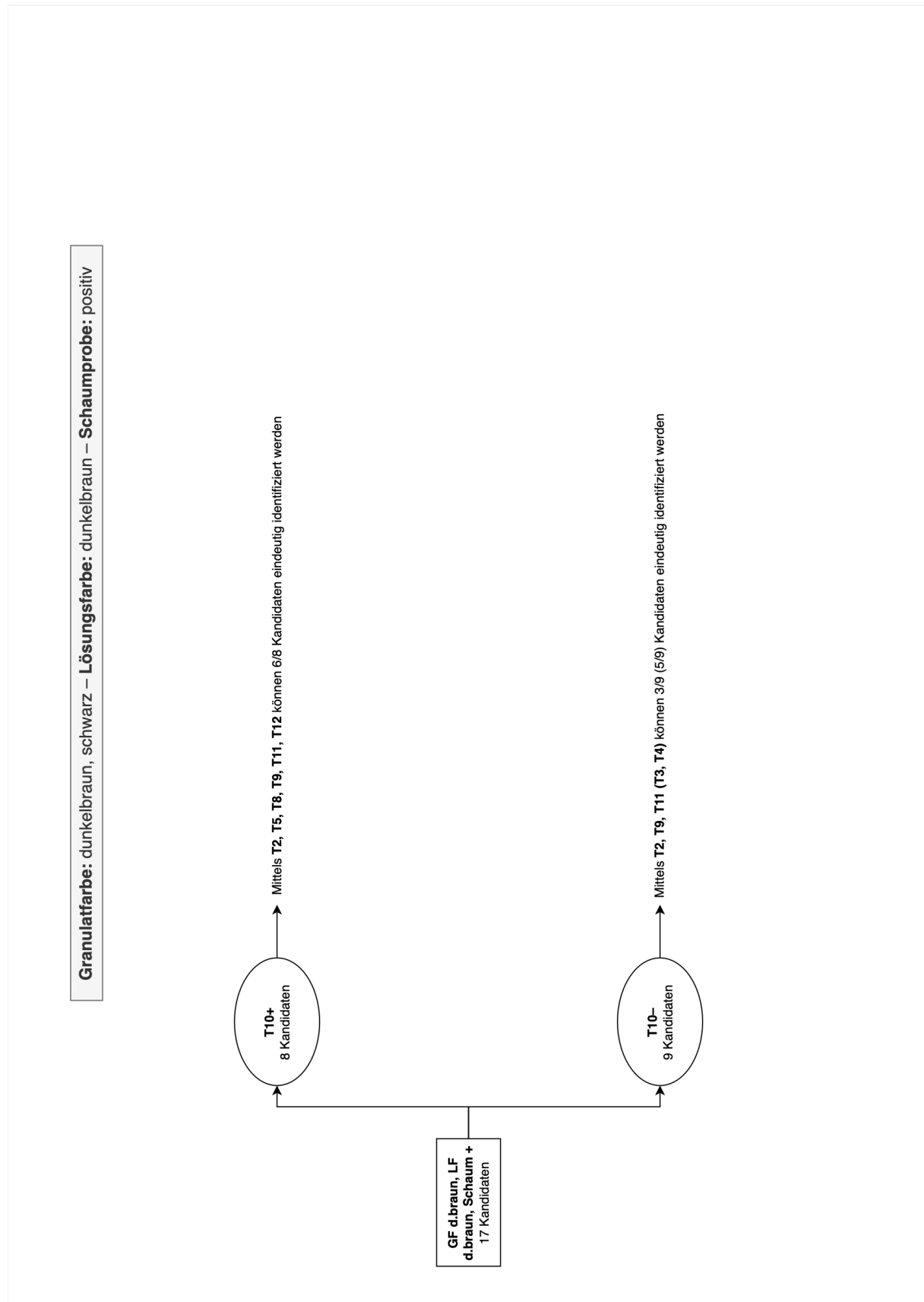


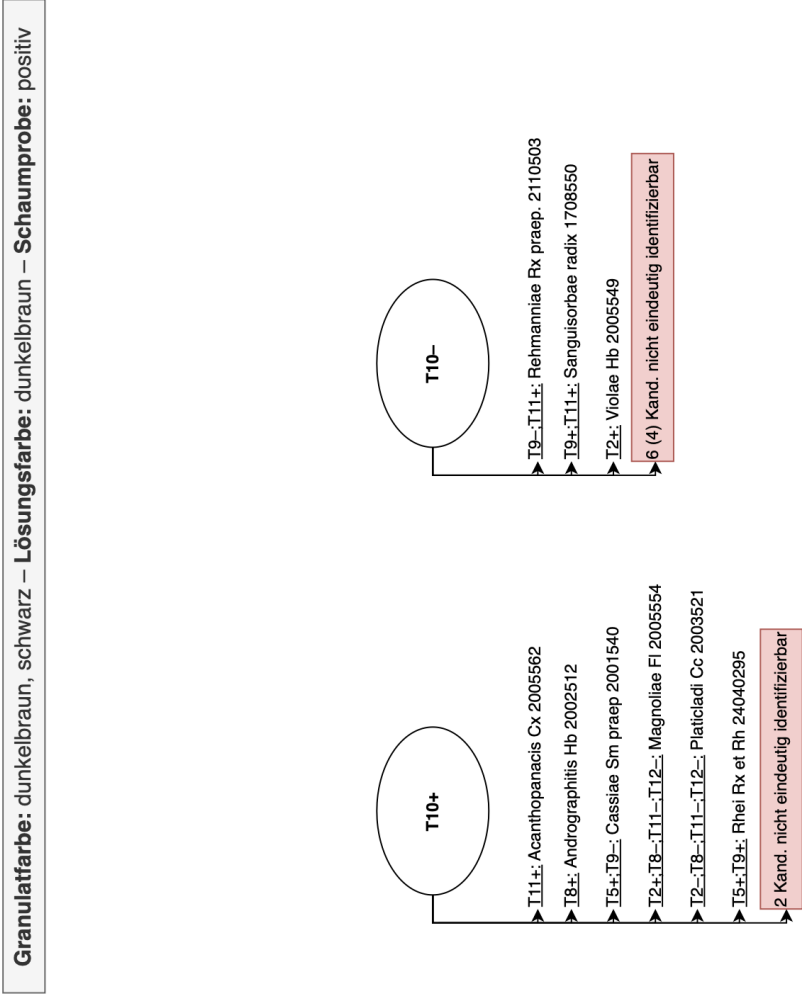


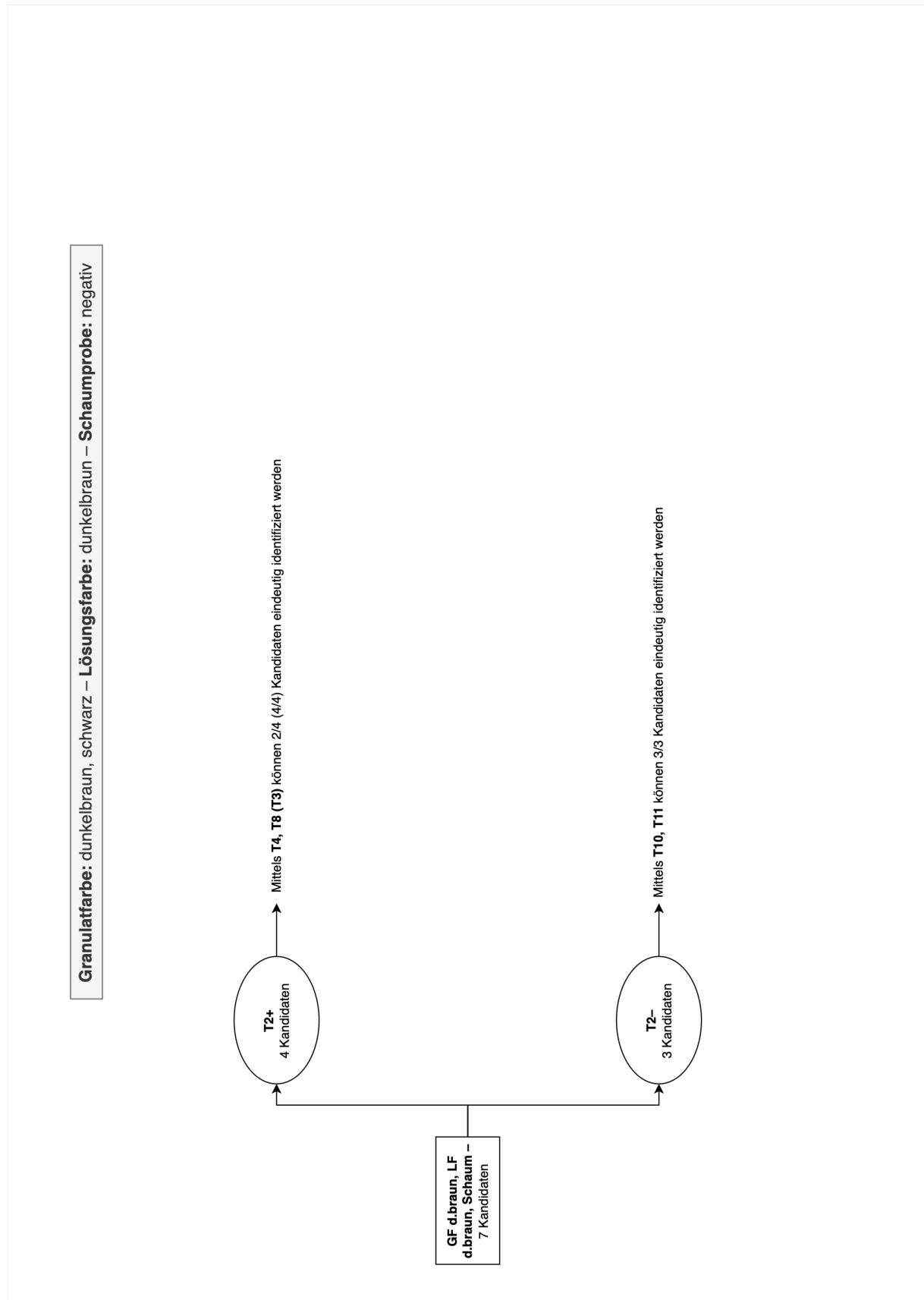


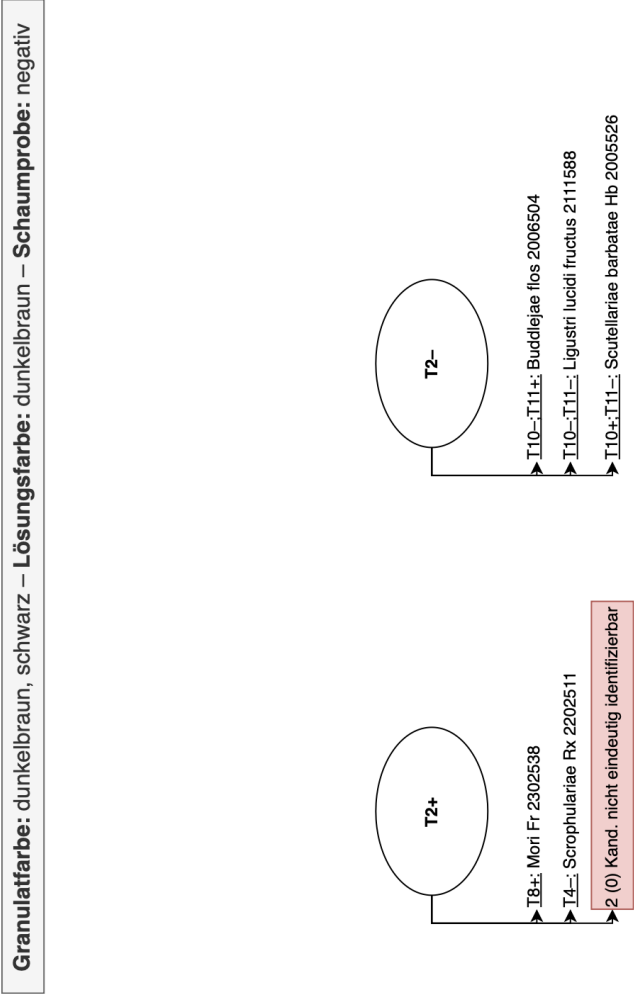


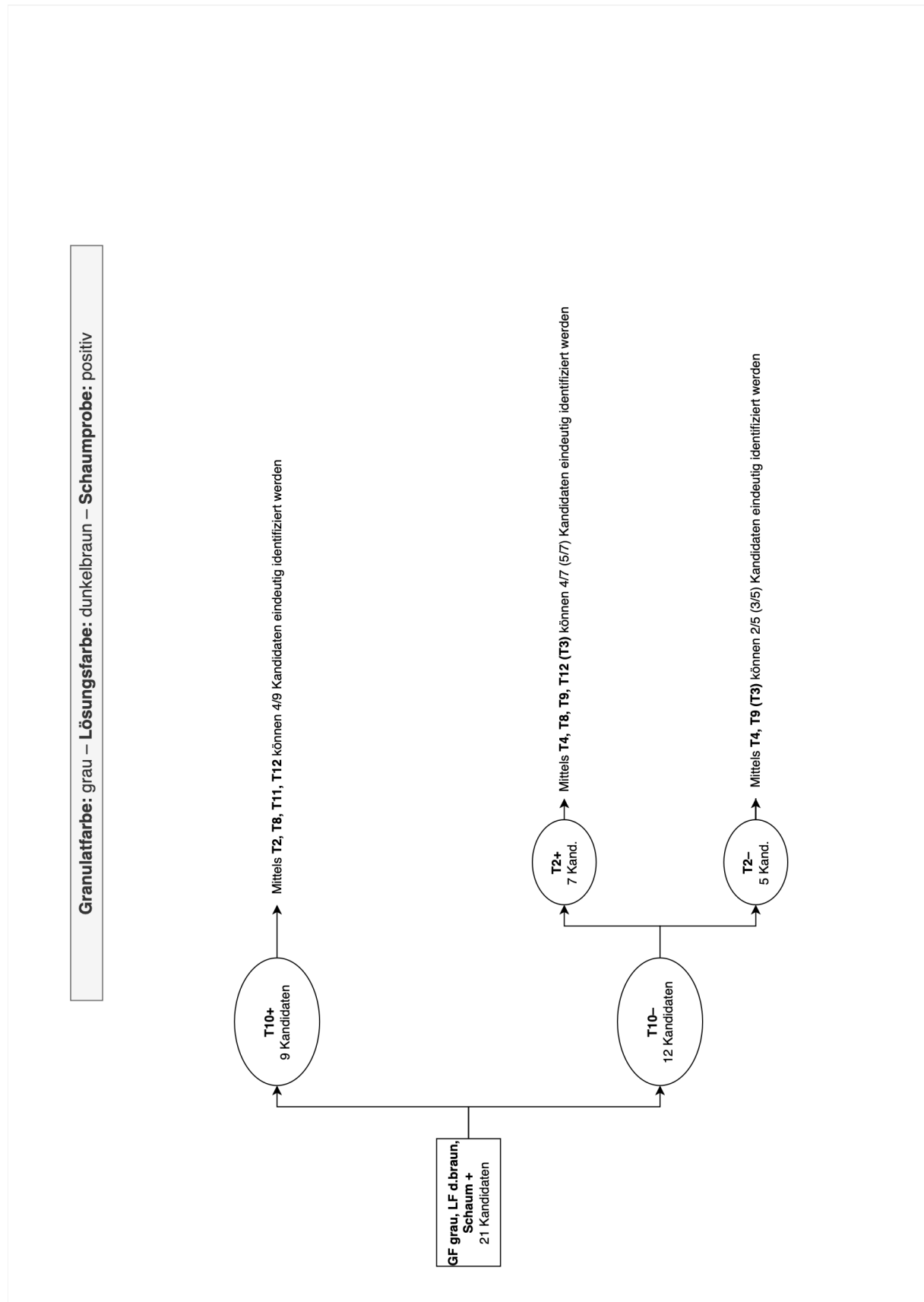












Granulatfarbe: grau – Lösungsfarbe: dunkelbraun – Schaumprobe: positiv

