



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2016“

**Teil 1
Durchführung und Ergebnisse
der Untersuchung eines Rotweins (FT16P01)**

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

Stand: 23.01.2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	8
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Herstellung des Untersuchungsgutes	8
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung	8
2.1.3	Verteilung des Untersuchungsgutes	11
2.2	Informationen zu Probenbehandlung und Untersuchungsumfang	12
2.3	Ergebnisübermittlung und Behandlung	13
2.4	Ergebnisbewertung	15
2.4.1	Bewertung der Laborleistung	16
2.4.2	Untere Grenze des Anwendungsbereiches	17
2.4.3	Spezielle Bewertungsregeln für einzelne Parameter	18
2.4.3.1	Vorhandener Alkohol	18
2.4.3.2	Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	18
2.4.3.3	Vergärbare Zucker	19
2.4.3.4	Flüchtige Säure	19
2.4.3.5	Schweflige Säure	20
3	Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen	20
3.1	Bewertung des Gesamtergebnisses	20
3.2	Ergebnisbewertung für das Weißweinprüfgut (FT16P01)	24
4	Anmerkungen zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden für einzelne Parameter bei allen Prüfgütern	25
4.1	Schweflige Säure und Reduktone	25
4.1.1	Reduktone	26
4.1.2	Freie Schweflige Säure	29
4.1.3	Gesamte Schweflige Säure	33
4.2	Flüchtige Säure und Acetat	34
4.2.1	Flüchtige Säure	34
4.2.2	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	35
4.3	Gesamte und L-Äpfelsäure	36
5	Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen	38
5.1	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT16P01	38
5.2	Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter	44
6	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern	46
6.1	Berechnete Parameter	46
6.2	Darstellung der analytischen Ergebnisse	46
6.2.1	Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse	46
6.2.2	Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren	47
6.2.3	Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse	47
6.2.4	Aufbau der Graphiken	47

6.3	Relative Dichte 20 °C/20 °C	49
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	49
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	50
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	52
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	52
6.4	Gesamtalkohol [g/L]	54
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	54
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse	55
6.4.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	56
6.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	56
6.5	Vorhandener Alkohol [g/L]	58
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	58
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	60
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	61
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	61
6.6	Gesamtextrakt [g/L]	63
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	63
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	64
6.6.3	Angaben zu den Analyseverfahren	65
6.6.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	66
6.7	Zuckerfreier Extrakt [g/L]	68
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	68
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	69
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	70
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	70
6.8	Vergärbare Zucker [g/L]	72
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	72
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	73
6.8.3	Reduktometrische Laborergebnisse	75
6.8.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	75
6.8.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	77
6.8.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	78
6.8.7	Angaben zu den Analyseverfahren	79
6.9	Gesamtsäure [g/L]	82
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	82
6.9.1	FTIR-Laborergebnisse	83
6.9.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	85
6.9.3	Angaben zu den Analyseverfahren	85
6.10	Reduktone [mg/L]	87
6.10.1	Laborergebnisse	87
6.10.2	Deskriptive Ergebnisse	88
6.10.3	Angaben zu den Analyseverfahren	89

6.11	Freie Schweflige Säure [mg/L]	90
6.11.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	90
6.11.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)	90
6.11.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)	92
6.11.4	Deskriptive Ergebnisse	94
6.11.5	Angaben zu den Analyseverfahren	94
6.12	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	96
6.12.1	Laborergebnisse	96
6.12.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	98
6.12.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	99
6.12.4	Deskriptive Ergebnisse	100
6.12.5	Angaben zu den Analyseverfahren	101
6.13	Glucose [g/L]	103
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse	103
6.13.2	FTIR-Laborergebnisse	104
6.13.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	105
6.13.4	Angaben zu den Analyseverfahren	105
6.14	Fructose [g/L]	107
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse	107
6.14.2	FTIR-Laborergebnisse	108
6.14.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	109
6.14.4	Angaben zu den Analyseverfahren	109
6.15	Glycerin [g/L]	111
6.15.1	Herkömmliche Laborergebnisse	111
6.15.2	FTIR-Laborergebnisse	111
6.15.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	112
6.15.4	Angaben zu den Analyseverfahren	113
6.16	pH-Wert	115
6.16.1	Herkömmliche Laborergebnisse	115
6.16.2	Angaben zu den Analyseverfahren	115
6.16.3	FTIR-Laborergebnisse	116
6.16.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	117
6.17	Weinsäure [g/L]	119
6.17.1	Herkömmliche Laborergebnisse	119
6.17.2	FTIR-Laborergebnisse	119
6.17.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	121
6.17.4	Angaben zu den Analyseverfahren	121
6.18	Flüchtige Säure [g/L]	123
6.18.1	Herkömmliche Laborergebnisse (Bewertungsbasis: Werte mit SO ₂ -Korrektur)	123
6.18.2	FTIR-Laborergebnisse	123
6.18.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO ₂ -Korrektur	125
6.18.4	Angaben zu den Analyseverfahren	125

6.19	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	127
6.19.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse (Bewertungsbasis HPLC + Enzymatik)	127
6.19.2	Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren	127
6.19.3	Angaben zu den Analyseverfahren	128
6.20	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	129
6.20.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	129
6.20.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	129
6.20.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	129
6.20.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	131
6.20.5	Angaben zu den Analyseverfahren	131
6.21	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	133
6.21.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	133
6.21.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	133
6.21.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	133
6.21.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	135
6.21.5	Angaben zu den Analyseverfahren	135
6.22	Sensorische Befunde	137
7	Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer	139

1 Einleitung

Zur Sicherung der Qualität der Analysenergebnisse in der amtlichen Qualitätsweinprüfung veranstaltet die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz jährlich eine Laborvergleichsuntersuchung. Wie in den vorangegangenen Jahren erfolgte die Durchführung in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik".

Eine Laborvergleichsuntersuchung ermöglicht es den zugelassenen Labors, ihre eigenen Analysendaten selbst zu überprüfen, und vermittelt der Landwirtschaftskammer einen Überblick über die Qualität dieser rechtlich vorgeschriebenen Analytik.

Die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz erfüllt mit dem Angebot der Laborvergleichsuntersuchungen eine Aufgabe, die ihr in der Verwaltungsvorschrift des Ministeriums für Wirtschaft, Verkehr, Landwirtschaft und Weinbau vom 28. April 2003 zur Durchführung der Qualitätsweinprüfung zugewiesen wurde. Sie hat mit Schreiben vom Februar 2016 alle bei ihr zugelassenen Laboratorien zur Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse eingeladen. Die Möglichkeit zur Teilnahme besteht über das Land Rheinland-Pfalz hinaus für alle, die Qualitätsweinanalysen für die amtliche Qualitätsweinprüfung durchführen.

Laboratorien mit einer Zulassung zum Einsatz des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR-Verfahren) in der amtlichen Qualitätsweinanalyse ist insbesondere auferlegt, an speziellen Laborvergleichsuntersuchungen mit dieser Methode teilzunehmen. Durch die Kooperation mit dem Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss wird hierzu die Gelegenheit geboten. Zu der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung sind über den Kreis der von der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien hinaus alle Laboratorien eingeladen, die das FTIR-Verfahren in der Weinanalytik einsetzen. Die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung umfasst die üblicherweise mit diesem Verfahren bestimmten Parameter.

Beide Laborvergleichsuntersuchungen wurden miteinander verknüpft, indem eine Probe allen Teilnehmern zur Verfügung stand, während die Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung weitere Proben zur Untersuchung mit dem FTIR-Verfahren erhielten. Sie sollen grundsätzlich im Rahmen ihrer Möglichkeiten zusätzlich mit anderen Methoden an mindestens zwei Proben die üblicherweise mit dem FTIR-Verfahren erfassten Parameter bestimmen.

Von den Laboratorien, die ausschließlich herkömmliche Untersuchungsmethoden einsetzen, wurden die Untersuchungen zwischen dem 05. April und dem 27. April 2016 durchgeführt, während die an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung beteiligten Laboratorien die Untersuchungen bis zum 30. April 2016 durchführten soweit nicht in Einzelfällen ein späterer Abgabetermin vereinbart wurde. Insgesamt 130 zugelassene und eingeladene Laboratorien, davon 86 Laboratorien für die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung, haben sich zur Teilnahme angemeldet. Ein Teilnehmer der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung konnte keine Ergebnisse einreichen. Insgesamt legten somit 129 Teilnehmer termingerecht Ergebnisreihen vor.

Die Durchführung und die Ergebnisse dieser verbundenen Laborvergleichsuntersuchungen werden in einem mehrteiligen Bericht beschrieben. Der vorliegende Teil 1 umfasst die allgemeinen organisatorischen Angaben zur Durchführung der verknüpften Laborvergleichsuntersuchungen und behandelt im Einzelnen die Ergebnisse einer Probe Rotwein (FT16P01) sowie für einzelne Parameter prüfgebietübergreifende Beobachtungen.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung des Untersuchungsgutes

Für die Durchführung der Untersuchungen wurde das Probenmaterial (Prüfgut) aus einem Verschnitt roter rheinhessischer Qualitätsweine aus der Qualitätsweinprüfung hergestellt. Durch Zusammenführen verschiedener Teilpartien unterschiedlichen Restzuckergehaltes wurde der gewünschte Restzuckergehalt von 14 g/L bis 15 g/L und damit im Grenzbereich der Zulässigkeit der Geschmacksangabe 'halbtrocken' sowie ein ausreichender Gehalt an freier Schwefliger Säure eingestellt. Weitere Zusätze erfolgten nicht. Insgesamt wurden 613 Flaschen à 0,33 L abgefüllt. Nach Rückführen des Inhaltes der ersten 15 gefüllten Flaschen wurde die erste Probe und während der weiteren Füllung jede 17. Flasche, insgesamt 37 Flaschen, als Basis für die Homogenitätsprüfung entnommen.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung

Aus den aufsteigend nummerierten Flaschen wurden 12 mittels Zufallsgenerator ausgewählt und zur Prüfung der Homogenität verwendet. Aus jeder Probe wurden zwei Serien von je zwei Messproben erstellt, die unter Wiederholbedingungen untersucht wurde. Die jeweils erste Messung erfolgte in der Reihenfolge der Auswahl während für die jeweils zweite Messung eine eigene Zufallsfolge verwendet wurde. Eine Serie der Teilproben wurde zur Bestimmung der relativen Dichte 20 °C/20 °C mittels Biegeschwinger und des Alkoholgehaltes mittels Nahinfrarotspektroskopie sowie von relativer Dichte, vorhandenem Alkohol, Gesamtsäure, pH-Wert, Glucose, Fructose, Gesamtzucker, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und flüchtiger Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) verwendet. An der zweiten Serie wurden jodometrisch freie und gesamte Schweflige Säure sowie Reduktone mit elektrometrischer Endpunktbestimmung an einem automatisierten Titrator bestimmt. Die weitgehend automatisierten Untersuchungsabläufe begünstigen eine geringe Wiederholstreuung. Die erhaltenen Daten sind in der Tabelle 1 aufgeführt. Hierbei wurden die Messergebnisse für Äpfelsäure nicht berücksichtigt, da die Messwerte bei 0,6 g/L und damit im Bereich der Bestimmungsgrenze des FTIR-Verfahrens lagen.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT16P01

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand.	Alkohol	Gesamt-	Glucose	Fructose	pH-	Gesamt-	Wein-	Milch-	Flüchtige	Freie	Gesamte	Reduktone	
		dens.	NIR	FTIR	zucker	g/L	g/L	Wert	Säure	säure	säure	Säure	SO2	SO2	mg/L	
			g/L	g/L	g/L				g/L	g/L	g/L	g/L	mg/L	mg/L	mg/L	
1	12	0,99916	0,99915	93,87	94,510	13,918	6,584	7,437	3,460	5,19	1,727	1,798	0,551	55,2	162,4	15,6
2	9	0,99926	0,99914	94,10	94,459	14,027	6,507	7,618	3,455	5,19	1,719	1,826	0,537	54,2	161,9	15,6
3	32	0,99925	0,99915	94,18	94,381	13,838	6,954	7,491	3,468	5,18	1,738	1,905	0,558	53,1	161,4	15,6
4	28	0,99924	0,99916	94,10	94,250	13,916	6,917	7,367	3,455	5,17	1,770	1,838	0,548	54,2	160,3	15,6
5	2	0,99922	0,99917	94,18	94,252	13,911	6,663	7,548	3,455	5,19	1,708	1,820	0,543	53,1	161,4	15,7
6	25	0,99922	0,99914	94,10	94,332	13,919	6,528	7,461	3,459	5,18	1,710	1,854	0,548	53,7	160,5	15,6
7	16	0,99924	0,99915	94,10	94,180	13,784	6,791	7,511	3,451	5,19	1,716	1,881	0,545	54,2	160,3	15,0
8	13	0,99925	0,99917	94,10	94,130	13,687	6,866	7,485	3,458	5,19	1,714	1,921	0,555	53,7	159,7	15,6
9	20	0,99925	0,99918	94,02	94,085	13,837	6,756	7,404	3,461	5,17	1,764	1,932	0,558	53,1	161,4	15,3
10	11	0,99925	0,99918	94,10	94,327	14,067	6,690	7,537	3,460	5,19	1,698	1,851	0,544	54,2	163,5	15,0
11	1	0,99908	0,99905	93,94	94,133	13,550	6,780	7,240	3,448	5,24	1,760	1,830	0,557	50,5	154,4	14,3
12	37	0,99923	0,99919	94,10	94,155	13,909	6,685	7,556	3,460	5,19	1,733	1,889	0,551	52,6	158,4	15,0
13	20	0,99909	0,99915	94,10	94,184	13,837	6,684	7,446	3,458	5,18	1,726	1,859	0,554	55,7	161,4	16,7
14	16	0,99923	0,99916	94,10	94,219	13,871	6,840	7,388	3,455	5,18	1,710	1,889	0,543	55,2	161,6	16,2
15	13	0,99920	0,99918	94,10	94,412	13,732	6,804	7,566	3,465	5,18	1,696	1,915	0,552	55,2	160,0	17,4
16	37	0,99923	0,99918	94,10	94,185	13,992	6,996	7,423	3,455	5,19	1,733	1,883	0,566	52,6	160,8	16,7
17	32	0,99930	0,99916	94,02	94,403	14,057	6,686	7,502	3,452	5,18	1,713	1,858	0,518	55,2	163,1	16,2
18	28	0,99923	0,99915	94,02	94,307	14,057	6,692	7,547	3,454	5,17	1,751	1,805	0,536	54,7	163,3	16,4
19	2	0,99919	0,99907	94,18	94,462	13,886	6,643	7,532	3,454	5,18	1,712	1,952	0,553	53,1	160,7	15,7
20	1	0,99907	0,99904	93,94	94,164	13,612	6,614	7,337	3,450	5,23	1,737	1,807	0,541	50,5	155,2	14,6
21	12	0,99922	0,99914	94,18	94,317	13,783	6,676	7,533	3,455	5,18	1,722	1,865	0,535	54,7	162,5	15,3
22	11	0,99923	0,99919	94,18	94,117	13,931	6,860	7,577	3,462	5,16	1,739	1,908	0,553	55,2	160,0	14,6
23	25	0,99921	0,99914	94,10	94,339	13,899	6,855	7,469	3,453	5,17	1,750	1,868	0,564	54,2	161,1	15,1
24	9	0,99923	0,99917	94,18	94,249	14,102	6,762	7,443	3,466	5,16	1,770	1,829	0,558	55,2	162,4	15,7

Gelb markierte Messergebnisse stellen sich in den Graphiken als Ausreißer dar.

Die Messergebnisse wurden graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen oder Proben und in einem Korrelationstest auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge (Lfd.-Nr.) sowie von der Füllreihenfolge (Probe-Nr.) geprüft. Hierbei fielen die Messergebnisse bei der zu Beginn der Füllung entnommenen Probe 1 bei den Parametern Relative Dichte (densitometrisch und FTIR), Vorhandener Alkohol (Nahinfrarotmessung (NIR) und FTIR), Gesamtsäure (FTIR), Fructose (FTIR) und Gesamtzucker (FTIR), Freie und Gesamte Schweflige Säure als abweichend auf und führten bei den Ergebnissen der densitometrischen Messung der Relativen Dichte zu eine mäßigen, schwach signifikanten Korrelation der Messergebnisse zur Probennummer. Die Messergebnisse der nach 16 gefüllten Flaschen entnommenen Probe 2 sind unauffällig. Außerdem traten einzelne Fehlmessungen bei der densitometrischen Messung der Relativen Dichte (Lfd. Nr. 13), der FTIR-Messung dieses Parameters (Lfd. Nr. 19) sowie der Nahinfrarotmessung des Vorhandenen Alkohols (Lfd. Nr. 1) auf. Letzterer Messwert stammte aus einer Wiederholung der Messung nach 30 Minuten wie bereits bei der Übermittlung der Messergebnisse mitgeteilt wurde. Alle weiteren Messungen weisen keine Auffälligkeiten auf. Insbesondere bei deutlicher abweichenden einzelnen Messwerten liegt der zweite Messwert der Probe im Kernbereich des Schwarms der weiteren Messergebnisse.

Abschließend wurde die Streuung der Messwerte varianzanalytisch untersucht. Die Ergebnisse dieser Prüfung sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für Charge FT16P01

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_r)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_z)	s_r/s_z	s_{Pr}/s_z	
Rel. Dichte (dens.)	0,999212	24	3,3755	0,0236	0,000039	0,000043	0,000132	0,297	0,323	0,000064
ohne Probe 1	0,999224	22	0,9700	0,5152	0,000041		0,000132	0,309		0,000066
ohne Probe 1 und Lfd. Nr. 13	0,999230	21	1,8280	0,1779	0,000024	0,000016	0,000132	0,178	0,118	0,000058
Rel. Dichte FTIR	0,999148	24	5,3391	0,0037	0,000023	0,000034	0,000132	0,174	0,256	0,000057
ohne Probe 1	0,999158	22	1,3264	0,3240	0,000024	0,000010	0,000132	0,181	0,073	0,000058
ohne Probe 1 und Lfd. Nr. 19	0,999162	21	3,5790	0,0283	0,000011	0,000013	0,000132	0,085	0,099	0,000055
Vorh. Alkohol (NIR)	94,087	24	1,2449	0,3550	0,0783	0,0274	0,535	0,146	0,051	0,2266
ohne Probe 1 und Lfd. Nr. 1	94,111	21	1,1429	0,4185	0,0506	0,0139	0,535	0,095	0,026	0,2226
Vorh. Alkohol FTIR	94,273	24	1,7182	0,1830	0,105	0,0631	0,535	0,197	0,118	0,2358
Glucose FTIR	6,743	24	0,6706	0,7421	0,140		0,225	0,621		0,1578
Fructose FTIR	7,476	24	1,9471	0,1338	0,0721	0,0496	0,245	0,295	0,203	0,1188
ohne Probe 1	7,493	22	0,6653	0,7356	0,0724		0,245	0,295		0,1215
Gesamtzucker FTIR	13,880	24	6,4423	0,0016	0,0740	0,1221	0,418	0,177	0,292	0,1811
ohne Probe 1	13,907	22	3,3291	0,0304	0,0762	0,0822	0,418	0,182	0,197	0,1850
pH-Wert FTIR	3,457	24	1,2583	0,3484	0,0048	0,0017	0,0476	0,100	0,036	0,0196
Gesamtsäure FTIR	5,185	24	5,5382	0,0032	0,0102	0,0154	0,107	0,095	0,144	0,0440
ohne Probe 1	5,180	22	0,7333	0,6837	0,0104		0,107	0,098		0,0446
Weinsäure FTIR	1,730	24	1,5171	0,2422	0,0196	0,0100	0,0901	0,218	0,111	0,0405
Milchsäure FTIR	1,866	24	1,5224	0,2404	0,0380	0,0194	0,0961	0,395	0,202	0,0522
Flücht. Säure FTIR	0,549	24	0,5689	0,8204	0,0119		0,0286	0,416		0,0159
Freie SO ₂	53,888	24	4,5315	0,0075	0,846	1,124	4,731	0,179	0,238	2,0538
ohne Probe 1	54,195	22	1,3613	0,3094	0,883	0,375	4,754	0,186	0,079	2,1090
Gesamte SO ₂	160,737	24	6,1729	0,0020	1,180	1,898	5,357	0,220	0,354	2,4116
ohne Probe 1	161,277	22	1,1851	0,3903	1,221	0,371	5,357	0,228	0,069	2,4718
Reduktone	15,604	24	1,3104	0,3239	0,681	0,268	1,651	0,412	0,162	0,9149

Die Varianzanalyse unter Einbeziehen aller Messwerte zeigt für sechs Parameter einen signifikanten Effekt, der bei vier Parametern nach Ausschluss der auch in den Graphiken auffälligen Probe 1 entfällt. In diesen wie in den anderen Fällen eines nicht signifikanten Ergebnisses der

Varianzanalyse ist der Quotient (siehe Spalte "Quotient s_r/s_z ") aus der Wiederholstandardabweichung (Spalte: Standardabweichung Fehler s_r) und der Zielstandardabweichung (Spalte: Standardabweichung Ziel s_z) für die Aussagekraft des nicht signifikanten Testergebnisses wesentlich. Er soll den Betrag 0,5 nicht überschreiten. Zeigt die Varianzanalyse keine Signifikanz und liegt der Quotient s_r/s_z nicht über 0,5 folgt, dass das Untersuchungsmaterial hinsichtlich dieser Parameter als homogen zu betrachten ist. Diese Doppelbedingung wird nur bei dem Parameter Glucose nicht erfüllt, d.h. die notwendige Präzision der analytischen Prüfung für eine zuverlässige Aussage der Varianzanalyse wurde nicht erreicht. Damit tragen die Messergebnisse für diesen Parameter nicht zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität des Prüf-gutes bei. Damit ist für verbleibenden Parameter mit nicht signifikantem Ergebnis der Varianzanalyse ausreichende Homogenität zuverlässig nachgewiesen.

Nur für die Parameter Relative Dichte (FTIR) und Gesamtzucker (FTIR) zeigt die Varianzanalyse auch nach Ausschluss der Probe 1 und auffälliger einzelner Messergebnisse ein schwach signifikantes Ergebnis, d.h. bei diesen Parametern ist die Streuung zwischen den Proben gesichert größer als die Standardabweichung des Messfehlers. In diesem Fall muss geprüft werden, ob die angezeigte Inhomogenität für die Laborvergleichsuntersuchung relevant ist. Hierzu wird die Standardabweichung der Proben (s_{Pr}) mit der Zielstandardabweichung (s_z) verglichen. Liegt der Quotient beider Größen (Spalte "Quotient s_{Pr}/s_z ") unter 0,3, d.h. unter 30 % der Zielstandardabweichung so ist das Material ausreichend homogen. Dies trifft für beide Parameter zu und spricht für ausreichende Homogenität. Letztlich entscheidend ist das Prüfkriterium nach Fearn und Thompson (Analyst 126 (2001), 1414-1417). Dieses berücksichtigt weitere statistische Einflüsse. Hiernach darf die Standardabweichung der Probenahme (Spalte "Proben (s_{Pr})" den in der Spalte "Maximal tolerierter Wert für s_{Pr} " ausgewiesenen Betrag nicht überschreiten. Da auch dieses Prüfkriterium eingehalten wird, gilt auch für die Relative Dichte (FTIR) und Gesamtzucker die Forderung einer ausreichenden Homogenität als erfüllt.

Zusammenfassend führt die Homogenitätsprüfung damit zu dem Ergebnis, dass das Material hinsichtlich der geprüften und aussagekräftigen Parameter ausreichend homogen und somit für den Einsatz in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet ist.

2.1.3 Verteilung des Untersuchungsgutes

Für die bei der Landwirtschaftskammer angemeldeten Teilnehmer wurde das benötigte Untersuchungsgut durch einen Paketdienst oder durch Boten ab dem 29.03.2016 abgesandt. Die zur Abholung der Proben angemeldeten Laboratorien konnten somit ab dem 05.04.2016 das Untersuchungsgut bei der jeweils von ihnen gewählten Prüf-stelle in Empfang nehmen. Insgesamt wurde einschließlich einer Reserve bei den Prüfstellen Material für 42 Laboratorien mit je 3 Flaschen a 0,33 L bereitgestellt. Je Labor wurde dieselbe Probenmenge an weitere 12 Laboratorien, die um Zusendung gebeten hatten, am 29.03.2016 abgesandt. Die 86 Teilnehmer an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung erhielten das Prüfmaterial per Paketdienst ebenfalls zu dieser Zeit. An diese Teilnehmer wurden außer dem Weißwein FT16P01 vier weitere Prüfgüter zu je 2 bis 3 Flaschen a 0,33 L bzw. bei dem Prüfgut FT16P03 a 0,25 L versandt. Die

zugesandte Anzahl Flaschen je Probe richtete sich danach, welche der Prüfgüter den Teilnehmern zur Untersuchung mit herkömmlichen Methoden aufgegeben waren.

2.2 Informationen zu Probenbehandlung und Untersuchungsumfang

Alle Laboratorien erhielten je nach dem Umfang ihrer Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung Informationsblätter über die Aufgabenstellung und Hinweise für die Durchführung der Untersuchungen sowie Formblätter zur Ergebnismitteilung soweit dies erforderlich war.

Den Laboratorien, die unter ausschließlicher Anwendung herkömmlicher Untersuchungsverfahren im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse an der Untersuchung des Rotweins FT16P01 teilnahmen, wurden als zu bestimmende Parameter Relative Dichte 20°C/20°C, Vorhandener Alkohol, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Freie und Gesamte Schweflige Säure benannt. Es wurde ausdrücklich darauf hingewiesen, dass eine Bestimmung der Reduktone erforderlich war, falls der Gehalt an Schwefliger Säure jodometrisch bestimmt wurde. Der bestimmte Gehalt an Reduktonen sollte nicht abgezogen aber mitgeteilt werden. Die Bestimmung des Parameters Glucose ist in der amtlichen Qualitätsweinanalytik nicht mehr gefordert. Die Möglichkeit zur Abgabe eines Untersuchungsergebnisses wurde dennoch eingeräumt. Weiterhin wurde auf die Regeln zur Auswahl der anzuwendenden Untersuchungsmethoden hingewiesen, wobei das Untersuchungsgut als "2015er Qualitätswein Rheinhessen, halbtrocken " betrachtet und auch einer sensorischen Prüfung unterzogen werden sollte. Erstmals wurde diesen Laboratorien die Möglichkeit geboten, die Untersuchungsergebnisse als Exceldatei mitzuteilen, die eine Nutzungsanleitung enthielt und den Teilnehmern per E-Mail zugesandt wurde. Sie erleichtert insbesondere Zusatzangaben, die fachlich für die Bewertung der Untersuchungsergebnisse erforderlich sind. Diese Form der Ergebnismitteilung soll zukünftig die Regel sein. Sofern die Exceldatei nicht genutzt wurde, wurde gebeten das Formblatt für die Amtliche Qualitätsweinprüfung als Standardform der Ergebnismitteilung zu benutzen und hierbei auch die Felder für die berechneten Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt auszufüllen. Außerhalb Rheinland-Pfalz ansässige Laboratorien wurden auf die Fundstelle des Methodenkatalogs der Landwirtschaftskammer und der Kodierungen der Untersuchungsverfahren im Internet (www.lwk-rlp.de) hingewiesen.

Die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen erhielten neben dem Informationsschreiben über die Aufgabenstellung eine spezielle Anleitung zur Durchführung der FTIR-Messungen sowie zu Art und Export der für die Auswertung der Laborvergleichsuntersuchung erforderlichen Daten. Es wurde insbesondere aufgegeben, die FTIR-Messungen im Kalibriermodus, d.h. unter Aufzeichnung der spektralen Rohdaten, durchzuführen. Nach Abschluss der Untersuchungen waren sowohl die auf dem Bildschirm dargestellten Ergebnisse als auch die Rohdaten zu exportieren und als Datei an den Auswertenden zu übermitteln. Darüber hinaus wurde um die Überlassung der benutzten Produktkalibrierung gebeten, soweit die Gerätesoftware deren Export ermöglicht und sie nicht bereits im Vorjahr eingesandt wurde. Zumindest waren aus der Produktkalibrierung die B0-Koeffizienten, Slope- und Interzept-Werte auf einem zur Verfügung gestellten Formblatt bzw. Registerblatt der Datei zur Ergebnismitteilung mitzuteilen. Die FTIR-Untersuchung war an 5 Proben durchzuführen. Die mit der allgemeinen Laborvergleichsunter-

suchung gemeinsame Probe, die unter dem Code FT16P01 verteilt wurde, war über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus mit anderen als der FTIR-Methode auf Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure zu untersuchen, soweit dies dem jeweiligen Labor aufgegeben und möglich war. Außerdem wurde die Möglichkeit geboten die Ergebnisse der Bestimmung von Acetat (als Essigsäure), L-Äpfelsäure oder L-Milchsäure mitzuteilen. Somit wurde der Umfang der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden zumindest auf die Parameter aufgestockt, die üblicherweise mit FTIR-Spektroskopie ermittelt werden. Der resultierende Untersuchungsumfang galt für alle auf diese Weise zu untersuchenden Proben. Im Rahmen ihrer Möglichkeiten waren auf die genannten Parameter von allen Laboratorien jeweils mindestens zwei der fünf Proben zusätzlich mit anderen Methoden zu untersuchen. Die Untersuchung aller Proben war anheimgestellt. Eine ausreichende Anzahl Untersuchungsergebnisse mit anderen Methoden als dem FTIR-Verfahren war für alle fünf Proben erforderlich, weil die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Bezugnahme auf den Median der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen, bevorzugt mit Referenzmethoden, bewertet werden sollten. Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse und der eingesetzten herkömmlichen Methoden wurden als bevorzugte Mitteilungsform eine Exceldatei und alternativ Formblätter zur Verfügung gestellt.

Als Abgabetermin für die Laboratorien, die ausschließlich mit herkömmlichen Methoden im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse untersuchten, wurde der 27.04.2016 und als Ausschlussstermin der 29.04.2016 benannt. Für Laboratorien, die eine umfangreichere Aufgabenstellung zu bearbeiten hatten, wurde der Abgabetermin auf den 30.04.2016, der Ausschlussstermin auf den 05.05.2016 festgesetzt. In begründeten Einzelfällen konnte eine darüber hinaus gehende Abgabefrist vereinbart werden.

2.3 Ergebnisübermittlung und Behandlung

Im Wesentlichen erfolgte die Ergebnisübermittlung termin- und formgerecht, d.h. wie erbeten auf den vorgegebenen Formularen oder als Dateien per E-Mail. An die Landwirtschaftskammer sandten 19 Laboratorien termingerecht ihre Befunde ein. Zwei Befunde wurden nach Erinnerung unmittelbar an den Auswerter gesandt. Weitere 27 Teilnehmer benutzten die zugesandte Exceldatei zur Ergebnismitteilung, wobei 4 Teilnehmer beide Möglichkeiten zur Ergebnismitteilung nutzten, sodass letztlich 44 Laborergebnismitteilungen aus dem Kreis der unmittelbar von der Landwirtschaftskammer betreuten Teilnehmer vorlagen. 85 von 86 angemeldeten Teilnehmern des erweiterten Ringversuchs übermittelten Formblätter und Dateien unmittelbar an den Auswertenden. Fünf Teilnehmer waren an dem erweiterten Parameterumfang interessiert und beteiligten sich nur mit Untersuchungen nach anderen Methoden. Ein weiterer Teilnehmer des erweiterten Ringversuchs beschränkte sich vereinbarungsgemäß auf die Parameter der amtlichen Qualitätsweinprüfung. Fünf Teilnehmer aus Laboratorien, die nur das FTIR-Verfahren einsetzen, konnten keine Ergebnisse mit anderen als der FTIR-Methode mitteilen. 9 Teilnehmer teilten Ergebnisse zu einer oder mehreren Proben mit, die sie mit zwei Kalibrierungen gemessen haben. Daher konnten insgesamt bis zu 88 FTIR-Messergebnisse vorliegen. Tatsächlich lagen nur bis zu 86 Messergebnisse vor. Insgesamt gingen 27 Produktkalibrierungen (PRD-

Dateien), davon aus 3 Laboratorien für Rot- und Weißweine unterschiedliche Dateien ein. Rohdaten-Dateien (CSV-Dateien) sandten 41 Teilnehmer ein.

Bei der Produktkalibrierung AP_2011 liegt insoweit eine Besonderheit vor, als diese bzw. die in ihr enthaltenen Parameterkalibrierungen für Vorhandenen Alkohol, Gesamtsäure, Glucose und Fructose von der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz verpflichtend für die Verwendung bei der amtlichen Qualitätsweinanalyse aktualisiert wurde. Die Parameterkalibrierungen für Alkohol und Gesamtsäure sind identisch mit den seit 2003 für die Bestimmung dieser Parameter vorgegebenen Parameterkalibrierungen. Die Parameterkalibrierungen für Glucose und Fructose ersetzen in Anpassung an die geänderte Definition des weinrechtlichen Zuckerbegriffes die bisherige, auf reduktometrischen Zuckerbestimmungen beruhende Parameterkalibrierung für Vergärbare Zucker. Die Summe der Ergebnisse für Glucose und Fructose ist im Untersuchungsbefund als Vergärbare Zucker einzutragen. In der von der Landwirtschaftskammer zur Verfügung gestellten Fassung enthalten die Parameterkalibrierungen noch keine Slope-Interzept-Korrektur, d.h. der Slope-Wert ist stets 1,0 und der Interzept-Wert Null. In der Regel ist eine Anpassung an die Besonderheiten der einzelnen Geräte und eventuell Weinjahrgänge in den anwendenden Laboratorien erforderlich, um bestmögliche Untersuchungsergebnisse zu erhalten. Nach der Produktbezeichnung wurden erweiterte, d.h. alle gängigen Parameter der FTIR-Untersuchung umfassende Produktkalibrierungen auf der Basis der Kalibrierung AP_2011 von 14 Teilnehmern eingesetzt. 2 Teilnehmer teilten zusätzliche Messergebnisse auf dieser umfassenden Basis mit und nur 1 Teilnehmer beschränkte sich auf die oben genannten vier Parameter der Produktkalibrierung AP_2011. Eine zusätzliche Messung ist nur sinnvoll, wenn die verwendete Fassung der Produktkalibrierung bei den enthaltenen Parametern hinsichtlich der Slope-Interzept-Korrektur auf demselben Stand ist wie die im Labor üblicherweise eingesetzte Kalibrierung.

Wie üblich werden die Untersuchungsergebnisse der Labors unter einer Auswertenummer bearbeitet. Da die Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung zumindest zu einem Teil der Proben sowohl herkömmliche als auch FTIR-Untersuchungsergebnisse einzusenden hatten, wurde für letztere eine zusätzliche Auswertenummer zugeteilt. Diese ergab sich durch die Erhöhung der Auswertenummer für die Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden um 200 bzw. bei Einsendung von Ergebnissen mit einer zweiten Kalibrierung zusätzlich um 300. Somit entsprechen der Auswertenummer 1 bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungen bei den FTIR-Untersuchungsergebnissen die Auswertenummer 201 bzw. 301. Die Erhöhung der Auswertenummer wurde auch bei den Teilnehmern vorgenommen, die keine Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden mitgeteilt haben. Es war ein Messergebnis mit dem FTIR-Verfahren je eingesetzter Kalibrierung für jede Probe einzusenden. Sofern mehrere FTIR-Messergebnisse mit derselben Kalibrierung für ein Untersuchungsgut eingesandt wurden, ist stets der zuerst gemessene Befund ausgewertet worden.

Die Ergebnisübermittlung soll bevorzugt unter Verwendung einer jedem Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung zugesandten, speziell vorbereiteten Exceldatei erfolgen. Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden enthielt diese Datei zwei Registerblätter. Auf jedem Registerblatt kann zu einem Parameter nur eine Untersu-

chungsmethode für alle untersuchten Proben angegeben werden. Es kann aber sinnvoll sein, in Abhängigkeit von den Eigenschaften des jeweiligen Prüfgutes für denselben Parameter bei verschiedenen Prüfgütern unterschiedliche Untersuchungsmethoden zu verwenden. Dies zu dokumentieren soll die Bereitstellung von zwei Registerblättern ermöglichen. In der vorgesehenen Weise nutzten nur einzelne Teilnehmer diese Möglichkeit. Stattdessen wurden weitere Untersuchungsergebnisse an derselben Probe mitgeteilt, obwohl die Teilnehmer grundsätzlich nur einen Untersuchungsbefund für jede mit herkömmlichen Methoden zu untersuchende Probe ein-senden sollen. Vor allem Anforderungen aus der Akkreditierung der Labors dürften hierfür auslösend sein. Für alle 19 Teilnehmer, die das zweite Registerblatt zur Mitteilung von Ergebnissen mit anderen Methoden als auf dem ersten Registerblatt nutzten, wurden zusätzliche Auswertenummern aus dem Wertebereich 90 bis 108 zugeteilt. Die zusätzlichen Ergebnisse wurden unter diesen Auswertenummern in die Auswertung einbezogen.

Für die Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung wurde in der Datei zur Ergebnismitteilung weiterhin ein Registerblatt zum Eintragen der FTIR-Untersuchungsergebnisse angeboten. Dessen Verwendung gestattet dem Teilnehmer gegenüber der vom Bildschirm exportierten Ergebnisdatei eine Beschränkung der mitgeteilten Ergebnisse auf diejenigen, deren Bewertung gewünscht wird. Außerdem ergibt sich für den Auswerter der Vorteil einer einheitlichen Abfolge der Parameter, wodurch die weitere Verarbeitung erleichtert wird. Wenig über 50 %, d.h. 43 der 79 Einsender von FTIR-Untersuchungsergebnissen, nutzten diese Möglichkeit. Soweit dies der Fall war und zusätzlich eine vom Bildschirm exportierte Ergebnisdatei übermittelt wurde, sind die auf dem FTIR-Ergebnisblatt der Ergebnismappe eingetragenen Werte als maßgebliches Laborergebnis behandelt worden.

Nur vereinzelt wurden Methodenangaben unterlassen oder fehlerhafte Methodenangaben gemacht. Ebenfalls selten waren zweifelhafte oder fehlerhafte Methodenkodierungen bei dem Parameter Gesamtextrakt. Hier wurde die 2011 überarbeitete Regelung für die Verwendung der Kodierungen in Abhängigkeit von der angewandte Methode der Alkoholbestimmung nicht beachtet. Alle Kodierungsmängel wurden in den Laborteilnahmebescheinigungen angesprochen.

Der Bitte um Mitteilung des sensorischen Befundes bei der von allen Laboratorien untersuchten Probe entsprachen 74 der 96 bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien. Auf fehlende sensorische Befunde wurde in den Laborergebnismitteilungen hingewiesen. Die sensorischen Befunde sind ohne Bewertung im Abschnitt 6.22 wiedergeben. Überwiegend wurde der Rotwein zufrieden stellend beschrieben und bewertet. In einzelnen Fällen wurden aber widersprüchliche Beschreibungen mitgeteilt oder nicht vorhandene Fehler angegeben. Die Auswertung bleibt den einzelnen Teilnehmern überlassen, da Qualitätszahlen nur unvollständig angegeben wurden und eine standardisierte Bewertung der verbalen Beschreibungen nicht möglich ist.

2.4 Ergebnisauswertung

Die allgemein bei der Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer angewendeten Regeln und Verfahrensweisen zur Aus- und Bewertung der Ergebnisse sind in einer speziellen Ausarbeitung auf der Internetseite Landwirtschaftskammer unter <http://www.lwk-rlp.de/> in der

Rubrik „Weinbau/Wein/Qualitätsweinprüfung/Analysemethoden/Labors“ als PDF-Datei hinterlegt. Sie werden auch bei dieser Laborvergleichsuntersuchung angewendet soweit nachstehend bzw. bei der Besprechung der Ergebnisse für einzelne Parameter keine Abweichungen oder Ergänzungen aufgezeigt werden.

Neben die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens, die in dieser Laborvergleichsuntersuchung auf der Basis der Ergebnisse anderer, herkömmlicher Untersuchungsverfahren durchgeführt wird, ist eine nähere Betrachtung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens von Interesse. Daher werden in Abschnitt 5 einige Ergebnisse des FTIR-Verfahrens gesondert dargestellt, bewertet und mit den Ergebnissen der herkömmlichen Analytik verglichen.

Außerdem werden bei der Dokumentation der Ergebnisse zu den einzelnen Parametern im Abschnitt 6 des Berichtes in einer zusätzlichen Tabelle Angaben zur Häufigkeit der Anwendung der einzelnen Analysemethoden sowie der robuste Mittelwert und die robuste Standardabweichung der mit diesen Methoden erhaltenen Laborergebnisse dargestellt. Diese Begriffe sind in der Norm ISO 13528 im Anhang C Abschnitt 1 unter Algorithmus A beschrieben und wurden hinsichtlich ihrer charakteristischen Merkmale und Vorzüge im Bericht über die Laborvergleichsuntersuchung 2009 näher erläutert. Daher wird hier nur auf diese Fundstellen verwiesen.

2.4.1 Bewertung der Laborleistung

Nach den allgemeinen Regeln gilt der Median aller Laborergebnisse als 'wahrer Wert'. Einer Empfehlung des „Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinanalytik“ folgend, wird für alle Laborergebnisse als maßgeblich der Median der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden, insbesondere der Referenzverfahren, herangezogen, d.h. der 'wahre Wert' wird ohne Berücksichtigung der FTIR-Untersuchungsergebnisse oder anderer, systematisch oder definitionsgemäß von den Ergebnissen der Referenzverfahren abweichender Untersuchungsergebnisse ermittelt. Damit wird beachtet, dass sowohl nach wissenschaftlichen wie nach praktischen Erwägungen generell und auch bei den FTIR-Untersuchungsergebnissen der Vergleich mit den Ergebnissen der herkömmlichen Referenzanalytik maßgeblich ist.

Die Bewertung der Leistung der Laboratorien erfolgt durch einen Vergleich des Laborergebnisses mit dem Median der berücksichtigten Ergebnisse der Laboratorien für den betrachteten Parameter. Hierbei wird als Maßstab der erreichbaren Übereinstimmung, d.h. als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) in der Regel die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet und der Z-Score als Leistungskennzahl errechnet. Die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen werden aber durch Matrixeffekte beeinflusst, die vom einzelnen Laboratorium nicht beherrschbar sind. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss angeregt, zu deren Bewertung experimentell ermittelte Zielstandardabweichungen ($s_{\bar{U}}$ bzw. $s_{\bar{U}_{FTIR}}$) zu verwenden, die den Einfluss der Matrix auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse um den Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden nach statistischen Regeln berücksichtigen. Für fast alle in dieser Laborvergleichsuntersuchung erfassten Parameter hat er eine Zusammenstellung statistischer Kennzahlen des FTIR-Verfahrens erarbeitet, die in Teil 1 der Berichte über die Laborvergleichsuntersuchung 2010 als Tabelle 5 enthalten ist. Da diese Kennzahlen im Bereich weinüblicher Konzentrationen der Parameter konstant sind, während sie bei

einigen herkömmlichen Untersuchungsverfahren konzentrationsabhängig sind, kann – vor allem bei höheren Konzentrationen – der Wert der Zielstandardabweichung für Ergebnisse des herkömmlichen Verfahrens größer sein, als der Wert der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung (s_0) für Ergebnisse des FTIR-Verfahrens. In diesem Fall würden die FTIR-Laborergebnisse strenger bewertet als die Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren. Der wissenschaftliche Arbeitsausschuss ist in seiner 8. Sitzung (2011) zu dem Ergebnis gekommen, dass dies nicht erforderlich ist. Er hat empfohlen, die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse herkömmlicher Verfahren auch zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse anzuwenden, falls ihr Wert gleich oder größer ist als der Wert der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung. Diese Empfehlung wurde bei der Berechnung der Z-Score für die FTIR-Ergebnisse berücksichtigt.

2.4.2 Untere Grenze des Anwendungsbereiches

Bei geringen Stoffgehalten, d.h. bei Messungen an der unteren Grenze des Anwendungsbereiches jeder Methode ist in der Regel die Streuung der Messergebnisse erheblich größer als die dokumentierte Vergleichsstandardabweichung des jeweils zum Vergleich herangezogenen Verfahrens oder die nach Horwitz berechnete, bei geeigneten und beherrschten Untersuchungsverfahren zu erwartende Vergleichsstandardabweichung. Es ergeben sich daher keine sinnvollen Bewertungen der Messergebnisse durch den Z-Score. Stoffgehalte in diesem Grenzbereich sind häufig, insbesondere für die Anwendung des FTIR-Verfahrens, weder aus Gründen der Identitätssicherung noch der sachgerechten Behandlung oder Bewertung des Erzeugnisses von Bedeutung. Andernfalls ist ein zu deren Erfassung geeignetes Verfahren anzuwenden. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss bereits anlässlich der 6. Sitzung (2009) empfohlen, in diesem Grenzbereich keine Z-Score zu berechnen. Diese Empfehlung wurde anlässlich der 7. Sitzung (2010) dahingehend fortentwickelt, dass für die Ergebnisse **aller** Verfahren in dieser Laborvergleichsuntersuchung im Grenzbereich der Anwendung keine Z-Score berechnet werden. Dieser gilt als erreicht, wenn das Dreifache der Zielstandardabweichung den Betrag des Bezugswertes erreicht oder überschreitet. In diesem Konzentrationsbereich können bei der FTIR-Untersuchung auch negative Messergebnisse auftreten.

Generell ist in diesem Zusammenhang darauf hinzuweisen, dass die Wiedergabe eines Untersuchungsergebnisses durch den **Wert Null nicht korrekt** ist. Bei Laborvergleichsuntersuchungen müssen solche Ergebnisse in der Form '< NG (Zahlenwert der Nachweisgrenze)' oder '< BG (Zahlenwert der Bestimmungsgrenze)' mitgeteilt werden, weil in den statistischen Auswertungsprogrammen eine Null als Zahl behandelt wird und somit für die Gesamtheit der Untersuchungsergebnisse und laborspezifisch zu fehlerhaften Auswertungsergebnissen führt. Ebenso sind die Angaben 'n.n.' für "nicht nachweisbar" oder 'n.b.' für nicht bestimmbar unkorrekt, weil diese Angaben ohne den Zahlenwert der Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenze nicht mit dem Median aller Laborergebnisse verglichen und somit als richtiges oder falsches Untersuchungsergebnis bewertet werden können. In den Laborergebnismitteilungen wurde im Bedarfsfall in Form einer laborspezifischen Anmerkung auf diesen Mangel hingewiesen.

2.4.3 Spezielle Bewertungsregeln für einzelne Parameter

2.4.3.1 Vorhandener Alkohol

Beurteilungsbasis sind stets die Ergebnisse aus Destillationsverfahren zur Alkoholbestimmung (LwK 2.1 und LwK 2.4), weil eine nähere Betrachtung der Ergebnisse unter Berücksichtigung der Untersuchungsmethoden zeigt, dass insbesondere mittels der Matrix abhängigen Refraktometrie nicht selten systematisch abweichende Ergebnisse erhalten werden. Systematisch abweichende Ergebnisse können auch mittels HPLC erhalten werden, da nur Ethanol nicht aber weitere Nebenalkohole wie bei der Destillation erfasst werden. Schließlich ist weinrechtlich maßgeblich der mit dem OIV-Destillationsverfahren bestimmte Alkoholgehalt. Als Leistungskriterium war stets die Vergleichsstandardabweichung von $\pm 0,535$ g/L aus der OIV-Methode (LwK 2.1) zur Ermittlung gültiger Z-Score geeignet.

Zum Parameter Vorhandener Alkohol ist weiterhin anzumerken, dass die Messergebnisse grundsätzlich in der Einheit g/L erwartet werden. In einigen Laboratorien ist jedoch die Anwendung der Einheit %vol die Regel und insbesondere bei der Bildschirmausgabe der FTIR-Untersuchungsergebnisse voreingestellt. Da die vom Bildschirm exportierten Daten eingesandt werden sollten, wurden alle Angaben in der Einheit %vol vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 in die Einheit g/L umgerechnet und nicht aus diesem Grund als fehlerhaft bewertet.

2.4.3.2 Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt

Die berechneten Werte für Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt gehören zu den Standardparametern der amtlichen Qualitätsweinanalyse. Ergebniswerte sind für das Prüfgut FT16P01 durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien mitzuteilen. Daher sind auf den Registerblättern 'herk. Ergebnisse (1) und (2)' der Exceldatei zur Ergebnismitteilung entsprechende Eingabefelder für diese Parameter vorgegeben. Insbesondere für den Parameter Gesamtextrakt bilden die Ergebnisse nach herkömmlichen Methoden auch die Grundlage zur Bewertung der unmittelbar aus den Infrarotspektren abgeleiteten Messergebnisse und deshalb ist ihre Mitteilung für alle fünf Prüfgüter vorgesehen. Außerdem können entsprechende Werte auch aus den Ergebnissen der FTIR-Messungen für Relative Dichte, Alkohol und Vergärbare Zucker berechnet werden. Von der Möglichkeit beide Extrakt-Parameter aus den Infrarotspektren zu ermitteln, wird nach Kenntnis des Auswerter für den Parameter Gesamtextrakt von etwa der Hälfte der teilnehmenden Laboratorien Gebrauch gemacht, während für den Parameter Zuckerfreier Extrakt nur von ein oder zwei Teilnehmern spezielle Kalibrierungen zur Ermittlung aus den Spektren eingesetzt werden und für den Parameter Gesamtalkohol keine speziellen Kalibrierungen bekannt sind. Auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' wurden im Vergleich hierzu auffällig viele Ergebnisse für beide Extrakt-Parameter mitgeteilt. Es ist daher anzunehmen, dass anders als in den Vorjahren erheblich mehr Teilnehmer aus den Ergebnissen für andere mit FTIR bestimmte Parameter Werte für Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt berechnet haben. Die Abfrage der Untersuchungsverfahren für diese Parameter unterscheidet jedoch nicht nach den beiden Möglichkeiten zur Ergebnisermittlung. Daher ist hier keine Aussage möglich, ob sich bei Anwendung beider Ermittlungsverfahren wesentliche Unterschiede der erhaltenen Werte ergeben.

2.4.3.3 Vergärbare Zucker

Der Begriff Vergärbare Zucker, ist durch die gültigen fachlichen Definitionen der OIV und die rechtlichen Regelungen im europäischen und deutschen Weinrecht eigentlich überholt und müsste durch den Begriff „Zucker“ oder „Gesamtzucker“ ersetzt werden, der als Summe aus Glucose und Fructose sowie – bei Vorhandensein – Saccharose definiert ist. Der Begriff Vergärbare Zucker wird aber noch in der Weinverordnung und infolgedessen in der amtlichen Qualitätsweinprüfung sowie im Allgemeinen fachlichen Sprachgebrauch verwendet.

In dieser Laborvergleichsuntersuchung wird seit 2010 entsprechend der gültigen rechtlichen Definition aus den Laborergebnissen der enzymatischen und hochleistungsflüssigkeitschromatographischen Bestimmungen der Bezugswert und damit die Beurteilungsbasis für Vergärbare Zucker abgeleitet. Eine Beschränkung auf die Ergebnisse der enzymatischen Bestimmungen kann in Abhängigkeit von Zuckergehalt und Weinart erforderlich sein, wenn die übliche systematische Differenz in der Größenordnung von 0,5 g/L zwischen den Ergebnissen der beiden Bestimmungsprinzipien die Bewertung der Laborleistung stört. Als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) wird in Konsequenz hieraus die Vergleichsstandardabweichung des enzymatischen Referenzverfahrens aus der Sammlung des OIV (OIV-MA-AS311-02, früher Anlage zur VO(EG) 2676/90 Nr. 7, LwK Nr. 4.5) verwendet. Diese ist mit relativ etwa 3 % des Messwertes größer als die zu etwa 2 % des Messwertes kodifizierte Vergleichsstandardabweichung des Verfahrens zur Bestimmung der Reduzierenden Zucker nach Luff-Schoorl (OIV-MA-AS311-01A, LwK Nr. 4.1).

In der Praxis werden die reduktometrischen Verfahren zur Zuckerbestimmung nach wie vor weit verbreitet eingesetzt, so bei dem Prüfgut FT16P01 bei 38 von insgesamt 104 Laborergebnissen. Sie können – allerdings nur bei Beachtung der Einflüsse des Prüfgutes auf das Ergebnis – trotz im Widerspruch zur OIV-Methode größerer Streuung der reduktometrischen Laborergebnisse zur Ermittlung vergleichbarer Laborergebnisse geeignet sein. Einschränkungen sind – verstärkt in Abhängigkeit vom angewendeten reduktometrischen Bestimmungsverfahren – vor allem bei Rotweinen mit geringen Zuckergehalten gegeben und zu beachten.

2.4.3.4 Flüchtige Säure

Die Flüchtige Säure ist ein konventioneller, d.h. durch die Bestimmung unter genau einzuhaltenen Untersuchungsbedingungen (OIV-MA-AS313-02, Methode des Typs I) definierter Parameter. Wegen des damit verbundenen hohen Aufwandes wird in der Praxis zunehmend als Ersatzgröße Essigsäure mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie oder enzymatisch bestimmt. Um eine fachlich exakte Trennung der Untersuchungsergebnisse für beide definitionsgemäß und stofflich verschiedene Parameter zu erreichen, wird der Parameter "Acetat (als Essigsäure)" zusätzlich zum Parameter "Flüchtige Säure" angeboten. Diese Präzisierung ermöglicht den Laboratorien zugleich die Mitteilung von sowohl herkömmlichen als auch FTIR-Untersuchungsergebnissen zu beiden Parametern, wenn auch bei der FTIR-Untersuchung selten Parameterkalibrierungen für Essigsäure eingesetzt werden.

Entsprechend der Definition des Parameters wird regelmäßig um die Mitteilung der Ergebnisse für Flüchtige Säure unter Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure gebeten. Bei der

Auswahl bzw. Beschreibung der Untersuchungsmethode ist eine abweichende Angabe möglich. Da die Bestimmung der Sorbinsäure in der Regel nicht Gegenstand dieser Laborvergleichsuntersuchung ist, wird die definitionsgemäß ebenfalls erforderliche Korrektur des Einflusses der Sorbinsäure nicht gefordert. Dementsprechend wird als Bezugswert (wahrer Wert) der Median der unter Korrektur des Beitrages der Schwefligen Säure erhaltenen Laborergebnisse verwendet. Als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) ist es aufgrund der Ergebnisse von Ringuntersuchungen der Deutschen Weinanalytiker sinnvoll, bei Median- bzw. Mittelwerten bis etwa 0,45 g/L die als konzentrationsunabhängig angegebene Vergleichsstandardabweichung des OIV-Verfahrens von $\pm 0,029$ g/L und bei höheren Gehalten die nach Horwitz berechnete erwartete Vergleichsstandardabweichung zur Berechnung der Z-Score zu verwenden.

2.4.3.5 Schweflige Säure

Die unterschiedlichen Prinzipien bei der Bestimmung der Schwefligen Säure machen ebenfalls die Anwendung spezieller Auswertungsverfahren bzw. eine Beschränkung der Methodenauswahl für die Ermittlung des 'wahren Wertes' und die Auswahl der jeweils angemessenen Zielstandardabweichung erforderlich. Da diese auch anhand des prüfgutübergreifenden Gesamtergebnisses dieser Laborvergleichsuntersuchung begründet werden, erfolgt ihre Darstellung im Abschnitt 4.1 dieses Berichtes.

3 Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen

Die allgemeinen Ausführungen in diesem Abschnitt wie im vorangegangenen Abschnitt gelten für alle in dieser Laborvergleichsuntersuchung bearbeiteten Proben und Parameter. Auf sie wird gegebenenfalls in den weiteren Teilen der Berichterstattung verwiesen. Im Detail wird hier und im folgenden Abschnitt 4 vor allem auf das Gesamtergebnis für das Prüfgut FT16P01 eingegangen. Soweit es insbesondere bei der Diskussion der Ergebnisse zu einzelnen Parametern sinnvoll erscheint, werden die Ergebnisse für alle fünf Prüfgüter bereits hier gemeinsam betrachtet.

3.1 Bewertung des Gesamtergebnisses

Einen laborübergreifenden Überblick über die Untersuchungsergebnisse belegt für jedes Prüfgut eine Zusammenstellung deskriptiv-statistischer Ergebnisse wie hier für die Probe FT16P01 in der nachstehenden Tabelle 3. Soweit in diesen Tabellen zu einem Parameter mehrere Varianten der deskriptiven Berechnungsergebnisse aufgeführt sind, werden diese – sofern nicht selbsterklärend – bei der Diskussion des jeweiligen Parameters besprochen. Bei der Berechnung der beschreibenden statistischen Daten wurde ein Einfluss der Laborergebnisse mit dem FTIR-Verfahren ausgeschlossen. Die Tabelle beschreibt somit das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung mit herkömmlichen Verfahren und dient dessen Bewertung.

Für die Entscheidung über die Eignung der Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung zur Bewertung der Laborleistung sind vorrangig die Ergebnisse der herkömmlichen Untersuchungsverfahren maßgeblich. Die Bewertung der einzelnen Laborleistung durch die Z-Score nimmt sowohl für die Ergebnisse herkömmlicher als auch der FTIR-Untersuchungen Bezug auf

den Median dieser Ergebnisse als 'wahren Wert'. Die Berechnung der Z-Score erfolgt jedoch in der Regel für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse mit unterschiedlichen Zielstandardabweichungen. Daher enthält Tabelle 3 wie die entsprechenden Tabellen für die weiteren Prüfgüter für Parameter, die mit dem FTIR-Verfahren bestimmt wurden, in jeder der beiden Spalten „Zielstdabw. exp. herk. s_{exp} “ und „Zielstdabw. exp. FTIR $s_{\bar{U}}$ “ einen Eintrag. Dies berücksichtigt die Empfehlungen des „Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinanalytik“ (siehe auch Abschnitt 2.4.1).

Grundlagen der Bewertung des Gesamtergebnisses sind bei allen Proben:

- (1.)** die Anzahl resp. der Anteil ausgeschlossener Ergebnisse,
- (2.)** die Quotienten s_L/s_{Ziel} aus der Standardabweichung zwischen den Laborergebnissen (s_L) geteilt durch die Zielstandardabweichung (s_{Ziel}). Verwendet werden für die Ergebnisse herkömmlicher Verfahren nach Horwitz berechnete Zielstandardabweichungen (s_H) bzw. experimentelle Zielstandardabweichungen (s_{exp}), die als Vergleichsstandardabweichung in Methodenprüfenden Ringversuchen ermittelt wurden, und für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens experimentelle, Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichungen ($s_{\bar{U}}$ bzw. $s_{\bar{U} FTIR}$).
- (3.)** der Quotient aus dem Standardfehler (s_L/\sqrt{N}) bzw. der einfachen Unsicherheit (u_M) des Mittelwertes der bereinigten Daten und der maßgeblichen Zielstandardabweichung (Spalte " u_M/s_{Ziel} " und " $u_M/s_{\bar{U}}$ "). Dieser beschreibt für jeden Parameter die Zuverlässigkeit des den 'wahren Wert' vertretenden Bezugswertes.

Maßgeblich für die Anwendung dieser Kriterien ist bei mehreren Varianten der deskriptiven Berechnungsergebnisse zu einem Parameter nur die für die Bewertung der Laborleistung herangezogene.

Als offensichtlich fehlerhaft und in keinem Falle bei den Berechnungen zu berücksichtigen gelten Ergebnisse, die in fehlerhaften Einheiten mitgeteilt wurden oder um mehr als 50 % vom Median abweichen. Sofern solche Werte vorlagen, ist ihre Anzahl in der Spalte "Alle Werte" der Tabellen der deskriptiv-statistischen Kennzahlen, hier der Tabelle 3, in Klammern angegeben. Bei der Bewertung des Gesamterfolges ausgeschlossen werden ferner Ergebnisse, die um mehr als das Fünffache der Zielstandardabweichung vom Median abweichen und daher mit einem Z-Score, dessen Absolutbetrag den Wert 5 überschreitet ($|z| > 5$), bewertet werden. Die Tabellen enthalten in diesen Fällen zu dem jeweiligen Parameter in den Spalten „Alle Werte“ und „Gültige Werte“ unterschiedliche Zahlen. Der Anteil der wegen überhöhter Z-Score ausgeschlossenen Ergebnisse soll weniger als 22 % betragen.

Von den Quotienten aus Laborstandardabweichung und Zielstandardabweichung sind diejenigen entscheidend, die bei Einhaltung der zulässigen Ausschlussquote nach dem Ausschluss extremer Einzelergebnisse erhalten werden. Daher sind nur diese in den Tabellen der deskriptiv-statistischen Kennzahlen, hier der Tabelle 3, aufgeführt. Vorrang hat der Quotient mit der experimentell ermittelten gegenüber der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung.

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für die Rotweinprobe (FT16P01)

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. SL	Zielstdabw		Zielstdabw exp. herk. S _{exp}	Zielstdabw exp. FTIR S _Ü	S _L /S _H	S _L /S _{exp}	Quotienten		
						n. Horwitz SH						S _L /S _Ü	u _M /S _{Ziel}	u _M /S _Ü
Relative Dichte 20 °C/20 °C	112	110	0,99922	0,99920	0,000095			0,000132	0,000190		0,72	0,50	0,07	0,05
Gesamtalkohol (g/L)	95	95	100,909	100,900	0,719	2,850	1,063	1,063		0,25	0,68	0,68	0,07	0,07
Vorhandener Alkohol (g/L)	45	45	93,810	93,900	0,620	2,681	0,535	0,886		0,23	1,16	0,70	0,17	0,10
Gesamtextrakt (g/L)	104	104	38,71	38,70	0,444	1,263	0,594	0,594		0,35	0,75	0,75	0,07	0,07
Zuckerfreier Extrakt (g/L)	99 (1)	99	24,05	24,10	0,877	0,844	1,048	1,048		1,04	0,84	0,84	0,08	0,08
Vergärbare Zucker (g/L)														
- enzymatisch + HPLC	66	66	14,40	14,40	0,343	0,545	0,432	0,584		0,63	0,80	0,59	0,10	0,07
- reduktometrisch	37 (1)	36	15,29	15,20	0,890	0,571	0,453	0,584		1,56	1,96	1,52	0,33	0,25
Gesamtsäure (g/L)	106	106	5,254	5,255	0,119	0,232	0,107	0,145		0,51	1,11	0,82	0,11	0,08
Reduktone (mg/L)	90(10)	90	18,47	18,00	4,30	1,86				2,31			0,24	
Freie Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillation + Photometrie	18	18	52,75	53,70	10,93	4,72				2,32			0,55	
- wie vorstehend + FTIR	34	34	53,23	53,50	9,61	4,70				2,04			0,35	
- jodometrisch incl. Reduktone	98 (1)	98	58,01	58,15	6,74	5,05				1,33			0,13	
- jodometrisch excl. Reduktone	91 (4)	91	39,87	40,00	6,01	3,67	5,05			1,64	1,19		0,12	
Gesamte Schweflige Säure(mg/L)														
- Destillationsverfahren	52	50	148,26	147,50	7,14	11,13	5,36			0,64	1,33		0,19	
- jodometrisch incl. Reduktone	65	65	149,25	149,00	8,66	11,23	5,36			0,77	1,62		0,20	
- jodometrisch excl. Reduktone	64	62	130,30	128,00	10,83	9,87	5,36			1,10	2,02		0,26	
Glucose (g/L)	62	62	6,602	6,600	0,180	0,281	0,221	0,408		0,64	0,81	0,44	0,10	0,06
Fructose (g/L)	57 (1)	57	7,757	7,700	0,293	0,320	0,251	0,330		0,92	1,17	0,89	0,15	0,12
Glycerin (g/L)	25	25	7,411	7,400	0,376	0,310		0,348		1,21		1,08	0,24	0,22
pH-Wert	53	53	3,591	3,590	0,0533		0,047600	0,493			1,12	0,11	0,15	0,01
Weinsäure (g/L)	34	34	2,065	2,060	0,179	0,105		0,227		1,71		0,79	0,29	0,14
Flüchtige Säure (g/L)	26	24	0,521	0,520	0,0538	0,0325	0,0286	0,089		1,66	1,88	0,60	0,38	0,12
Acetat als Essigsäure (g/L)	27 (1)	27	0,480	0,472	0,0563	0,0299				1,88			0,36	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	14 (1)	13	0,610	0,605	0,0669	0,0369	0,0333	0,218		1,81	2,01	0,31	0,56	0,09
L-Äpfelsäure (g/L)	26	26	0,607	0,605	0,0674	0,0369	0,0333			1,83	2,03		0,40	
Gesamte Milchsäure (g/L)														
- enzymatisch + HPLC	18	18	2,285	2,280	0,220	0,114		0,209		1,93		1,05	0,46	0,25
- alle Verfahren ¹⁾ + z < 4,5	20	18	2,283	2,280	0,133	0,114		0,209		1,17		0,64	0,28	0,15
L-Milchsäure (g/L)	24	24	1,819	1,800	0,138	0,093	0,098			1,48	1,41		0,29	

¹⁾alle Verfahren ohne FTIR

Erläuterungen zur Tabelle 3:

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

Alle Werte: in Klammern ist die Anzahl der um mehr als 50 % vom Median abweichenden Laborwerte angegeben. Sie sind in der vorstehenden Zahl nicht enthalten.

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

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

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

Zielstdabw. exp. FTIR (s_{FTIR}) = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens (Empfehlung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses)

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

Quotient (s_L/s_{exp}) = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten, z.B. methodenprüfenden Ringversuchen

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

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

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

Diese Quotienten sollen unter 1,5 liegen und den Wert 2,0 nicht überschreiten. Andernfalls ist außerhalb der Aufgabenstellung einer Laborvergleichsuntersuchung fachlich zu prüfen, ob die angewendeten Untersuchungsmethoden nicht geeignet sind, nicht beherrscht werden oder die Zielstandardabweichung zu streng gewählt wurde. In Umkehrung dieser Regel ist anzunehmen, dass die Zielstandardabweichung zu großzügig gewählt wurde, wenn der Wert des Quotienten unter 0,5 liegt.

Die Quotienten aus der Laborstandardabweichung und der experimentell ermittelten, Matrix Effekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung für die FTIR-Ergebnisse ($s_L/s_{\bar{u}}$) sind – meist deutlich – niedriger als die vorstehend besprochenen, weil diese Zielstandardabweichungen mit wenigen Ausnahmen einen größeren Betrag als die Zielstandardabweichungen für die Ergebnisse der herkömmlichen Analytik aufweisen. Daher ist unter diesem Aspekt die Gültigkeit der Z-Score für die Bewertung der Laborleistung bei den FTIR-Messungen meist gegeben.

Der Quotient " u_M/s_{Ziel} " beschreibt die (relative) Zuverlässigkeit des Bezugswertes. Nach der Norm ISO 13528 sind Auswertungen und damit Z-Score uneingeschränkt gültig, wenn der Quotient (bei Rundung auf eine Stelle) nicht über 0,3 liegt. Dann ist gewährleistet, dass die Unsicherheit des Bezugswertes die Bewertung nicht beeinträchtigt. Liegt der Quotient zwischen 0,3 und 0,5 wird auf die eingeschränkte Sicherheit des Bezugswertes hingewiesen. Quotienten im angesprochenen Bereich treten gehäuft auf, wenn nur eine geringe Anzahl und zugleich eine relativ große Streuung der Laborergebnisse vorliegen. Für die Bewertung der FTIR-Messergebnisse wird ausweislich der Werte in der Spalte " $u_M/s_{\bar{u}}$ " der Tabellen die erforderliche Zuverlässigkeit in der Regel problemlos erreicht.

Werden alle drei Bedingungen erfüllt, kann in der Regel geschlossen werden, dass die angewendeten Analysenverfahren beherrscht wurden, im gegebenen Konzentrationsbereich zur Bestimmung der Parameter geeignet sind und geeignete Zielstandardabweichungen gewählt wurden.

3.2 Ergebnisauswertung für das Weißweinprüfgut (FT16P01)

Bei dem Prüfgut FT16P01 traten bei der Mehrzahl der Parameter keine oder bis zu zwei auszuschließende Laborergebnisse auf. In der Regel handelte es sich um grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte. Eine höhere Anzahl auszuschließender Laborergebnisse ergaben sich für den Parameter Reduktone und den hiervon abhängigen Parameter Freie Schweflige Säure excl. Reduktone. In beiden Fällen wichen die unberücksichtigt bleibenden Ergebnisse um mehr als 50 % vom Median ab. Der Höchstanteil von 22 % wurde bei keinem Parameter erreicht.

Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} wurde bei den Ergebnissen herkömmlicher Analytik überwiegend eingehalten. Im Toleranzbereich erhöhte Werte ergaben sich bei den Parametern Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Gesamte Schweflige Säure incl. Reduktone (jodometrisch), Flüchtige Säure, Acetat und Gesamte Milchsäure. Bei den Ergebnissen aller Methoden, die bei der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure keine Reduktone erfassen, den Ergebnissen der jodometrischen Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure unter Abzug der Reduktone, sowie der Gesamten und der L-Äpfelsäure wurde der Höchstwert von 2,0 knapp und bei dem Parameter Reduktone sowie den Ergebnissen der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure durch Destillations- oder photometrische Verfahren eindeutig überschritten. Mit Ausnahme der Parameter Vergärbare Zucker (reduktometrisch) und Gesamte Milchsäure wird auf diese Parameter im Abschnitt 4 detaillierter eingegangen.

Die im vorstehenden Absatz genannten Parameter weisen mit Ausnahme der Ergebnisse für Reduktone und der Ergebnisse jodometrischer Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure auch erhöhte Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " auf. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist beeinträchtigt sowie bei den Ergebnissen der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure durch Destillation- und photometrische Verfahren und für den Parameter Gesamte Äpfelsäure nicht mehr gegeben. Eine mangelnde Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist bei einer kritischen Betrachtung der Z-Score zugunsten des einzelnen Teilnehmers zu berücksichtigen.

Die spezifischen Methoden zur Bestimmung des **Vergärbaren Zuckers** wurden bei der Probe FT16P01 von 66 Teilnehmern angewendet, während die traditionellen reduktometrischen Methoden noch von 38 Teilnehmern eingesetzt wurden. Bei dem vorliegenden Prüfgut ist ein für Rotweine typischer Unterschied im mittleren Ergebnis beider Verfahrensgruppen zu beobachten. Die trotz großer Streuung der Laborergebnisse noch ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes für reduktometrisch ermittelte Zuckerwerte beruht auf der mit 36 recht hohen Anzahl berücksichtigter Laborergebnisse. Diese ist bei den weiteren Prüfgütern dieser Laborvergleichsuntersuchung nicht gegeben. Daher ist der aus den Ergebnissen reduktometrischer Bestimmungen abgeleitete Bezugswert bei den Prüfgütern FT16P02 bis FT16P05 nur eingeschränkt oder nicht zur Ermittlung gültiger Z-Score für die Ergebnisse herkömmlicher reduktometrischer Bestimmungen des Gehaltes an Vergärbarem Zucker geeignet. Für die Ergebnisse reduktometrischer Zuckerbestimmungen werden auch aus diesem Grund in der Regel keine Z-Score auf der Grundlage eines reduktometrisch bestimmten Bezugswertes ermittelt und selbst im Ausnahmefall in den Laborergebnismitteilungen nicht mitgeteilt.

Wie aus Tabelle 3 ersichtlich ergab die Auswertung der Laborergebnisse für **Gesamte Milchsäure** bei Berücksichtigung der Ergebnisse aus den überwiegend eingesetzten Methoden Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und enzymatischer Bestimmung erhöhte Werte der Quotienten s_L/s_{Ziel} und u_M/s_{Ziel} . Die nähere Analyse der Daten zeigte, dass zu jeder Methode jeweils ein Ergebnis mit Z-Score im absoluten Betrag über 4,5 aber unterschiedlichen Vorzeichen vorlag, während die Ergebnisse der jeweils nur einmal eingesetzten Methoden Ionenchromatographie und 1H -Kernresonanzspektroskopie im zentralen Bereich lagen. Die alternative Berechnung der Qualitätskennzahlen für das Gesamtergebnis unter Einschluss dieser Laborergebnisse und Ausschluss der auffälligen Laborergebnisse mit HPLC und Enzymatik ergab unauffällige Werte der Qualitätskennzahlen und zeigte damit, dass die **Z-Score** für diesen Parameter uneingeschränkt **gültig** sind.

Die Bewertung der Ergebnisse der einzelnen Laboratorien durch den Z-Score ist – mit Ausnahme der Parameter Reduktone, Flüchtige Säure, Acetat – **ohne Beachtung zusätzlicher Gesichtspunkte** sowie für die Parameter Gesamte und L-Äpfelsäure sowie für den Parameter Freie Schweflige Säure bei Bestimmung mit Methoden, die Reduktone nicht erfassen, **unter Beachtung der Diskussion im Abschnitt 4 aussagekräftig**.

Von den 96 teilnehmenden Laboratorien, die durch die Landwirtschaftskammer zugelassen sind, wurden die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden zwischen zweimal (Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure) und vierzehnmal (Vergängbare Zucker) nicht erfolgreich bestimmt, d.h. der Absolutbetrag des Z-Score überschritt den Wert 3 ($|Z| > 3$). Dazwischen lagen die Laborergebnisse für Freie und Gesamte Schweflige Säure (jeweils 7 falsche Ergebnisse), wobei die Laborergebnisse für Gesamte Schweflige Säure bei jodometrischer Bestimmung ohne Abzug der Reduktone mit der Zielstandardabweichung des Referenzverfahrens bewertet wurden. Da die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen insbesondere bei Rotweinen eine größere Streubreite als für das Destillationsverfahren vorgegeben aufweisen, werden jodometrische Laborergebnisse häufiger als falsch bewertet.

4 Anmerkungen zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden für einzelne Parameter bei allen Prüfgütern

Bei einigen Parametern sind zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden weitergehende Anmerkungen sinnvoll. Dabei werden Ergebnisse an den weiteren Proben, die nur von den Teilnehmern an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung bestimmt wurden, berücksichtigt, soweit eine probenübergreifende Betrachtung sinnvoll erscheint. Sind nur einzelne Prüfgüter betroffen, erfolgen die Ausführungen in den weiteren Teilen des Berichtes.

4.1 Schweflige Säure und Reduktone

Zur Bestimmung der Schwefligen Säure finden im Reaktionsprinzip, insbesondere in ihrer Spezifität, unterschiedliche Bestimmungsverfahren Anwendung. Es können zwei Hauptgruppen unterschieden werden. Eine bilden die jodometrischen Bestimmungsverfahren, bei denen grundsätzlich über die Schweflige Säure hinaus weitere unter den Bedingungen des Untersu-

chungsverfahrens mit Jod reagierende Stoffe mit erfasst werden. Diese werden unter dem Sammelbegriff Reduktone zusammengefasst. Die andere Hauptgruppe bilden Destillations- bzw. photometrische Verfahren, bei denen die Reduktone nicht erfasst werden. Im Falle von Destillationsverfahren mit anschließender acidimetrischer Titration können aber erhöhte Gehalte an Flüchtiger Säure oder bei bestimmten photometrischen Verfahren die Farbstoffe der Rotweine stören. Dies erschwert sowohl die Ermittlung eines geeigneten Bezugswertes als auch die Anwendung einer sachgerechten Zielstandardabweichung und damit letztlich die Bewertung der Laborleistung durch gültige Z-Score.

Bei Anwendung jodometrischer Bestimmungsverfahren müssen bei erhöhtem Gehalt an Reduktonen diese analytisch gesondert bestimmt und mit dem Ziel in Abzug gebracht werden, zutreffendere Ergebnisse für den Gehalt an Freier und/oder Gesamter Schwefliger Säure zu erhalten. Ein Abzug ist in der Regel bei Ascorbinsäure freien Weißweinen und Roséweinen nicht erforderlich, wohl aber bei Weiß- und Roséweinen mit Ascorbinsäurezusatz sowie bei Rotweinen. Gemäß dieser Regel wurde den Teilnehmer, die an der Probe FT16P01 ausschließlich die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse bestimmten, die Bestimmung der Reduktone und die Mitteilung des Ergebnisses aufgegeben. Die übrigen Teilnehmer wurden im Begleitschreiben auf diese allgemeine Regel hingewiesen, woraus sich die Pflicht zur Bestimmung der Reduktone bei den Rotwein-Prüfgütern FT16P01 und FT16P03 ergab.

Allen Teilnehmern war für alle Proben für den Fall der jodometrischen Bestimmungsverfahren – ohne damit deren Anwendung zu empfehlen – zum Erhalt einheitlichen Datenmaterials und zur Vereinfachung der Methodenangabe die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse einschließlich der Reduktone vorgegeben. Die Nichteinhaltung dieser „Kundenvorgabe“ ist ein Mangel der Erfüllung des Untersuchungsauftrages und kann – zu Recht – zu einem unbefriedigenden Z-Score des Laborergebnisses führen. Soweit ein Wert der Reduktone mitgeteilt wurde, erfolgte die Ergänzung des fehlenden Wertes ohne Hinweis während der Auswertung. Da die aufgegebene Verfahrensweise aber im konkreten Einzelfall nicht mit der üblichen und fachlich gebotenen Vorgehensweise übereinstimmen und somit auch den Festlegungen im laboreigenen Qualitätsmanagement widersprechen kann, wurden diese Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in den Laborergebnismitteilungen jeweils doppelt, d.h. einmal unter Einschluss des Beitrages der Reduktone und einmal nach deren Abzug bewertet. Für Gesamte Schweflige Säure wird in diesem Bericht in gleicher Weise verfahren, jedoch erfolgte in der endgültigen Laborergebnismitteilung die Bewertung "wie angefordert bzw. mitgeteilt" durch Vergleich mit dem Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren. Als gültiger Z-Score im Sinne des Qualitätsmanagementsystems ist der Wert zu behandeln, der dessen Vorgaben entspricht, während weitere Ergebnisse lediglich für eine fachliche Orientierung, z.B. im Rahmen einer Fehlerursachensuche bestimmt sind.

4.1.1 Reduktone

Wie bereits im den Laborergebnissen beigefügten Kurzbericht mitgeteilt, war das Gesamtergebnis für den Parameter Reduktone bei allen fünf Prüfgütern unbefriedigend. Tabelle 4 fasst die wesentlichen statistischen Kennzahlen zusammen.

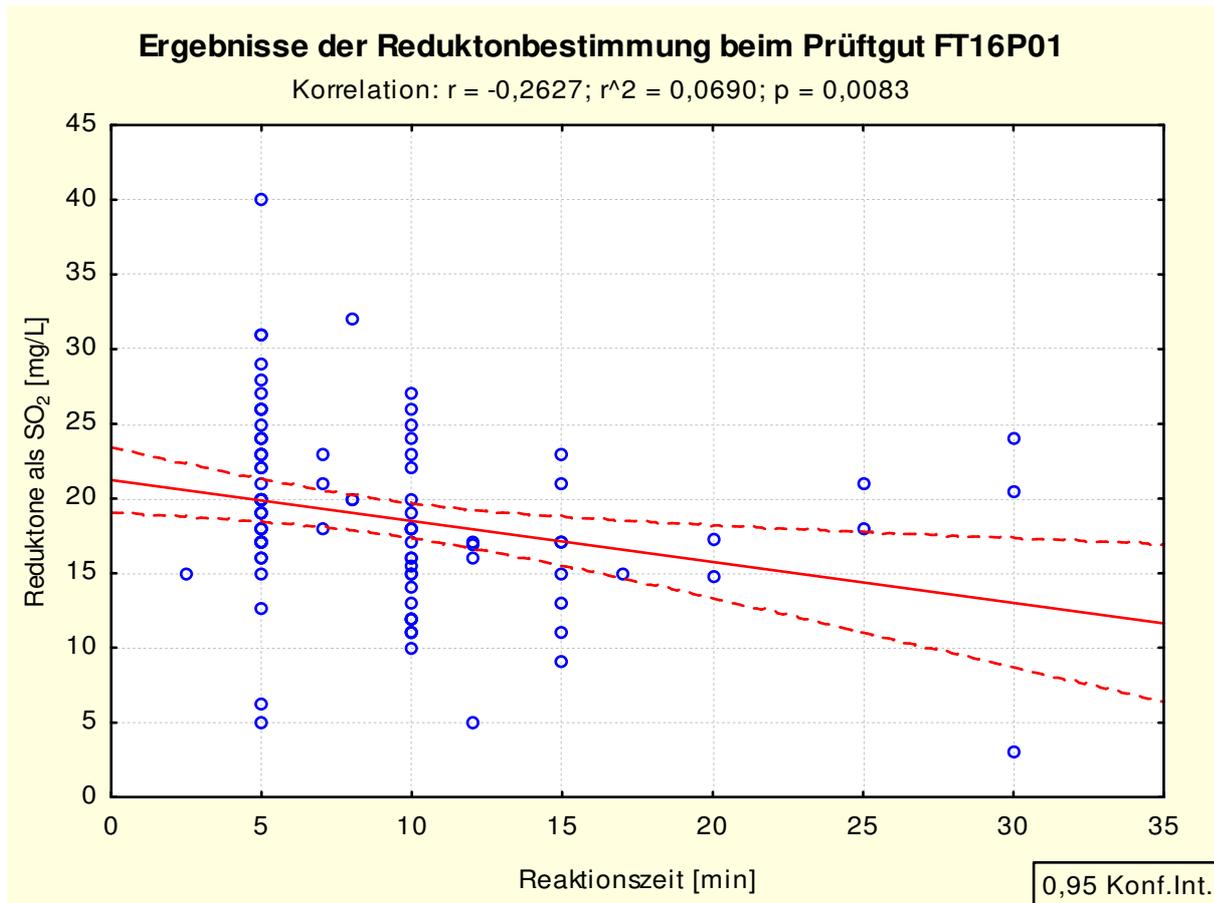
Tabelle 4: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone

	Alle Werte	Ausreißer	Gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	100	10	90	18,47	4,30	1,86	2,31	0,24
FT16P02	31	4	27	5,34	1,78	0,63	2,83	0,55
FT16P03	43	11	32	22,01	4,80	2,21	2,17	0,38
FT16P04	29	3	26	5,13	1,58	0,63	2,52	0,49
FT16P05	35	6	29	5,76	1,53	0,73	2,08	0,39

Erläuterung: Alle Werte schließt die Ausreißer mit mehr als 50 % Abweichung vom Median ein.

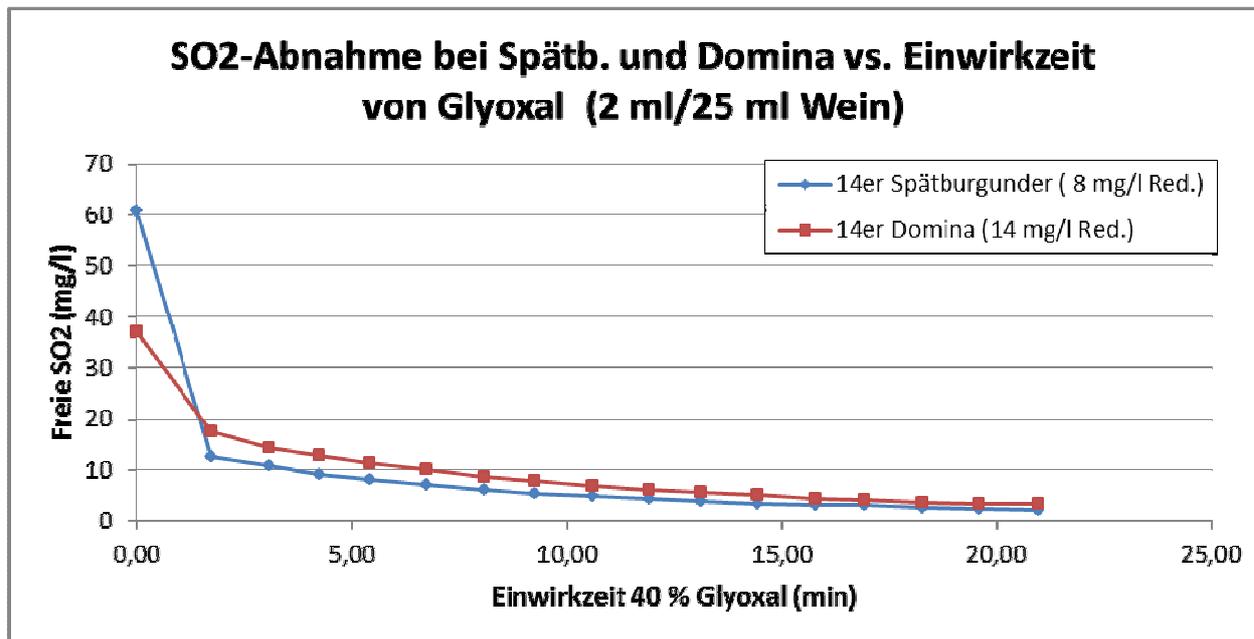
Den Untersuchungsergebnissen ist bei allen fünf Prüfgütern zunächst gemeinsam, dass ein Anteil von mindestens 10 % bis zu rund 26 % der Laborergebnisse wegen einer Abweichung um mehr als 50 % vom Median aller Untersuchungsergebnisse bei der Auswertung auszuschließen war. Bereits die ungewöhnlich hohen Anteile an Ausreißern deuten auf erhebliche Probleme bei der Bestimmung dieses Parameters. Es ergaben sich keine weiteren Ausschlüsse wegen eines Z-Score im absoluten Betrag über 5. Weiterhin wiesen die Laborergebnisse stets eine Streuung auf, die erheblich größer war als sie nach Horwitz erfahrungsgemäß für ein geeignetes und beherrschtes Bestimmungsverfahren erwartet werden kann. Deren Betrag liegt bei den Weiß- bzw. Roséwein-Prüfgütern mit deutlich unter 1 mg/L vermutlich unter der Leistungsfähigkeit des analytischen Verfahrens. Die Standardabweichung (s_L) übertraf die nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichungen stets um mehr als das Doppelte. Mit Ausnahme des Prüfgutes FT16P01, für das eine sehr hohe Anzahl an Laborergebnissen vorliegt, war die Zuverlässigkeit des Mittelwertes stets zumindest beeinträchtigt (Quotient $u_M/s_{Ziel} > 0,3$) und bei dem Prüfgut FT16P02 mit $u_M/s_{Ziel} > 0,5$ nicht gegeben. Es konnten somit **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden, was in den Ergebnisdarstellungen durch graue Schriftfarbe angezeigt wird. Damit bestätigt sich insgesamt die unbefriedigende Erfahrung aus früheren Laborvergleichsuntersuchungen.

Die große Anzahl an Laborergebnissen bei dem Prüfgut FT16P01 ließ eine nähere Untersuchung der Laborergebnisse sinnvoll erscheinen. Eine Aufgliederung nach dem zur Bindung der Schwefligen Säure eingesetzten Aldehyd und dem Prinzip der Endpunktbestimmung (optisch mittels Stärke als Indikator oder elektrometrisch durch Potentialmessung an einer Platinelektrode) gab keine beweiskräftigen Hinweise auf die Streuungsursachen. Die Häufigkeit der Verwendung der Aldehyde mit 4 für Acetaldehyd, 15 für Propionaldehyd und 80 für Glyoxal war sehr unterschiedlich, wobei die Anzahl der Ergebnisse sich für jede dieser Gruppen jeweils auf beide Prinzipien der Endpunktbestimmung mit der Folge verteilte, dass für die Kombination der elektrometrischen Endpunktbestimmung mit Acetaldehyd bzw. Propionaldehyd jeweils nur ein Laborergebnis vorlag, während sich für den Aldehyd Glyoxal jeweils die Hälfte der Ergebnisse auf eines der beiden Prinzipien entfiel. Anders als in vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen konnte jedoch eine Abhängigkeit der Laborergebnisse von der Reaktionszeit zwischen zugesetztem Aldehyd und der vorhandenen Freien Schwefligen Säure beobachtet werden. Die nachfolgende Abbildung zeigt alle Laborergebnisse als Punktdiagramm in Abhängigkeit von der jeweils mitgeteilten Reaktionszeit.



In Übereinstimmung mit der bekannten Abnahme des ermittelten Reduktongehaltes bei Verlängerung der Reaktionszeit zwischen zugesetztem Aldehyd und vorhandener Freier Schwefliger Säure zeigt die Abbildung eine sehr schwache aber signifikante negative Korrelation. Zugleich veranschaulicht sie die große Streuung der Untersuchungsergebnisse, wobei sich tendenziell eine geringe Abnahme der Streuung bei Verlängerung der Reaktionszeit andeutet. Dies erscheint plausibel, da bei kurzen Reaktionszeiten der Bindungsprozess je nach den Gegebenheiten der einzelnen Analysendurchführung, insbesondere der Exaktheit der Einhaltung der Reaktionszeit, unterschiedlich weit fortgeschritten ist. Zugleich beträgt der Median der Ergebnisse jodometrischer Bestimmung der Freien Schwefligen Säure einschließlich der Reduktone rund 58 mg/L, während sich der Median der Bestimmungsergebnisse mit Methoden, bei denen Reduktone nicht erfasst werden, zu 53,5 mg/L ergab. Der Unterschied von nur rund 5 mg/L ist erheblich geringer als der zu 18 mg/L erhaltene Median der Reduktionwerte. Auch bei den weiteren vier Prüfgütern war der Median der Reduktionwerte deutlich größer als die Differenz zwischen dem Median der Ergebnisse jodometrischer Bestimmung der Freien Schwefligen Säure und dem Median der Ergebnisse destillativer oder photometrischer Bestimmungen, wie aus den Daten der Tabelle 7 abgelesen werden kann. 46 % der Reduktionwerte wurden mit einer Reaktionszeit von 5 Minuten und weniger, 80 % der Reduktionwerte mit einer Reaktionszeit von bis zu 10 Minuten ermittelt. Dr. Nilles, Volkach, hat in einem Seminar zur automatisierten photometrischen Bestimmung der Reduktone am Beispiel mehrerer Rebsorten Ergebnisse der Bestimmung des Restgehaltes an Freier Schwefliger Säure in Abhängigkeit von der Reaktionszeit mit-

geteilt. Die nachfolgende Abbildung zeigt mit seiner freundlichen Genehmigung die Ergebnisse für zwei Weine der Rebsorten Spätburgunder und Domina.



Es wird deutlich, dass bei einem Ausgangswert um 50 mg/L Freie Schweflige Säure nach fünf Minuten um 10 mg/L und nach 10 Minuten etwa 5 mg/L Freie Schweflige Säure noch nicht abgebunden sind. Obwohl zu berücksichtigen sein wird, dass auch andere Ursachen, wie die schwierige Erkennbarkeit des Endpunktes vor allem bei Rotweinen oder eine geringe Stabilität des Umschlages die große Streuung der Untersuchungsergebnisse beeinflussen, ergibt sich der Schluss, dass die überwiegend angewendeten Reaktionszeiten von **5 bis 10 Minuten** erheblich **zu kurz** sind und generell **zu hohe Werte für den Reduktongehalt** erhalten werden. Eine weitergehende Präzisierung und Vereinheitlichung der Methodik der Reduktionbestimmung ist erforderlich.

4.1.2 Freie Schweflige Säure

Die Bewertung aller Ergebnisse **jodometrischer** Bestimmungen der **Freien Schwefligen Säure einschließlich der Reduktone** erfolgte jeweils bezogen auf den Median dieser Bestimmungsergebnisse mit einer nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung. Die Bewertung der Ergebnisse für Freie Schweflige Säure **nach Abzug der Reduktone** erfolgte bezogen auf deren Median. Als Zielstandardabweichung wurde jeweils derselbe Wert wie zur Bewertung der Ergebnisse einschließlich der Reduktone verwendet.

Diesem Vorgehen liegen folgende Überlegungen zugrunde. Sind die Bestimmungen der verknüpften Werte unabhängig voneinander, ist nach statistischen Regeln eine Zunahme der Streuung zu erwarten. Bereits im Bericht über die Laborvergleichsuntersuchungen 2013 bis 2015 wurde dargestellt, dass dies nicht eintrat. Diese Beobachtungen werden durch die Daten der Tabelle 5 bestätigt. Diese zeigt die in dieser Laborvergleichsuntersuchung beobachteten robusten Standardabweichungen der Laborergebnisse für die Bestimmungen der Reduktone, der jodometrischen Bestimmung der Freien Schwefligen Säure ohne (incl. Reduktone) bzw. nach Abzug der Reduktone (excl. Reduktone) und die nach den Regeln der Statistik für unab-

hängige Wertermittlungen durch Addition der Varianzen bei einer Differenzbildung zu erwartende Standardabweichung der Laborergebnisse nach Abzug der Reduktone (statistisch erwartet).

Tabelle 5: Robuste Standardabweichungen der jodometrischen Laborergebnisse

Probe	Reduktone	Freie Schweflige Säure, jodometrisch		
		incl. Reduktone	excl. Reduktone	statistisch erwartet
FT16P01	5,38	5,90	6,51	7,99
FT16P02	2,42	3,52	4,05	4,27
FT16P03	9,45	5,88	8,32	11,13
FT16P04	2,04	5,93	6,25	6,28
FT16P05	2,18	4,80	4,36	5,27

Es wird deutlich, dass die Standardabweichungen der Laborergebnisse nach Abzug der Reduktone numerisch in der Mehrzahl größere Beträge, im Einzelfalle (FT16P5) aber auch numerisch kleinere Werte annehmen als ohne Abzug der Reduktone. Der statistisch zu erwartende Wert wird, vor allem bei den Rotweinen FT16P01 und FT16P03 mit deutlich größerer Streuung der Reduktone, nicht erreicht. Dies entspricht dem Sachverhalt, dass keine Unabhängigkeit der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure und der Reduktone vorliegt, weil beide Werte in der Regel von derselben Person mit denselben Reagenzien und Geräten sowie weitgehend einheitlicher Endpunktfeststellung ermittelt werden.

Die Berechnung einer Zielstandardabweichung nach Horwitz auf der Basis des stets niedrigeren Median der Werte nach Abzug der Reduktone widerspricht der allgemeinen praktischen Erfahrung, nach der bei der Differenzbildung aus zwei streuenden Untersuchungsergebnissen keine Abnahme der Streuung des resultierenden Wertes zu erwarten ist. Insbesondere bei geringen Gehalten an Freier Schweflicher Säure nach Abzug der Reduktone ergeben sich sehr niedrige Werte der Zielstandardabweichung, die fälschlich den Eindruck einer mangelnden Beherrschung der Analytik entstehen lassen.

Es erscheint daher vernünftig in Übereinstimmung mit den in der Tabelle 5 dargestellten Ergebnissen und den Erfahrungen aus den Laborvergleichsuntersuchungen 2013 bis 2015 davon auszugehen, dass die Standardabweichung der Ergebnisse der Differenzbildung der Standardabweichung für die Bestimmung der Freien Schwefligen Säure einschließlich der Reduktone in den Grenzen zufälliger Streuungen entspricht.

Die aus der Anwendung dieser Überlegungen folgenden Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel}) sind mit dem jeweiligen Median in der Tabelle 6 für alle Proben zusammengefasst. Die jeweils vor bzw. nach Abzug der Reduktone erhaltenen, vergleichbaren Werte der Quotienten s_L/s_H und der Kennziffern für die Zuverlässigkeit der Bezugswerte bestätigen die Überlegungen zur Auswahl der Zielstandardabweichung. Es ergeben sich somit bei allen Prüfmaterialien für die Bewertung der Laborleistung **gültige Z-Score**.

Tabelle 6: Jodometrische Bestimmung der Freien Schwefligen Säure [mg/L]

Probe	einschließlich Reduktone			ausschließlich Reduktone		
	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	58,15	1,33	0,13	40,00	1,64	0,12
FT16P02	26,00	1,43	0,20	21,00	1,81	0,28
FT16P03	65,00	1,24	0,20	39,00	1,46	0,24
FT16P04	42,00	1,48	0,22	37,00	1,51	0,29
FT16P05	32,00	1,51	0,22	26,00	1,37	0,24

Durch die Berücksichtigung der Erfassung der Reduktone bei der jodometrischen Bestimmung der Schwefligen Säure sollte sich nach Abzug ihres Betrages eine Übereinstimmung der nach allen Verfahren erhaltenen Werte ergeben. Inwieweit dieses Ziel praktisch erreicht wird, zeigt die Zusammenstellung der Medianwerte in Tabelle 7.

Tabelle 7: Vergleich der Medianwerte für Freie Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Reduktone	jodometrisch incl. Reduktone	Destillation Photometrie	jodometrisch excl. Reduktone
FT16P01	18,0	58,15	53,70	40,00
FT16P02	5,0	26,00	23,65	21,00
FT15P03	22,0	65,00	60,25	39,00
FT16P04	5,0	42,00	42,00	37,00
FT16P05	6,0	32,00	32,10	26,00

Es wird deutlich, dass die Medianwerte der jodometrischen Bestimmungsergebnisse nach Abzug der Reduktonwerte stets unter den Medianwerten der durch Destillation bzw. Photometrie erhaltenen Bestimmungsergebnisse lagen. Selbst bei den Weißweinen FT16P02 und FT16P04 sowie dem Roséwein FT16P05 überschreitet die Differenz den Bereich der Unsicherheit der betrachteten Werte. Bei den beiden Rotweinen FT16P01 und FT16P03 ist die Differenz – wie typisch – deutlich größer. Dahingegen sind die Medianwerte der jodometrischen Bestimmungen bei dem Weißwein FT16P04 und dem Roséwein FT16P05 mit dem Medianwert der durch Destillation bzw. Photometrie erhaltenen Werte identisch. Bei dem Weißwein FT16P02 überschreitet der Unterschied die Unsicherheit der Medianwerte nur geringfügig und erscheint praktisch sowie für die Bewertung der Laborleistung nicht erheblich. Insgesamt bestätigt dies die Schlussfolgerungen aus der Diskussion der Ergebnisse für die Reduktone, dass im Durchschnitt zu hohe Reduktonwerte ermittelt werden. Dies ist zumindest im Fall der Rotweine geeignet, Zweifel daran zu wecken, dass im Mittel der nach Abzug der Reduktone erhaltene Wert den "wahren" Gehalt an Freier Schwefliger Säure sinnvoll und gültig darstellt und damit als Bezugswert geeignet ist. Ferner bestätigt dies die Empfehlung bei Weiß- und Roseweinen ohne Ascorbinsäurezusatz den für Reduktone erhaltenen Wert unberücksichtigt zu lassen.

Die mit **Destillations- oder photometrischen Verfahren** ermittelten Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure** sind vom Gehalt an Reduktonen unabhängig. Sie wurden auf der Basis ihres gemeinsamen Median und der daraus nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung bewertet. In der Tabelle 8 sind für alle Proben der jeweilige Median und die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_H) zusammengefasst.

Tabelle 8: Gesamtergebnis von Destillations- und photometrische Verfahren zur Bestimmung der Freien Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Anzahl Werte	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_H
FT16P01	18	53,70	2,32	0,55
FT16P02	16	23,65	1,24	0,31
FT16P03	18	60,25	1,79	0,42
FT16P04	19	42,00	1,19	0,27
FT16P05	16	32,10	1,46	0,37

Für das Prüfgut FT16P01 ist das Gesamtergebnis in Anbetracht der über dem jeweiligen Grenzwert liegenden Quotienten s_L/s_H und u_M/s_H nicht zur Ermittlung gültiger Z-Score geeignet. Für das Prüfgut FT16P03, ebenfalls ein Rotwein, können infolge der erhöhten Werte der Quotienten auf dieser Grundlage ebenfalls nur eingeschränkt gültige Z-Score ermittelt werden, während insbesondere für die Weißwein-Prüfgüter FT16P02 und FT16P04 das Gesamtergebnis befriedigend ausgefallen ist.

Als weiteres Verfahren zur Bestimmung der Freien Schwefligen Säure ohne einen Einfluss der Reduktone steht seit einigen Jahren die **FTIR-Messung in der Gasphase** zur Verfügung. Das Verfahren wurde 2014 aufgrund eines methodenprüfenden Ringversuchs auch für die amtliche Qualitätsweinanalyse zugelassen. Die Ergebnisse dieses Verfahrens waren in den Laborvergleichsuntersuchungen der Jahre 2013 bis 2015 überwiegend befriedigend. Daher wurde eine weitere Auswertung der Laborergebnisse unter Einschluss der mittels Fourier-Transform-Spektroskopie in der Gasphase erhaltenen Laborergebnisse durchgeführt. Tabelle 9 fasst die Ergebnisse dieser Auswertung zusammen.

Tabelle 9: Gesamtergebnis von Destillations-, photometrischen und FTIR-Verfahren zur Bestimmung der Freien Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Anzahl Werte	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_H
FT16P01	34	53,50	2,04	0,35
FT16P02	32	23,65	1,62	0,29
FT16P03	35	58,80	1,70	0,29
FT16P04	36	41,15	1,36	0,23
FT16P05	33	36,00	1,59	0,28

Für das Prüfgut FT16P01 ergeben sich auf dieser Grundlage deutlich verbesserte Werte für die Quotienten s_L/s_H und u_M/s_H und es können nur geringfügig in ihrer Aussagekraft eingeschränkte Z-Score für die Laborergebnisse ermittelt werden. Auch bei dem zweiten Rotwein FT16P03 verbessert sich der Wert des Quotienten s_L/s_H . Die Verbesserung des Wertes dieses Quotienten ist bei beiden Rotwein-Prüfgütern wahrscheinlich auf einen verringerten Einfluss der unter Verwendung von Pararosanilin erhaltenen photometrischen Messergebnisse zurückzuführen, die erfahrungsgemäß bei derartigen Prüfgütern durch die Eigenfarbe des Prüfgutes gestört werden und daher besonders stark streuen. Bei den übrigen Prüfgütern erhöht sich der Wert des Quotienten s_L/s_H durch das Einbeziehen der Ergebnisse eines weiteren Bestimmungsverfahrens. Dies wird aber durch die erheblich größere Anzahl an Laborergebnissen mehr als ausgeglichen, sodass für alle Prüfgüter, ausgedrückt durch kleinere und für vier der Prüfgüter unter 0,3 lie-

gende Werte des Quotienten u_M/s_H eine bessere Zuverlässigkeit des Bezugswertes erreicht wird.

Alle Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure, die mit Untersuchungsverfahren ermittelt wurden, bei denen Reduktone nicht erfasst werden**, wurden daher auf der gemeinsamen Datenbasis durch **gültige Z-Score** bewertet.

4.1.3 Gesamte Schweflige Säure

Zu diesem Parameter war für den Fall der jodometrischen Bestimmung wie bei der Freien Schwefligen Säure die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse ohne Abzug der Reduktone erbeten. Da bei diesem Parameter in der Praxis des Vergleichs von Laborergebnissen davon auszugehen ist, dass die Ergebnisse der als Referenz herangezogenen Destillationsverfahren und die für das Referenzverfahren ermittelte Vergleichsstandardabweichung die Erwartungen hinsichtlich der Übereinstimmung der Untersuchungsergebnisse und Entscheidungen über die Leistungsfähigkeit der Laboratorien prägen, ist es sinnvoll im Gesamtbericht wie in den endgültigen Laborergebnismitteilungen primär alle Laborergebnisse wie vom Teilnehmer mitgeteilt auf der Basis des Median der Ergebnisse mit Destillationsverfahren und der Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens als Zielstandardabweichung zu bewerten. Eine Benachteiligung der Teilnehmer, die den Anweisungen zur Laborvergleichsuntersuchung – eventuell abweichend von der laborüblichen Praxis – folgend jodometrisch bestimmte Gehalte an Gesamter Schwefliger Säure einschließlich des Beitrages der Reduktone mitgeteilt haben, ergibt sich daraus nicht. Wie Tabelle 10 aufzeigt, liegen die Medianwerte dieser Ergebnisse sehr nahe bei den Medianwerten der Ergebnisse aus Destillationsverfahren, während die Mediane nach Korrektur des Einflusses der Reduktone stets und bei den Rotweinen deutlich niedrigere Werte als die Ergebnisse aus Destillationsverfahren aufweisen.

Tabelle 10: Vergleich der Medianwerte für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Reduktone	jodometrisch incl. Reduktone	Destillation	jodometrisch excl. Reduktone
FT16P01	18,0	149,0	147,5	128,0
FT16P02	5,0	78,3	77,0	74,0
FT16P03	22,0	110,0	107,0	84,5
FT16P04	5,0	114,0	112,5	108,4
FT16P05	6,0	134,0	137,0	128,0

Da die Kennzahlen für die Qualität des Gesamtergebnisses der Destillationsverfahren, die Quotienten s_L/s_H und u_M/s_{Ziel} , stets unauffällige Werte aufwiesen, wurden bei allen Prüfgütern **gültige Z-Score** für die Bewertung der Laborleistung erhalten.

In allen Teilen des Gesamtberichtes und für alle Prüfgüter wird zusätzlich eine Bewertung der jodometrischen Ergebnisse jedes Labors jeweils unter Einschluss als auch unter Abzug des Beitrages der Reduktone auf der Basis des Median der mit demselben Bestimmungsprinzip erhaltenen Ergebnisse dokumentiert. Dies geschieht vor allem, um den Einfluss der Reduktombestimmung und des Umganges mit deren Ergebnissen auf das Endergebnis zu demonstrieren. Hierfür müsste bei strenger Betrachtung zusätzlich beachtet werden, ob die jodometrische Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure analog zum gebräuchlichen OIV-Verfahren oder

analog zur ehemaligen Verwaltungsvorschrift für die Weinuntersuchung erfolgt. Nach dem gebräuchlichen OIV-Verfahren wird die Bestimmung in aufeinander folgenden Schritten einer Bestimmung der Freien Schwefligen Säure einschließlich Reduktone und einer nach Verseifung durchgeführten Bestimmung der Gebundenen Schwefligen Säure durchgeführt. Nach der in der Praxis wohl vorherrschenden Verfahrensweise gemäß der Verwaltungsvorschrift wird die Weinprobe unmittelbar mit Alkali verseift und anschließend die Gesamte Schweflige Säure (einschließlich der Reduktone) ermittelt. Allerdings kann es bei dieser Vorgehensweise zu unberechenbaren Verlusten der Reduktone, insbesondere im Fall der Anwendung von Ascorbinsäure, durch z.B. schwermetallkatalysierte Oxidation während der Verseifungszeit kommen. Diese mögliche unterschiedliche Verfahrensweise wird durch die üblichen Methodenangaben nach dem Verzeichnis der Landwirtschaftskammer und auch im Rahmen dieser Laborvergleichsuntersuchung nicht abgebildet. Zusätzlich zu den Unsicherheiten der Reduktionbestimmung begründet dies Zweifel an der Ermittlung eines "wahren" und fachlich zuverlässigen Bezugswertes für die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen der Gesamten Schwefligen Säure unter Reduktionabzug selbst bei Erfüllung der formalen Qualitätskriterien für das Gesamtergebnis.

4.2 Flüchtige Säure und Acetat

4.2.1 Flüchtige Säure

Vom Auswerter war entsprechend der Definition des Parameters um die Mitteilung der Ergebnisse unter Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure gebeten worden. Dieser Bitte wurde überwiegend entsprochen. Da die Bestimmung von Sorbinsäure nicht Gegenstand dieser Laborvergleichsuntersuchung war, wurde die definitionsgemäß ebenfalls erforderliche Korrektur des Einflusses der Sorbinsäure nicht gefordert, obwohl dieser Stoff in den Prüfgütern FT16P04 und FT16P05 vorhanden war. Dementsprechend wurde als Bezugswert (wahrer Wert) der Median der unter Korrektur des Beitrages der Schwefligen Säure durch Destillationsverfahren erhaltenen Laborergebnisse verwendet.

Einen Überblick über das Gesamtergebnis für alle Prüfgüter gibt die Tabelle 11, in der die Anzahl der berücksichtigten Laborergebnisse, der jeweilige Mittelwert, die Standardabweichung der Laborergebnisse (s_L) und die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_Z) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Zuv. herk.) zusammengefasst sind.

Tabelle 11: Ergebnisse der Bestimmung der Flüchtigen Säure [g/L]

Probe	Gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	24	0,521	0,0538	1,88	0,38
FT16P02	23	0,485	0,0580	2,03	0,42
FT16P03	23	0,366	0,0517	1,81	0,38
FT16P04	20	0,364	0,0683	2,39	0,53
FT16P05	22	0,342	0,0569	1,99	0,42

Da der Richtwert 0,45 g/L bei keinem Prüfgut bewertungsrelevant überschritten wurde, wurde stets die Zielstandardabweichung $\pm 0,029$ g/L angewandt. Es wurden nicht mehr als zwei Laborergebnisse wegen eines Z-Score über dem absoluten Betrag 5 ausgeschlossen. Mit einer Ausnahme (FT16P04) wurden auf dieser Basis (noch) **gültige Z-Score** erhalten. Der Richtwert

1,5 für den Quotienten aus Laborstandardabweichung und Zielstandardabweichung s_L/s_Z wurde jedoch stets deutlich überschritten und der Höchstwert 2,0 bei vier der fünf Prüfgüter nur knapp unterschritten. Daher ist die Zuverlässigkeit der Bezugswerte stets eingeschränkt und bei dem Prüfgut FT16P04 nicht gegeben. Bei der vorliegenden Anzahl an Laborergebnissen darf deren Standardabweichung nicht über dem 1,5-fachen Betrag der Zielstandardabweichung liegen, wenn ein zuverlässiger Bezugswert für die Ermittlung gültiger Z-Score erhalten werden soll. Insgesamt ergibt sich daher die Schlussfolgerung, dass die Bestimmungsmethode noch nicht befriedigend beherrscht wird. Eine Ursache hierfür kann sein, dass im Bereich der vorliegenden önologisch unauffälligen Gehalte die gegebene Ergebnisqualität als ausreichend betrachtet wird. Eine Verbesserung der Präzision ist dennoch wünschenswert. Hierzu können insbesondere die Teilnehmer beitragen, deren Ergebnisse stärker vom Median abweichen, d.h. Z-Score im absoluten Betrag über 2 aufweisen.

4.2.2 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

Zum Parameter Acetat wurden vor allem Untersuchungsergebnisse mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) sowie automatisierter und manueller enzymatischer Bestimmung eingesandt. Einzelne Ergebnisse wurden auch mittels Ionenchromatographie und ^1H -Kernresonanzspektroskopie ermittelt. Die Tabelle 12 fasst die mittels robuster statistischer Verfahren ermittelten deskriptiven Daten für die häufigsten Methoden zusammen.

Tabelle 12: Robuste deskriptive Ergebnisse der Bestimmung von Acetat [g/L]

Probe	HPLC			enzymat., automat.			enzymat., manuell		
	Zahl	Mittel	Std.Abw.	Zahl	Mittel	Std.Abw.	Zahl	Mittel	Std.Abw.
FT16P01	5	0,515	0,0507	19	0,479	0,0412	3	0,434	0,0159
FT16P02	4	0,412	0,0834	15	0,466	0,0403	3	0,371	0,0231
FT16P03	5	0,330	0,0184	18	0,342	0,0322	3	0,290	0,0141
FT16P04	4	0,259	0,0408	19	0,303	0,0306	3	0,218	0,0058
FT16P05	5	0,189	0,1150	8	0,230	0,0683	4	0,200	0,0421

Zur Beschreibung wurden die robusten statistischen Kennzahlen gewählt, weil bei der meist geringen Anzahl der Laborergebnisse je Prüfgut und Methode die im Rahmen der Laborvergleichsuntersuchung angewendeten Regeln für den Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse nicht sinnvoll anwendbar sind und durch die Festlegung der Zielstandardabweichung in die Datenstruktur stark eingreifen. Die in Abhängigkeit von der Untersuchungsmethode gegliederten Ergebnisse weisen ein fast einheitliches Muster dahingehend auf, dass der niedrigste Mittelwert bei der manuellen und der höchste bei der automatisierten enzymatischen Bestimmung auftrat, während die mittels HPLC erhaltenen Ergebnisse bei der Mehrzahl der Prüfgüter die größte Streuung aufwiesen.

Analog zur Zusammenfassung aller Ergebnisse für Flüchtige Säure in Tabelle 11 sind in der Tabelle 13 die Ergebnisse der Bestimmungen des Acetats als Essigsäure unter Berücksichtigung aller Untersuchungsmethoden zusammengefasst. Die automatisiert enzymatisch erhaltenen Werte prägen wegen ihres großen Anteiles an allen Laborergebnissen den Bezugswert. Zur Bewertung der Laborergebnisse steht bei diesem Parameter keine experimentell ermittelte Vergleichsstandardabweichung zur Verfügung. Die Zielstandardabweichung muss daher nach

Horwitz berechnet werden. Bei den vorliegenden Gehalten liegt deren Betrag zwischen $\pm 0,017$ und $\pm 0,030$ und stellt damit bei der Mehrzahl der Prüfgüter höhere Anforderungen als die für Flüchtige Säure angewandte Zielstandardabweichung. Dies trägt dazu bei, dass die in der Spalte 'Gültige Werte' jeweils in Klammern angegebene Anzahl an (zusätzlichen) Laborergebnissen wegen eines absoluten Betrages des Z-Score über 5 ausgeschlossen wurden.

Tabelle 13: Ergebnisse der Bestimmung von Acetat (als Essigsäure) [g/L]

Probe	Gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	27 (1)	0,480	0,0563	1,88	0,36
FT16P02	21 (2)	0,454	0,0556	1,94	0,42
FT16P03	24 (4)	0,329	0,0254	1,15	0,24
FT16P04	26 (2)	0,279	0,0373	1,92	0,38
FT16P05	21 (4)	0,251	0,0248	1,42	0,31

Die Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der Zielstandardabweichung lagen bei den Prüfgütern FT16P01, FT16P02 und FT16P04 zwischen 1,8 und 2,0 und waren mit der Folge eingeschränkter Zuverlässigkeit der Bezugswerte (Quotient $u_M/s_{Ziel} > 0,3$) stark erhöht. Nur bei den Prüfgütern **FT16P03** und **FT16P05** lagen die Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse unter 1,5 und der Bezugswert war gesichert. Uneingeschränkt **gültige Z-Score** konnten daher nur für diese Prüfgüter erhalten werden.

Das Gesamtergebnis für diesen Parameter ist bei den vorliegenden Gehalten nicht befriedigend. Während die bei der Bestimmung mittels HPLC beobachtete große Streuung aufgrund der geringen Signalintensität nicht ungewöhnlich ist, treten bei den Laborergebnissen der automatisierten enzymatischen Bestimmung mehrfach auffällig abweichende, erhöhte Werte auf, die auf Mängel bei der Durchführung deuten. Es erscheint aber nicht naheliegend, dass die Zielstandardabweichung für die Gehalte zu streng gewählt ist. Für zwei von drei Prüfgütern mit Gehalten von rund 0,3 g/L wurde – allerdings bei erhöhter Ausschlussquote – ein zufriedenstellendes Gesamtergebnis erreicht. Hier könnte ein zugleich methodenprüfender und methodenvergleichender Ringversuch zur Ermittlung einer analytisch begründeten Zielstandardabweichung hilfreich sein.

4.3 Gesamte und L-Äpfelsäure

Wie Tabelle 3 zeigt, ist bei den Parametern Gesamte und L-Äpfelsäure bei dem Prüfgut FT16P01 der Richtwert 1,5 bzw. der Höchstwert 2,0 des Quotienten s_L/s_Z erreicht. Bei der weiteren Auswertung ergaben sich – in Übereinstimmung mit Beobachtungen bei früheren FTIR Laborvergleichsuntersuchungen – ähnliche Ergebnisse auch bei den anderen Prüfgütern. Dies belegen die in Tabelle 14 und in Tabelle 15 zusammengestellten statistischen Kennzahlen für das laborübergreifende Gesamtergebnis.

Für den Parameter Gesamte Äpfelsäure, der überwiegend mittels HPLC bestimmt wurde, liegen die Quotienten s_L/s_{Ziel} alle über dem Richtwert und im Falle des Prüfgutes FT16P02 über dem Höchstwert für die Ermittlung gültiger Z-Score. Das Weißweinprüfgut FT16P02 wies einen für Moselriesling ungewöhnlichen, praktisch vollständigen Äpfelsäureabbau auf. Der verbliebene Gehalt liegt, worauf auch von mehreren Teilnehmern hingewiesen wurde, für die überwiegend

angewendete Bestimmungsmethode aber auch bei enzymatischer Bestimmung an der Untergrenze der Anwendbarkeit der Analyseverfahren. Insoweit ist das Gesamtergebnis für dieses Prüfgut nicht ungewöhnlich. Allerdings bedeuten die auch bei den anderen Prüfgütern erhöhten Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} , dass ein erhöhter Anteil an Laborergebnissen mit mäßig erhöhten Z-Score von nahezu 2,0 bis zu mäßig über 3,0 vorliegt und damit die Streuung der Laborergebnisse im Vergleich zur Zielstandardabweichung generell zu hoch ist. Das Problem besteht auch bei den Prüfgütern mit gut bestimmbareren Äpfelsäuregehalten.

Tabelle 14: Ergebnisse der Bestimmung von Gesamter Äpfelsäure) [g/L]

Probe	Anzahl Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	14 (2)	0,610	0,0669	2,01	0,45
FT16P02	10 (1)	0,120	0,0478	2,32	0,73
FT16P03	13 (2)	0,801	0,0595	1,55	0,43
FT16P04	16 (1)	2,85	0,157	1,76	0,45
FT16P05	15 (2)	2,19	0,126	1,72	0,48

Nach den Auswertungsregeln für diese Laborvergleichsuntersuchung können die ausgewiesenen **Z-Score** für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure** mit Ausnahme der Prüfgutes FT16P02 als **gültig** betrachtet werden. Zwar beeinträchtigt die – auch bedingt durch die relativ geringe Anzahl an Laborergebnissen – in allen Fällen deutlich erhöhte Unsicherheit des Bezugswertes, die Aussagekraft der Z-Score, doch wird dies bei den von D-Äpfelsäure freien Prüfgütern durch die praktisch übereinstimmenden Bezugswerte für L-Äpfelsäure ausgeglichen. Für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse ist die gegebene Unsicherheit des Bezugswertes in Anbetracht der angewandten, Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung ausreichend.

Tabelle 15: Ergebnisse der Bestimmung von L-Äpfelsäure) [g/L]

Probe	Anzahl Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT16P01	26 (0)	0,607	0,0674	2,03	0,40
FT16P02	22 (0)	0,114	0,0218	1,05	0,22
FT16P03	26 (0)	0,771	0,0738	1,96	0,38
FT16P04	26 (1)	2,81	0,187	2,11	0,41
FT16P05	24 (0)	2,14	0,150	2,09	0,43

Obwohl bei enzymatischen Bestimmungsmethoden in der Regel eher eine geringere Streuung der Laborergebnisse als bei der Anwendung der Hochleistungsflüssigkeitschromatographie beobachtet wird, sind die Gesamtergebnisse für die Parameter L-Äpfelsäure, wie Tabelle 15 verdeutlicht, noch unbefriedigender als für den Parameter Gesamte Äpfelsäure. Lediglich für das Prüfgut mit einem Gehalt an L-Äpfelsäure im Bereich der Bestimmungsgrenze ergeben sich – formal – unauffällige Qualitätskennzahlen für das Gesamtergebnis. Bei zwei von fünf Prüfgütern können **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden und die Zuverlässigkeit der Bezugswerte ist mit einer Ausnahme beeinträchtigt. Stark abweichende Laborergebnisse liegen praktisch nicht vor. Die Datenstruktur ist damit für beide Parameter vergleichbar.

Für beide Parameter wird die Zielstandardabweichung aus der Vergleichsstandardabweichung des enzymatischen Bestimmungsverfahrens nach Methode OIV-MA-AS313-11 abgeleitet. Zusammenfassend stellt sich daher für beide Parameter die fachliche Frage, ob die Zielstan-

Standardabweichung unter primär analytischem Gesichtswinkel bei normaler Sorgfalt nicht eingehalten werden kann und damit zu streng ist oder ob aus önologischen bzw. wirtschaftlichen Gründen die vorliegende Streuung der Laborergebnisse akzeptiert wird. In diesem Fall ist die Empfehlung aus dem Vorjahr zu wiederholen, dass ein geeignetes Leistungskriterium in Form einer Standardabweichung entwickelt werden sollte.

5 Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen

5.1 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT16P01

Bei dieser Laborvergleichsuntersuchung liegt neben der Überprüfung und Sicherung der Qualität der Untersuchungsergebnisse für das Qualitätsweinprüfungsverfahren ein weiterer Schwerpunkt auf der Überprüfung der Qualität der Laborleistung bei Anwendung des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR). Für den Vergleich der mit dieser Methode erhaltenen Laborergebnisse mit den Ergebnissen anderer, hier als herkömmlich bezeichneter Methoden, wird eine Zielstandardabweichung ($s_{\bar{U}}$) verwendet, die Matrixeffekte statistisch, d.h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Liegt kein ausgeprägter Matrixeffekt vor, charakterisieren die erhaltenen Z-Score unmittelbar die Leistungsfähigkeit der eigenen Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Bei ausgeprägten Matrixeffekten wird diese Aussage, gegebenenfalls nur für einzelne Parameter, beeinträchtigt.

Diese Prüfung kann grundsätzlich verbessert werden, wenn die mit dieser Methode erhaltenen Ergebnisse untereinander verglichen werden und eine einheitliche Kalibrierung verwendet wird, weil dann die Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens (s_{FTIR}) als Leistungskriterium herangezogen werden kann. Ihr Betrag ist für die Mehrzahl der Parameter deutlich kleiner als die zusätzlich Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung $s_{\bar{U}}$. Wird keine einheitliche Kalibrierung vorausgesetzt, so zeigt sich das Maß der Ausschöpfung der erreichbaren Vergleichbarkeit von FTIR-Ergebnissen untereinander.

Die nachfolgende Tabelle 16 fasst die wesentlichen beschreibenden Daten einer ausschließlich die FTIR-Ergebnisse berücksichtigenden Auswertung zusammen. Abweichend von der Verfahrensweise bei früheren Laborvergleichsuntersuchungen wurden diese nicht unter Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse, wie bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren, sondern vereinfacht durch ein robustes Verfahren zur Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung erhalten. Hierbei werden Ausreißer nicht ausgeschlossen. Der Median aller Messergebnisse einschließlich der Ausreißer bleibt erhalten aber der Einfluss von Ausreißern auf Mittelwert und Standardabweichung wird vermindert.

Tabelle 16: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut (FT16P01)

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw.	Zielstdabw n. Horwitz	Zielstdabw exp. FTIR	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
				s_L	s_H	s_{FTIR}			
Relative Dichte 20 °C/20 °C	81	0,99932	0,99930	0,000204		0,000146		1,40	0,16
Vorhandener Alkohol (g/L)	86	93,868	93,900	0,859	2,681	0,739	0,32	1,16	0,09
Gesamtextrakt (g/L)	54	39,253	39,300	0,654	1,279	0,415	0,51	1,58	0,21
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	83	14,899	14,880	0,788	0,561	0,354	1,41	2,23	0,24
Vergärbare Zucker(S) (g/L)	85	14,405	14,400	0,694	0,545	0,354	1,27	1,96	0,21
Gesamtsäure (g/L)	84	5,251	5,233	0,179	0,231	0,0816	0,78	2,19	0,24
Glucose (g/L)	83	6,697	6,700	0,532	0,285	0,288	1,86	1,85	0,20
Fructose (g/L)	83	7,656	7,700	0,511	0,320	0,222	1,59	2,32	0,25
Glycerin (g/L)	69	7,383	7,310	0,498	0,307	0,265	1,62	1,88	0,23
pH-Wert	83	3,583	3,590	0,0681		0,0188		3,62	0,40
Weinsäure (g/L)	78	1,964	1,960	0,206	0,100	0,132	2,05	1,56	0,18
Flüchtige Säure (g/L)	77	0,5240	0,530	0,0953	0,0330	0,0427	2,89	2,33	0,25
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	79	0,515	0,500	0,229	0,0314	0,0975	7,29	2,35	0,26
Gesamte Milchsäure (g/L)	79	2,053	2,060	0,282	0,105	0,0805	2,70	3,49	0,39
Freie Schweflige Säure (mg/L)	16	54,45	53,50	5,940	4,703		1,26		0,32
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	18	141,84	144,00	14,995	10,905	5,357	1,38	2,80	0,66

Anmerkung: **Blau** markierte Daten sind auffällig und werden diskutiert. **Rot** markierte Daten weisen auf die Überschreitung von Grenzen hin.
 Grau markierte Daten: Der Gehalt liegt bei Berücksichtigung möglicher Matrixeinflüsse unterhalb der Bestimmungsgrenze

Erläuterungen zur Tabelle 16:

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

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

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

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

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

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

Da wirkliche Ausreißer bei den Ergebnissen der FTIR-Messungen selten, eine zu breite homogene Streuung dahingegen häufiger ist, wird durch die robuste Berechnungsweise ein "Zuschneiden" der Ergebnisse auf die Zielstandardabweichung vermieden. Die Streuung der Laborergebnisse erhöhende Einflüsse wie die Verwendung ungeeigneter Kalibrierungen und Unterlassen von notwendigen Slope-Interzept-Korrekturen werden so im Gesamtergebnis leichter erkennbar, ohne die Ermittlung zutreffender Z-Score für einzelne Laborergebnisse zu beeinträchtigen. Bei dieser Auswertung wird der Parameter Essigsäure nicht berücksichtigt, weil die Anzahl der Laborergebnisse zu diesem Parameter für eine aussagekräftige Bewertung zu gering ist.

Geht man davon aus, dass in der überwiegenden Zahl der teilnehmenden Laboratorien geeignete Kalibrierungen verwendet und somit gültige Medianwerte erhalten werden, so kann mit den Medianwerten und den experimentellen Zielstandardabweichungen (s_{FTIR}) jeder Teilnehmer selbst Z-Score für den Vergleich der FTIR-Ergebnisse untereinander nach der Formel „Z-Score = (Messwert – Medianwert)/ s_{FTIR} “ berechnen. Diese werden daher im Abschnitt 6 dieses Berichtes nicht wiedergeben und sind in den Ergebnismitteilungen für die einzelnen Laboratorien ebenfalls nicht enthalten.

Da inzwischen davon ausgegangen werden muss, dass die mit der Produktkalibrierung AP_2011 (siehe auch Abschnitt 2.3) für die amtliche Qualitätsweinanalyse zugelassenen Parameterkalibrierungen, in die Laborkalibrierungen integriert wurden, wurde in Tabelle 16 wie auch bei der Bewertung der Laborergebnisse für den Parameter **Fructose** erstmals die Vergleichsstandardabweichung s_{FTIR} mit dem Wert $\pm 0,222$ g/L und der Wert $\pm 0,330$ g/L für die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung (s_0) zur Bewertung der Differenz zwischen den Ergebnissen der herkömmlichen Methoden und den Ergebnissen der FTIR-Messungen eingesetzt.

Ein Vergleich der in dieser Laborvergleichsuntersuchung gefundenen robusten Standardabweichung der Laborergebnisse (Spalte "Labor-Stdabw. s_L ") mit der nach Horwitz berechneten, im Allgemeinen von geeigneten analytischen und beherrschten Verfahren erreichten Vergleichsstandardabweichung wird in der Spalte "Quotient s_L/s_H " durchgeführt. Es wird deutlich, dass bei den Messungen mit den Laborkalibrierungen nur für etwa ein Drittel der Parameter ein vergleichbarer Wert erreicht wird. Bei den anderen Parametern liegt der Betrag des Quotienten s_L/s_H über 1,5. Dabei zeigt ein Vergleich der Standardabweichungen nach Horwitz mit den Vergleichsstandardabweichungen aus methodenprüfenden Ringversuchen, dass für die Mehrzahl der Parameter Quotienten unter 1,5 erreichbar sind. Sind die Quotienten s_L/s_H blau bzw. rot markiert, wird die Vergleichsstandardabweichung nach Horwitz (s_H) durch die Laborstandardabweichung (s_L) für diese Parameter signifikant überschritten. Das Ergebnis ist noch ungünstiger bei einem Vergleich der Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit den Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw exp. FTIR, s_{FTIR} "), die bei Ringversuchen zur Prüfung der FTIR-Methode erhalten wurden. Wie die Daten in Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR} " zeigen, wurde nur bei den Parametern Relative Dichte und Vorhandener Alkohol der Wert 1,5 eingehalten sowie bei den Parametern Gesamtextrakt und Weinsäure nur geringfügig überschrit-

ten, während bei den übrigen Parametern der Höchstwert von 2,0 fast erreicht bzw. überschritten wurde. Daraus folgt, dass bei den FTIR-Untersuchungen die Leistungsfähigkeit des Verfahrens bei weitem nicht erreicht wurde. Da nach den Erfahrungen bei Nachberechnungen aus den Laborrohdaten mit einer einheitlichen Kalibrierung die Quotienten in der Regel niedriger ausfallen, kommen als Ursache der größeren Streuung unzureichende Slope-Interzept-Korrekturen und vor allem weniger geeignete Parameterkalibrierungen in Betracht. Es kann sich allerdings auch ein schlechterer Pflegezustand des Gerätes auswirken. Systematische Abweichungen der eigenen Ergebnisse vom mittleren Ergebnis der FTIR-Untersuchungen geben in Verbindung mit den Ergebnissen der herkömmlichen Methoden Hinweise auf die Eignung der eigenen Kalibrierung bzw. ihrer Anpassung an das eigene Laborgerät und sollten Anlass zu Verbesserungsmaßnahmen geben.

Zu mehreren Parametern werden nachstehend ausführlichere Anmerkungen gemacht, die sich in der Regel nicht nur auf das Prüfgut FT16P01 beziehen, sondern auch auf die Ergebnisse bei den weiteren Parametern übertragbar sind.

Bei dem Parameter **Vergärbare Zucker** ist zu berücksichtigen, dass die grundlegenden Kalibrierungen (Basiskalibrierungen) zumindest überwiegend in der Zeit erstellt wurden, als die Ergebnisse reduktometrischer Zuckerbestimmungen definitionsgemäß und weinrechtlich als "Zucker" galten. Daraus folgt, dass dieser Parameter – wie dies teilweise auch in der Praxis geschieht – **exakter als "Vergärbare Zucker (reduktometrisch)"**, abgekürzt "Verg. Zucker(r)", zu bezeichnen ist, weil er auf die Bestimmung derartiger Zuckerwerte abgestellt ist. Bei einem Vergleich der mit einer solchen Kalibrierung ermittelten FTIR-Messergebnisse für Vergärbaren Zucker (reduktometrisch) mit den der heutigen Definition des Zuckerbegriffes genügenden Ergebnissen der Zuckerbestimmung mit den spezifischen Methoden Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie sind daher grundsätzlich ähnliche systematische Unterschiede wie zwischen den Ergebnissen dieser Methoden und den Ergebnissen der reduktometrischen Zuckerbestimmung vor allem bei Rotweinen mit geringem Zuckerhalt zu erwarten. Dieser systematische Unterschied wird auch bei den FTIR-Messergebnissen deutlich, wenn die Mittelwerte oder Mediane der beiden Auswertungsvarianten in Tabelle 16 verglichen werden. In der zweiten Variante "Vergärbare Zucker(S)" wurde der Gehalt gemäß der aktuell für die amtliche Qualitätsweinanalyse gültigen Vorgabe als Summe der mittels FTIR bestimmten Gehalte an Glucose und Fructose berechnet. Dieser Unterschied ist gegebenenfalls bei der laborinternen Bewertung der messtechnischen Richtigkeit der eigenen Ergebnisse zu berücksichtigen. Daher werden in diesem Gesamtbericht auch Bezugswerte aus den Ergebnissen reduktometrischer Zuckerbestimmungen und die zugehörigen Zielstandardabweichungen mitgeteilt.

In der Praxis werden die systematischen Unterschiede zwischen den Ergebnissen der reduktometrischen und den Ergebnissen der spezifischen Zuckerbestimmungsmethoden jedoch häufig nicht beachtet oder es wird versucht mittels einer Slope-Interzept-Korrektur zu der die Ergebnisse spezifischer Zuckerbestimmungsmethoden verwendet werden, eine bessere Übereinstimmung der eigenen Messergebnisse mit definitionskonform ermittelten Zuckergehalten zu erzielen. Eine im Widerspruch zur Erstellung der Basiskalibrierung erfolgende Slope-Interzept-

Korrektur kann jedoch matrixabhängige bzw. verfahrensbedingte systematische Unterschiede der Ergebnisse verschiedener Untersuchungsmethoden nur 'durchschnittlich' und damit unzureichend ausgleichen. Um die Bedeutung dieser Möglichkeit in der Praxis und ihre Auswirkung auf die Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung besser einschätzen und gegebenenfalls eine sachgerechte Bewertung der jeweiligen Laborergebnisse durchführen zu können, wurde im Begleitschreiben zur Laborvergleichsuntersuchung um die Mitteilung gebeten, ob und in welcher Art und Weise eine Slope-Interzept-Korrektur durchgeführt wurde. Die auf dem Registerblatt 'Slope+Interzept+B0' der Exceldatei zur Ergebnismitteilung gegebene Möglichkeit zur Beantwortung dieser Fragen wurde jedoch sehr unvollständig genutzt. Dennoch ist erkennbar, dass alle denkbaren Varianten von einer der Basiskalibrierung entsprechenden Verwendung reduktometrisch ermittelter Zuckergehalte über die vermutete Verwendung der Ergebnisse spezifischer Zuckerbestimmungen bis zu Mischungen von Ergebnissen reduktometrischer und spezifischer Zuckerbestimmungen angewendet wurden. Diese heterogene Vorgehensweise dürfte auch dazu beitragen, dass die Laborergebnisse für "Vergärbaren Zucker (r)" relativ stärker streuen als die Laborergebnisse für "Vergärbare Zucker (S)", wie aus den Quotienten s_L/s_{FTIR} erkennbar wird. Diese unterschiedliche Praxis ist sicher ebenso wie die Verwendung unterschiedlicher Basiskalibrierungen nicht geeignet zwischen den Laboratorien die bestmögliche Übereinstimmung der FTIR-Bestimmungsergebnisse für diesen Parameter zu erreichen.

Auch bei dem Parameter **Fructose** ist der gegenüber dem Parameter Glucose erhöhte Wert des Quotienten s_L/s_{FTIR} mit einiger Wahrscheinlichkeit darauf zurückzuführen, dass die Umstellung auf die seit 2011 empfohlene Basiskalibrierung noch nicht vollständig vollzogen wurde, obwohl die ältere Basiskalibrierung eine höhere Matrixempfindlichkeit aufweist. Die stärkere Reaktion auf Matrixunterschiede führt zu einer stärkeren Streuung der FTIR-Laborergebnisse für diesen Parameter.

In der Tabelle 16 fällt weiter der Parameter **pH-Wert** durch einen besonders hohen Wert des Quotienten s_L/s_{FTIR} auf und gibt damit ein Beispiel für den Unterschied zwischen der üblichen Verfahrensweise bei der Auswertung der Laborergebnisse unter Ausschluss von Messwerten mit extremen Werten des Z-Score und der Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung mit robusten statistischen Methoden, da bei diesem Parameter in vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen wiederholt ein erhöhter Anteil von auszuschließender Ergebnisse auftrat. Die in Betracht kommenden Ursachen sind bereits oben angesprochen worden, wobei der Befund vor allem auf die Verwendung ungeeigneter Parameterkalibrierungen deutet, weil nach früheren Erfahrungen die experimentell ermittelte Vergleichsstandardabweichung von $\pm 0,0188$ bei Neuberechnung der Laborergebnisse aus den Rohdaten praktisch eingehalten wurde.

Die hohen Werte des Quotienten s_L/s_{FTIR} für die Parameter **Flüchtige Säure**, **Äpfelsäure** und **Milchsäure** spiegeln ebenfalls die kumulierten Einflüsse qualitätsmindernder Einflüsse wieder. Insbesondere dürfte sich auch auswirken, dass die FTIR-Messergebnisse häufig nur als orientierende Größe betrachtet werden, für die eine sorgfältige Auswahl der Basiskalibrierung und der Aufwand einer Slope-Interzept-Korrektur nicht erforderlich erscheint. Dabei wird übersehen,

dass FTIR-Messungen und ihre Auswertung im Konzentrationsbereich unter 5 g/L grundsätzlich schwieriger sind als bei den in hohen Konzentrationen vorliegenden Weinbestandteilen.

Schließlich ist für eine sachgerechte Bewertung des Quotienten s_L/s_{FTIR} für Gesamte **Schweflige Säure** zu beachten, dass die Berechnung auf dem Vergleich mit der Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens beruht. Im methodenprüfenden Ringversuch wurde für diesen Parameter aber nur die Einhaltung der nach Horwitz berechneten Vergleichsstandardabweichung bestätigt. Deren Betrag ist jedoch bereits bei Gehalten von 100 mg/L um etwa den Faktor 1,5 und bei Gehalten um 150 mg/L um den Faktor 2 größer als die benutzte Zielstandardabweichung. Damit ist auch der hier für das Prüfgut FT16P01 erhaltene Wert des Quotienten s_L/s_H gut vereinbar. In der Konsequenz bedeutet dies, dass die Laborergebnisse für **Gesamte Schweflige Säure** sehr streng beurteilt werden. **Mäßig erhöhte Z-Score** sollten daher **nicht zu Lasten** des Labors gewertet, sondern unter Verwendung der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung nachberechnet bzw. der Datentabelle im Abschnitt 6.12.1 entnommen werden.

Durch die Verwendung der Zielstandardabweichung $s_{\bar{U}}$ zur Bewertung der Laborergebnisse werden Effekte der Matrix der Proben nur "statistisch", d.h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Bei jeder Probe liegt aber ein konkreter Matrixeffekt vor, der – auch abhängig von der im einzelnen Labor verwendeten Kalibrierung – im Einzelfall zu einem erheblichen systematischen Unterschied der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Ergebnissen der herkömmlichen Analytik führen kann. Für die Gesamtheit bzw. den "Durchschnitt" und geprägt von der jeweils am häufigsten eingesetzten Parameterkalibrierung gibt ein Vergleich der Mediane der FTIR-Ergebnisse und der herkömmlichen Ergebnisse einen Hinweis auf einen möglichen besonderen Matrixeffekt bei dem jeweils betrachteten Prüfgut, hier FT16P01.

Tabelle 17: Vergleich herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse der Probe FT16P01

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $s_{\bar{U}}$	$Z_{\bar{U}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99930	0,99920	0,000100	0,000190	0,53
Vorhandener Alkohol [g/L]	93,900	93,900	0,000	0,886	0,00
Gesamtextrakt [g/L]	39,300	38,700	0,600	0,594	1,01
Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') [g/L]	14,880	14,395	0,485	0,584	0,83
Vergärbare Zucker (reduktometr.) [g/L]	14,880	15,200	-0,320	0,584	-0,55
Vergärbare Zucker (Summe) [g/L]	14,400	14,395	0,005	0,584	0,01
Gesamtsäure [g/L]	5,232	5,255	-0,022	0,145	-0,16
Glucose [g/L]	6,700	6,600	0,100	0,408	0,25
Fructose [g/L]	7,700	7,700	0,000	0,330	0,00
Glycerin [g/L]	7,310	7,400	-0,090	0,348	-0,26
pH-Wert	3,590	3,590	0,000	0,049	0,00
Weinsäure [g/L]	1,960	2,060	-0,100	0,227	-0,44
Flüchtige Säure [g/L]	0,530	0,520	0,010	0,089	0,11
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	0,500	0,605	-0,105	0,218	-0,48
Gesamte Milchsäure [g/L]	2,06	2,280	-0,220	0,209	-1,05
Freie Schweflige Säure [mg/L]	53,50	53,50	0,00	4,70	0,00
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	144,00	147,50	-3,50	5,36	-0,65

Hierzu sind in Tabelle 17 die Abweichung des Median der FTIR-Ergebnisse vom Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden in der für den Parameter üblichen Einheit sowie die Z-Score zusammengestellt, die nach Division der Differenz durch die Matrixeffekte berücksichti-

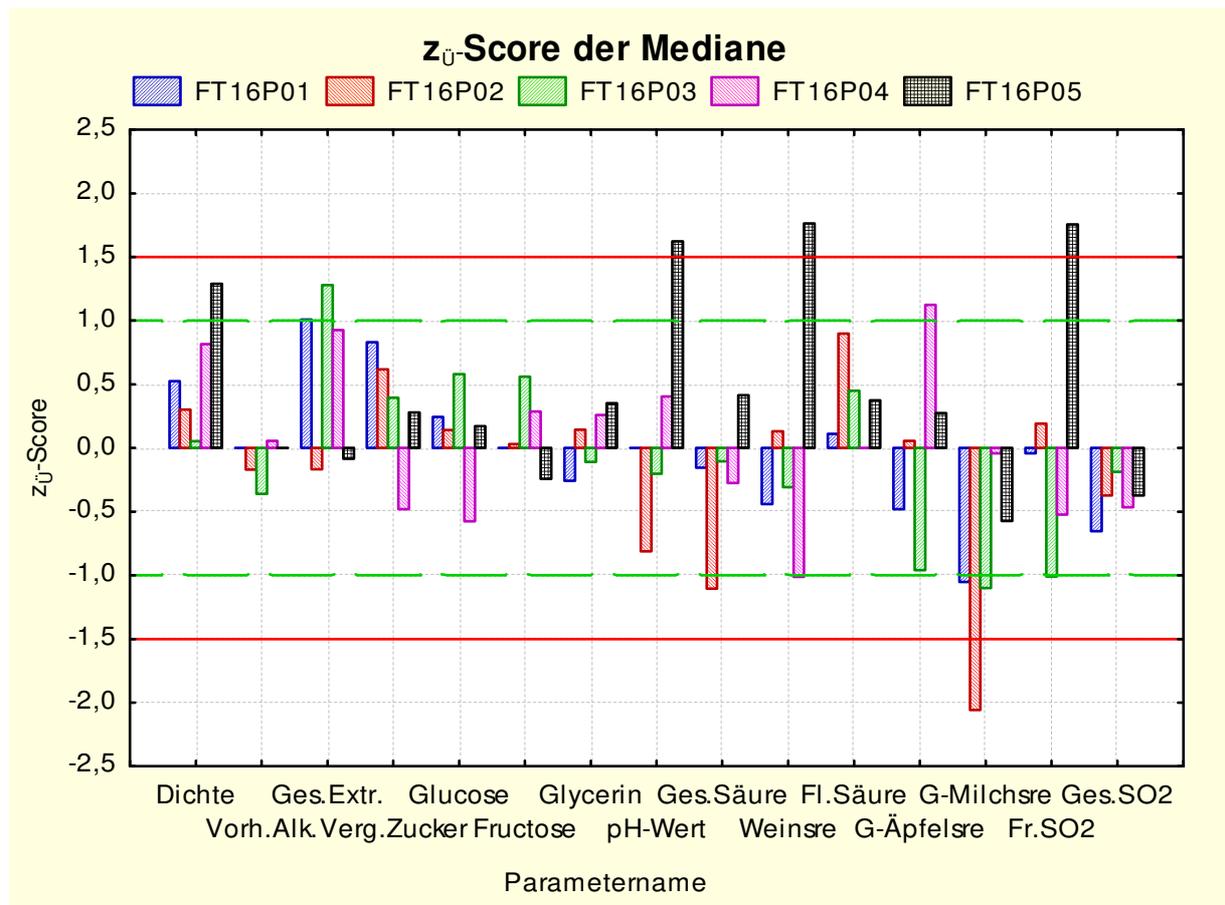
gende Zielstandardabweichung ($s_{\bar{y}}$) erhalten werden. Bei dem Parameter Gesamtextrakt wurde hier nicht die strengere Übereinstimmungsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens sondern wie bei der Bewertung der Laborergebnisse die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet.

Bei dem vorliegenden Prüfgut FT16P01 stimmen die mittleren Ergebnisse mit den Labor-Kalibrierungen mit denen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren gut überein, d.h. der absolute Betrag des Z-Score der Differenz der Mediane liegt deutlich unter eins. Derartige Differenzen werden auch zwischen den Ergebnissen verschiedener herkömmlicher Verfahren beobachtet. Sie sind nicht signifikant bzw. für die praktische Nutzung der Untersuchungsergebnisse nicht relevant. Nur für den Parameter Milchsäure ergibt sich ein $Z_{\bar{y}}$ -Score, der geringfügig über eins liegt. Die **$Z_{\bar{y}}$ -Score** der FTIR-Laborergebnisse sind daher **gültig** und sehr gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen geeignet, zumal die Unsicherheit der Bezugswerte in Relation zur Zielstandardabweichung $s_{\bar{y}}$ stets eine ausreichende Zuverlässigkeit ergibt.

5.2 Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter

Einen – an dieser Stelle vorausschauenden – und zugleich zusammenfassenden Überblick über die Eignung der FTIR-Untersuchungsergebnisse zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen gibt auf der Grundlage von Gegenüberstellungen aller herkömmlichen und FTIR-Untersuchungsergebnisse analog zur Tabelle 17 für alle Prüfgüter die nachstehende Abbildung. Sie zeigt für die Gesamtheit der eingesetzten Kalibrierungen die $z_{\bar{y}}$ -Score der Mediane der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Medianen der herkömmlichen Ergebnisse und gibt eine Orientierung über das Ausmaß der (mittleren) Matrixeffekte für jeden Parameter bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfmaterialien. Die kritischen Grenzen für die $Z_{\bar{y}}$ -Score sind in der Graphik durch grüne bzw. rote Linien markiert. Liegt der absolute Betrag der dargestellten $Z_{\bar{y}}$ -Score über 1, ist ein erhöhter Anteil von FTIR-Untersuchungsergebnissen mit unbefriedigendem, d.h. über dem Absolutbetrag von 2 (d.h. mit über + 2 bzw. unter -2) liegenden Z-Score zu erwarten. Wenn der $Z_{\bar{y}}$ -Score des Median über 1,5 liegt, kann der unbefriedigende Z-Score eines einzelnen Laborergebnisses nicht ohne kritische, alle Umstände umfassende Betrachtung als zutreffende Beschreibung der Laborleistung bewertet werden.

Eine globale Betrachtung der Graphik zeigt, dass für die Mehrzahl der Parameter/Prüfgut-Kombinationen vernachlässigbare Matrixeffekte vorliegen. Die besten Übereinstimmungen ergeben sich bei zusammenfassender Betrachtung der Ergebnisse aller fünf Prüfgüter für den Parameter Vorhandener Alkohol und auch bei den Parametern Vergärbare Zucker, Glucose, Fructose und Gesamte Schweflige Säure zeigen sich keine Hinweise auf wesentliche systematische Unterschiede zwischen den mit herkömmlichen Methoden und den mit der Fourier-Transform-Spektroskopie erhaltenen Ergebnissen. Damit charakterisieren die bei diesen Proben und Parametern erhaltenen Z-Score unmittelbar und aussagekräftig die Leistungsfähigkeit der eigenen FTIR-Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Erhöhte Z-Score-Beträge der eigenen Messergebnisse bei diesen Kombinationen weisen daher eindeutig auf Schwächen der eigenen Parameterkalibrierung oder des Gerätezustandes hin.



Dahingegen zeigen die in allen Fällen negativen und bei den drei Prüfgütern, die eine malolaktische Vergärung erfahren haben, im Betrag stets unter minus Eins liegenden Z_Ü-Score der Mediane für den Parameter **Gesamte Milchsäure** an, dass die das Gesamtergebnis prägenden Parameterkalibrierungen gegenüber den Ergebnissen herkömmlicher Analytik zu niedrige Werte liefern. Eine gleichlautende Beobachtung wurde auch im Vorjahr bei den Prüfgütern (Rotweinen) mit malolaktischer Gärung gemacht. Dennoch bedürfte es einer größeren Anzahl an so beschaffenen Prüfgütern, um zu entscheiden, ob es sich hier um eine generelle Schwäche der eingesetzten Kalibrierungen bei vorliegender malolaktischer Gärung handelt bzw. ob diese systematischen Abweichungen bei speziell für Weine mit malolaktischer Gärung entwickelten Kalibrierungen nicht auftreten. Deutlich negative Z-Score bei diesem Parameter weisen also nicht sicher auf Mängel des Gerätes oder der Arbeitsweise hin.

Bei den bisher nicht angesprochenen Parametern wird zumindest in einer Parameter/Prüfgut-Kombination der kritische absolute Wert Eins erreicht oder sogar der Grenzwert von 1,5 überschritten, bei dem ein erhöhter Anteil nicht aussagekräftiger erhöhter absoluter Z-Score-Beträge der Laborergebnisse zu erwarten ist. Daher sollte die Auswertung der eigenen Laborergebnismittelungen stets auch unter Berücksichtigung dieser Beobachtungen erfolgen, obwohl auf das Vorliegen dieser Situation in den Laborergebnismittelungen selbst nicht hingewiesen wird.

Eine auffällige Häufung erhöhter Beträge der Z_Ü-Score ergab sich bei dem Prüfgut **FT16P05**, einem kalifornischen Zinfandel. Es liegt nahe anzunehmen, dass hierfür Unterschiede in der Matrix ursächlich sind, die durch Unterschiede in der Technik der Weinbereitung begründet

sind. Waren diese im Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen der betroffenen Parameter nicht ausreichend vertreten, so werden sie durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen.

6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern

6.1 Berechnete Parameter

Bei dem Prüfgut Rotwein (FT16P01) wurden von allen Laboratorien die Angaben zu den berechneten Parametern gefordert. Diese Angaben erfolgten vollständig. Die mitgeteilten Daten wurden bei von der Landwirtschaftskammer zugelassene Laboratorien rechnerisch nachgeprüft. Abweichungen, die über eine Rundungstoleranz hinausgehen, wurden in keinem Fall festgestellt. Damit zeigen die berechneten Daten der Erfahrung entsprechend insgesamt eine gute Qualität. Grundsätzlich erscheint eine eigene Bewertung der berechneten Parameter mittels Z-Score nicht erforderlich, da dieser erfahrungsgemäß durch systematische Abweichungen bei den Ausgangsgrößen geprägt wird. Aus den bereits im Abschnitt 2.4.3.2 näher dargelegten Gründen wurde für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt bei dem Prüfgut FT16P01 dennoch eine solche Bewertung durchgeführt.

6.2 Darstellung der analytischen Ergebnisse

Die analytischen Ergebnisse werden je Prüfgut und Parameter in der Regel in vier Tabellen und drei Graphiken dargestellt. Die erste und die zweite Tabelle 'Laborergebnisse' enthalten anonymisiert und getrennt für die Ergebnisse der Untersuchung mit herkömmlichen Methoden sowie für die FTIR-Ergebnisse alle Angaben, die einzelne Laboratorien betreffen. Es werden nur Zeilen aufgenommen, für die Ergebnisse vorliegen. In der Tabelle 'Angaben zu den Analyseverfahren' werden die Kodierungen der Analyseverfahren durch eine Kurzbeschreibung erläutert, die Häufigkeit ihrer Verwendung sowie der robuste Mittelwert und die robuste Standardabweichung der Laborergebnisse zusammengefasst. Schließlich werden in der Tabelle 'Deskriptive Ergebnisse' die beschreibenden statistischen Werte angegeben, die aus allen einbezogenen, mit herkömmlichen Methoden erhaltenen Laborwerten (Spalte: alle Daten) bzw. den nach Ausschluss stark abweichender Ergebnisse verbleibenden Daten (Spalte: ber. Daten) berechnet wurden. Sie beschreiben die Grundlage der Bewertung der Laborleistungen.

6.2.1 Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse

- Spalte 1: Auswerte-Nummer des Laboratoriums
- Spalte 2: Kennziffer bzw. Kurzbezeichnung der angewandten Analysenmethode
- Spalte 3: Ergebniswert des Laboratoriums
- Spalte 4: Abweichung des Ergebniswertes vom Median
- Spalte 5: Z-Score des Laboratoriums nach Horwitz (falls berechenbar)
- Spalte 6: Z-Score des Laboratoriums nach experimentellen Daten (falls verfügbar)
- Spalte 7: Hinweise, insbesondere Markierung extrem abweichender Daten mittels „(*)“ oder "(**)"

6.2.2 Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren

Spalte 1:	Kodierung der Analyseverfahren in der Tabelle der Laborergebnisse
Spalte 2:	Kurzbeschreibung der Analyseverfahren
Spalte 3:	Häufigkeit des Einsatzes der Analyseverfahren
Spalte 4:	Robuster Mittelwert der mit der Analyseverfahren erstellten Laborergebnisse
Spalte 5:	Robuste Standardabweichung der mit der Analyseverfahren erstellten Laborergebnisse

6.2.3 Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse

Titelzeile:	Ergebnisse für [Bezeichnung des Analyseparameters]; alle Daten; ber. Daten
Zeile 1	Anzahl der Laboratorien, die diesen Parameter bearbeitet haben
Zeile 2:	Minimum: kleinster mitgeteilter, einbezogener Analysewert
Zeile 3:	Mittelwert aus allen einbezogenen Analysewerten
Zeile 4:	Median aller einbezogenen Analysewerte
Zeile 5:	Maximum: größter mitgeteilter, einbezogener Analysewert
Zeile 6:	Laborstandardabweichung: Standardabweichung aus allen gültigen Ergebniswerten (s_L)
Zeile 7:	Standardfehler des Mittelwertes aus den einbezogenen Analysewerten (u_M)
Zeile 8:	Zielstandardabweichung: berechnet nach Horwitz (s_H)
Zeile 9:	Zielstandardabweichung: experimentelle Vergleichsstandardabweichung ($s_{exp\ herk.}$)
Zeile 10:	Zielstandardabweichung: Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)
Zeile 11:	Horvat-Wert (s_L/s_H): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 8
Zeile 12:	Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 9
Zeile 13:	Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 10
Zeile 14:	Quotient (u_M/s_H): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 8
Zeile 15:	Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 9
Zeile 16:	Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 10
Allgemeiner Hinweis:	Bei dem Parameter „Vergärbare Zucker“ wird grundsätzlich der in der Zeile „nach Inversion“ des amtlichen Formulars angegebene Wert ausgewertet, obwohl keine Saccharose enthalten war. War dieser Wert nicht angegeben, so wurde die Angabe in der Zeile „vor Inversion“ ausgewertet.

6.2.4 Aufbau der Graphiken

Zur Veranschaulichung und zum optischen Vergleich werden für jeden Parameter die Ergebnisse als Abweichungen vom Median der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden graphisch dargestellt. Die Graphiken geben einen Eindruck über die Verteilung der Analysendaten. Die Darstellung wurde so gewählt, dass die Graphiken möglichst übersichtlich sind. Hierzu wurde die Skala in der Regel so gewählt, dass die Abweichungsbeträge in der Regel vollständig dargestellt sind. Es wird in begrenztem Maß Kauf genommen, dass bei erheblichen Abweichungen einzelner Laboratorien geringe Abweichungen vom Median nicht bestmöglich dargestellt werden. Wie in den Ergebnistabellen werden nur Auswertenummern berücksichtigt, zu denen Ergebnisse vorliegen.

Die erste und die zweite Graphik stellen die Abweichungen der Laborergebnisse vom Median der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden in der Reihenfolge der Auswertenummern dar.

Wegen der in der Regel unterschiedlichen Zielstandardabweichungen werden die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden und der FTIR-Untersuchung in der Regel getrennt dargestellt. Wird nur ein Teil der mit herkömmlichen Methoden erhaltenen Ergebnisse bei der Ermittlung der Bewertungsgrößen berücksichtigt oder erscheint es zur Demonstration methodenbedingter Unterschiede der Laborergebnisse sinnvoll, so werden diese farblich nach Methoden bzw. Methodengruppen differenziert dargestellt. Der „0-Wert“ entspricht exakt dem Median. Die Säulendarstellungen können unmittelbar mit den gewohnten analytischen Maßstäben verglichen werden. Die bei Z-Werten von +2 und -2 eingetragenen grünen Linien kennzeichnen das Verlassen des Normalbereiches und die bei Z-Werten von +3 und -3 eingetragenen roten Linien das Verlassen des Bereiches der als richtig bzw. noch richtig zu bewertenden Ergebnisse. So ist auf einen Blick erkennbar, ob ein Laborergebnis außerhalb der Schranken liegt. Der genaue Wert des Z-Score kann der Laborergebnistabelle entnommen werden. Zur Verbesserung der Übersichtlichkeit wird zur Grundlinie der Graphiken nur jede zweite bzw. dritte Auswertenummer angegeben, wenn mehr als 50 Ergebnisse dargestellt oder die Auswertenummern dreistellig sind.

Bei der dritten Graphik werden die aufsteigend sortierten Abweichungen der Laborergebnisse vom Median der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren für alle Verfahren – zumindest nach den Verfahrensgruppen "herkömmlich" und "FTIR" farblich differenziert – dargestellt. Diese Graphiken veranschaulichen die Verteilung der Analysenergebnisse, geben Hinweise auf systematische Unterschiede zwischen den Ergebnissen verschiedener Analysemethoden und ermöglichen den unmittelbaren Vergleich der Abweichungsbeträge zwischen den farblich differenzierten Methoden bzw. Methodengruppen. Da die Bewertungen der Abweichungsbeträge in der Regel durch die für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse unterschiedlichen Zielstandardabweichungen ungleich und damit die Z-Score methodenabhängig sind, werden in diesen Fällen in die Graphik keine Z-Score-Grenzen eingezeichnet. Wird für alle dargestellten Ergebnisse eine Zielstandardabweichung verwendet, so werden die Z-Score-Grenzen eingezeichnet.

6.3 Relative Dichte 20 °C/20 °C

6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99924	0,000040	0,30	
04	LwK 8.4	0,99923	0,000030	0,23	
05	LwK 8.4	0,99917	-0,000030	-0,23	
06	LwK 8.4	0,99935	0,000150	1,14	
07	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
08	LwK 8.4	0,99917	-0,000030	-0,23	
12	LwK 8.4	0,99933	0,000125	0,95	
13	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
14	LwK 8.4	0,99916	-0,000040	-0,30	
15	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
16	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
18	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
20	LwK 8.4	0,99935	0,000150	1,14	
21	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
22	LwK 8.4	0,99925	0,000050	0,38	
23	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
24	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
25	LwK 8.4	0,99928	0,000080	0,61	
26	LwK 8.4	0,99917	-0,000030	-0,23	
27	LwK 8.4	0,99925	0,000050	0,38	
28	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
29	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
30	LwK 8.1	0,99920	0,000000	0,00	
31	LwK 8.2	0,99940	0,000200	1,52	
32	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
33	LwK 8.4	0,99936	0,000160	1,21	
34	LwK 8.1	0,99910	-0,000100	-0,76	
35	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
36	LwK 8.4	0,99918	-0,000020	-0,15	
38	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
39	LwK 8.3	0,99900	-0,000200	-1,52	
40	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
41	LwK 8.4	0,99918	-0,000020	-0,15	
42	LwK 8.4	0,99916	-0,000040	-0,30	
43	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
44	LwK 8.4	0,99919	-0,000010	-0,08	
45	LwK 8.4	0,99917	-0,000030	-0,23	
46	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
47	LwK 8.4	0,99928	0,000080	0,61	
48	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
49	LwK 8.4	0,99916	-0,000040	-0,30	
50	LwK 8.4	0,99918	-0,000020	-0,15	
51	LwK 8.4	0,99923	0,000030	0,23	
52	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
53	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
54	LwK 8.4	0,99919	-0,000011	-0,08	
55	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
56	LwK 8.4	0,99960	0,000400	3,03	
57	LwK 8.4	0,99923	0,000030	0,23	
58	LwK 8.4	0,99915	-0,000050	-0,38	
59	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
60	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
61	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
62	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
63	LwK 8.4	0,99940	0,000200	1,52	
64	LwK 8.3	0,99920	0,000000	0,00	
66	LwK 8.4	0,99940	0,000200	1,52	
67	LwK 8.4	0,99900	-0,000200	-1,52	
70	LwK 8.4	0,99919	-0,000010	-0,08	
71	LwK 8.1	0,99920	0,000000	0,00	
72	LwK 8.4	0,99927	0,000070	0,53	
78	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
79	LwK 8.4	0,99958	0,000380	2,88	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
80	LwK 8.4	0,99730	-0,001900	-14,39	(**)
90	LwK 8.1	0,99907	-0,000130	-0,98	
95	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
98	LwK 8.1	0,99918	-0,000020	-0,15	
100	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
111	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
112	LwK 8.1	0,99930	0,000100	0,76	
113	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
114	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
115	LwK 8.4	0,99900	-0,000200	-1,52	
116	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
117	LwK 8.1	0,99920	0,000000	0,00	
118	LwK 8.4	0,99927	0,000070	0,53	
119	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
120	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
121	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
122	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
123	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
124	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
125	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
126	LwK 8.1	0,99940	0,000200	1,52	
127	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
128	LwK 8.4	0,99910	-0,000100	-0,76	
129	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
130	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
131	LwK 8.4	0,99930	0,000100	0,76	
132	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
133	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
134	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
135	LwK 8.1	0,99927	0,000070	0,53	
136	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
137	LwK 8.1	0,99920	0,000000	0,00	
138	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
139	LwK 8.4	0,99919	-0,000010	-0,08	
140	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
141	LwK 8.1	0,99950	0,000300	2,27	
142	LwK 8.1	0,99920	0,000000	0,00	
143	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
144	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
145	LwK 8.4	0,99924	0,000040	0,30	
146	LwK 8.1	1,00010	0,000900	6,82	(**)
147	LwK 8.1	0,99910	-0,000100	-0,76	
148	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
149	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
150	LwK 8.4	0,99925	0,000050	0,38	
151	LwK 8.2	0,99920	0,000000	0,00	
152	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
153	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	
154	LwK 8.4	0,99920	0,000000	0,00	

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

6.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
202	FTIR	0,99921	0,000010	0,05	
203	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
204	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
205	FTIR	0,99900	-0,000200	-1,05	
206	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
207	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
208	FTIR	0,99890	-0,000300	-1,58	
209	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
210	FTIR	0,99916	-0,000040	-0,21	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
211	FTIR	0,99970	0,000500	2,63	
212	FTIR	0,99885	-0,000350	-1,84	
213	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
215	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
216	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
217	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
218	FTIR	0,99910	-0,000100	-0,53	
219	FTIR	0,99918	-0,000020	-0,11	
220	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
221	FTIR	0,99890	-0,000300	-1,58	
222	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
223	FTIR	0,99925	0,000050	0,26	
224	FTIR	0,99937	0,000170	0,89	
225	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
226	FTIR	0,99400	-0,005200	-27,37	(**)
227	FTIR	0,99922	0,000020	0,11	
228	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
229	FTIR	0,99943	0,000230	1,21	
230	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
231	FTIR	0,99964	0,000440	2,32	
232	FTIR	0,99900	-0,000200	-1,05	
234	FTIR	0,99960	0,000400	2,11	
236	FTIR	0,99915	-0,000050	-0,26	
238	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
239	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
242	FTIR	0,99913	-0,000070	-0,37	
243	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
244	FTIR	0,99917	-0,000030	-0,16	
245	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
246	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
247	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
248	FTIR	0,99915	-0,000050	-0,26	
249	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
251	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
252	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
253	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
254	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
256	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
257	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
258	FTIR	0,99893	-0,000270	-1,42	
259	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
260	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
261	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
262	FTIR	0,99955	0,000350	1,84	
263	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
264	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
265	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
266	FTIR	0,99970	0,000500	2,63	
267	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
268	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
269	FTIR	0,99980	0,000600	3,16	
270	FTIR	0,99934	0,000140	0,74	
271	FTIR	0,99935	0,000150	0,79	
272	FTIR	0,99907	-0,000130	-0,68	
273	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
274	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
275	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
276	FTIR	0,99936	0,000160	0,84	
277	FTIR	0,99920	0,000000	0,00	
278	FTIR	1,00034	0,001144	6,02	(**)
279	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
281	FTIR	0,99990	0,000700	3,68	
282	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
283	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
284	FTIR	0,99974	0,000545	2,87	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
285	FTIR	0,99560	-0,003600	-18,95	(**)
286	FTIR	0,99940	0,000200	1,05	
320	FTIR	0,99980	0,000600	3,16	
321	FTIR	0,99910	-0,000100	-0,53	
339	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	
346	FTIR	0,99970	0,000500	2,63	
351	FTIR	0,99930	0,000100	0,53	
366	FTIR	0,99960	0,000400	2,11	
371	FTIR	0,99950	0,000300	1,58	

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

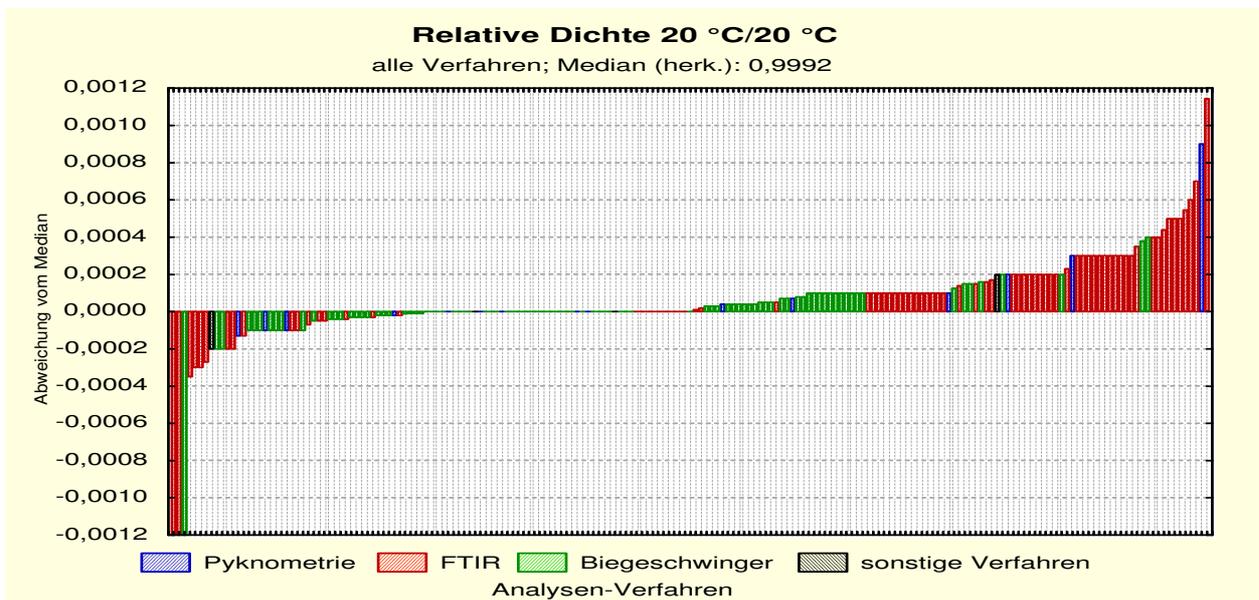
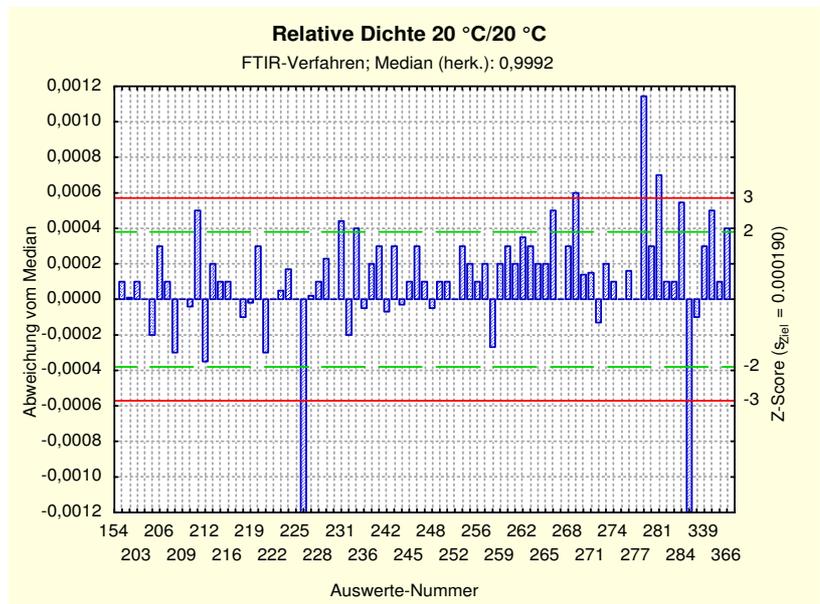
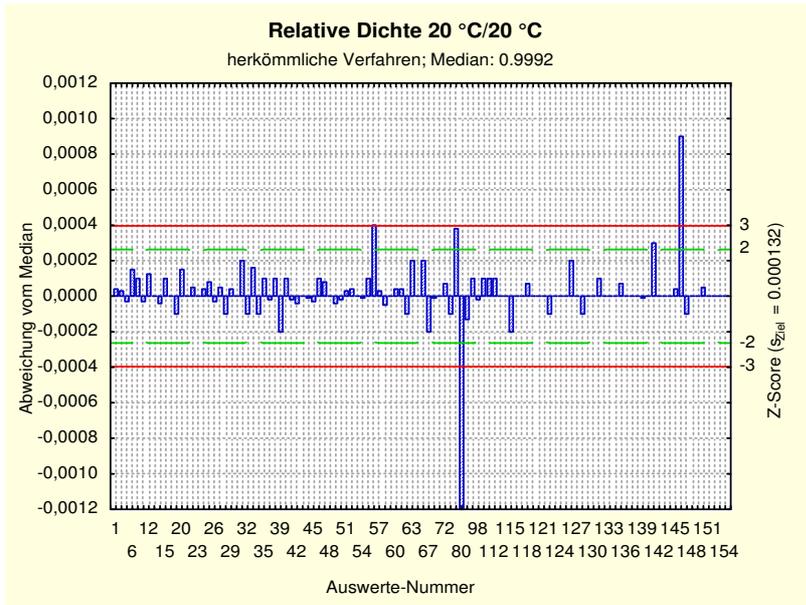
6.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	112	110
Minimalwert	0,99730	0,99900
Mittelwert	0,999214	0,999223
Median	0,999200	0,999200
Maximalwert	1,00010	0,99960
Standardabweichung (s _L)	0,000222	0,000095
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,000021	0,000009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s _L /s _H)		
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,68	0,72
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,17	0,50
Quotient (u _M /s _H)		
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,16	0,07
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,11	0,05

Berechnungen ohne Auswertenummer 36

6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	15	0,99923	0,000127
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	2	0,99930	0,000160
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	2	0,99910	0,000160
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	93	0,99922	0,000063
	herkömmliche Verfahren	112	0,99922	0,000068
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	0,99932	0,000204



6.4 Gesamtalkohol [g/L]

6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,13	0,230	0,08	0,22	
04	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,31	-0,588	-0,21	-0,55	
06	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,20	-0,700	-0,25	-0,66	
07	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,91	-0,990	-0,35	-0,93	
12	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,04	0,140	0,05	0,13	
13	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,60	0,700	0,25	0,66	
14	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,60	-1,300	-0,46	-1,22	
15	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
16	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
18	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,40	0,500	0,18	0,47	
20	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,10	0,200	0,07	0,19	
21	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
22	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,42	0,520	0,18	0,49	
23	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,36	-0,540	-0,19	-0,51	
24	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,20	0,300	0,11	0,28	
25	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
26	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	103,10	2,200	0,77	2,07	
27	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,10	-0,800	-0,28	-0,75	
28	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,00	0,100	0,04	0,09	
30	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,80	0,900	0,32	0,85	
31	keine Angabe	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
32	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,400	0,14	0,38	
33	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,70	-1,200	-0,42	-1,13	
34	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,44	-0,460	-0,16	-0,43	
35	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,90	0,000	0,00	0,00	
36	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	99,70	-1,200	-0,42	-1,13	
39	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,70	-0,200	-0,07	-0,19	
40	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,500	0,18	0,47	
41	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,40	-0,500	-0,18	-0,47	
42	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,10	-0,800	-0,28	-0,75	
43	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,22	-0,680	-0,24	-0,64	
44	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,70	-0,200	-0,07	-0,19	
45	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	99,80	-1,100	-0,39	-1,03	
46	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,70	-0,200	-0,07	-0,19	
47	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,60	-1,300	-0,46	-1,22	
48	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,80	0,900	0,32	0,85	
49	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
50	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,50	-0,400	-0,14	-0,38	
51	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,90	0,000	0,00	0,00	
52	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,500	0,18	0,47	
53	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,90	0,000	0,00	0,00	
54	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,50	0,600	0,21	0,56	
55	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	98,80	-2,100	-0,74	-1,98	
57	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
58	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,14	0,240	0,08	0,23	
59	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,60	0,700	0,25	0,66	
60	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,10	0,200	0,07	0,19	
61	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
62	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,45	0,550	0,19	0,52	
63	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	102,80	1,900	0,67	1,79	
64	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
70	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	99,80	-1,100	-0,39	-1,03	
71	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,23	-0,669	-0,23	-0,63	
79	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,83	-1,070	-0,38	-1,01	
95	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,50	-0,400	-0,14	-0,38	
100	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
111	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,00	0,100	0,04	0,09	
112	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,400	0,14	0,38	
113	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,18	0,281	0,10	0,26	
114	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,40	-0,500	-0,18	-0,47	
115	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
116	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,50	-0,400	-0,14	-0,38	
117	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	102,00	1,100	0,39	1,03	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
118	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,90	0,000	0,00	0,00	
119	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	102,10	1,200	0,42	1,13	
120	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
121	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
122	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
123	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,70	0,800	0,28	0,75	
124	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,50	0,600	0,21	0,56	
125	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,79	-0,114	-0,04	-0,11	
126	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,30	-0,600	-0,21	-0,56	
127	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,20	-0,700	-0,25	-0,66	
128	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
129	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,80	0,900	0,32	0,85	
130	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	102,30	1,400	0,49	1,32	
131	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,90	1,000	0,35	0,94	
132	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
133	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,80	-1,100	-0,39	-1,03	
134	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,70	0,800	0,28	0,75	
135	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,500	0,18	0,47	
136	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,60	0,700	0,25	0,66	
137	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
138	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,500	0,18	0,47	
139	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
140	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,60	0,700	0,25	0,66	
141	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,400	0,14	0,38	
142	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,07	0,170	0,06	0,16	
143	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	0,200	0,07	0,19	
144	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
145	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,03	0,130	0,05	0,12	
147	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,53	-0,370	-0,13	-0,35	
148	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,20	0,300	0,11	0,28	
149	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,30	-0,600	-0,21	-0,56	
150	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	99,55	-1,350	-0,47	-1,27	
151	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,70	-0,200	-0,07	-0,19	
152	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
153	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	102,40	1,500	0,53	1,41	
154	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	100,90	0,000	0,00	0,00	

Messwerte in roter Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

6.4.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,16	0,264	0,09	0,25	
204	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	99,83	-1,070	-0,38	-1,01	
206	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,60	1,700	0,60	1,60	
209	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,23	0,330	0,12	0,31	
210	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,86	0,960	0,34	0,90	
217	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	107,50	6,600	2,32	6,21	(**)
218	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	104,95	4,053	1,42	3,81	
219	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,54	-0,360	-0,13	-0,34	
224	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,73	0,827	0,29	0,78	
226	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,20	1,300	0,46	1,22	
228	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	99,53	-1,370	-0,48	-1,29	
230	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,99	0,085	0,03	0,08	
232	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,80	-0,100	-0,04	-0,09	
234	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	99,73	-1,170	-0,41	-1,10	
238	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,90	0,000	0,00	0,00	
244	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,00	0,100	0,04	0,09	
245	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,20	0,300	0,11	0,28	
248	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,23	-0,670	-0,24	-0,63	
253	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,00	-0,900	-0,32	-0,85	
254	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,20	0,300	0,11	0,28	
256	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	103,12	2,220	0,78	2,09	
260	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,60	-0,300	-0,11	-0,28	
261	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,10	0,200	0,07	0,19	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
264	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,90	0,000	0,00	0,00	
269	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,16	0,260	0,09	0,24	
270	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,18	-0,720	-0,25	-0,68	
275	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,30	-0,600	-0,21	-0,56	
276	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	99,89	-1,014	-0,36	-0,95	
283	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,46	-0,440	-0,15	-0,41	
320	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,8	1,900	0,67	1,79	

6.4.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

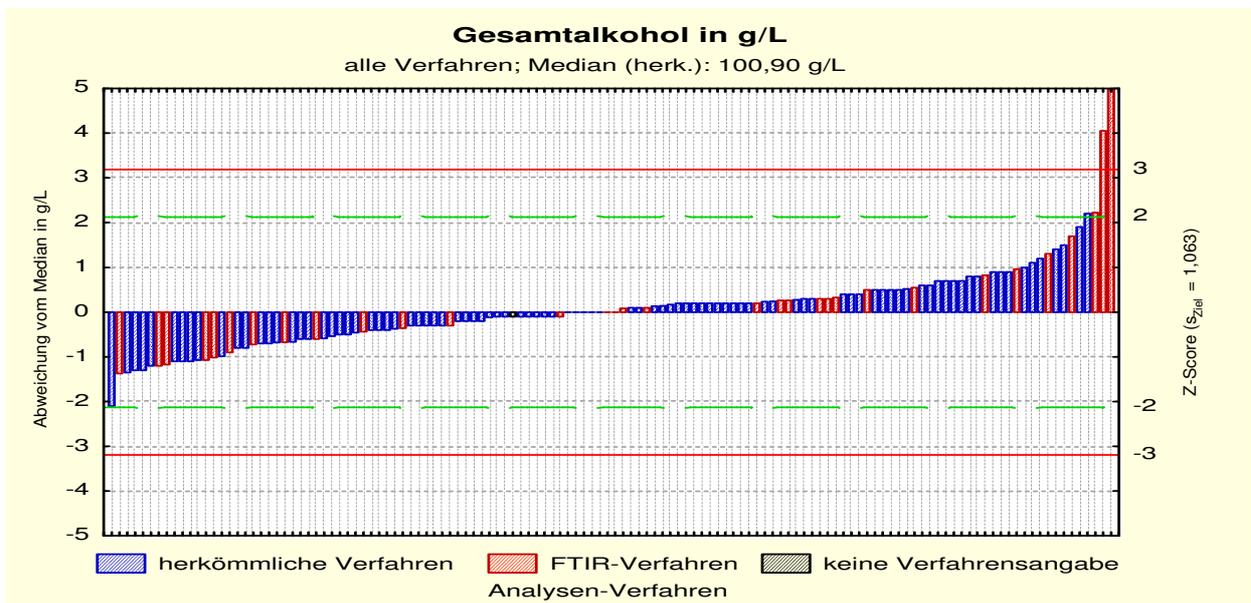
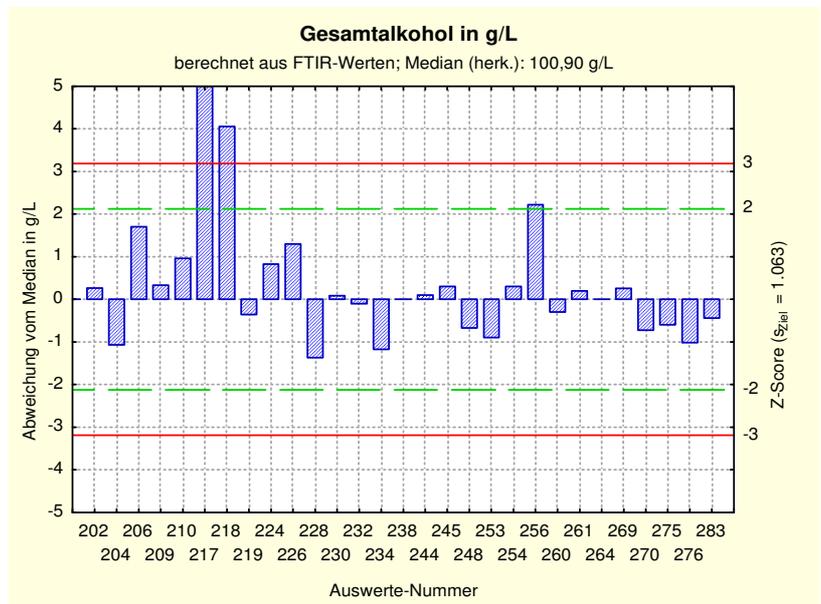
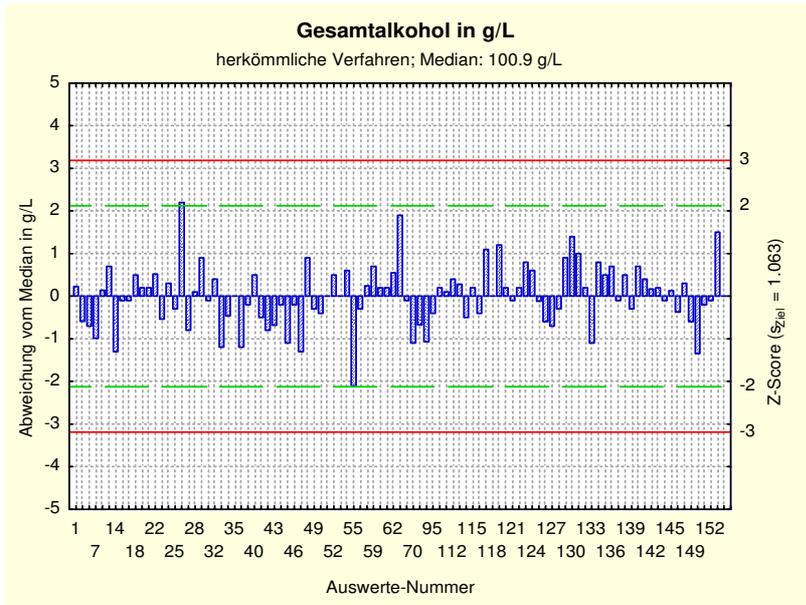
Ergebnisse für Gesamten Alkohol in g/L	alle Daten
Gültige Werte	95
Minimalwert	98,80
Mittelwert	100,909
Median	100,900
Maximalwert	103,10
Standardabweichung (s_L)	0,719
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,074
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,850
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,063
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,25
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,68
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,07
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	

6.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (Zucker enz./HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose, enzymat. oder HPLC] * 0,47)+Vorh. Alkohol [g/L]	66	100,85	0,634
LwK 1.1 (Zucker reduktometrisch)	((Gesamtzucker [reduktometrisch] - 1) * 0,47) + Vorh. Alkohol [g/L]	29	101,04	0,743
	herkömmliche Verfahren	95	100,90	0,665
LwK 1.1 (FTIR Alkohol + Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR-Glucose + FTIR-Fructose]*0,47)+Vorh. Alkohol [FTIR] [g/L]	32	100,97	0,976
keine Angabe		1	100,80	

Bemerkung:

Die statistische Auswertung der Ergebnisse für Gesamtalkohol und deren Bewertung durch Z-Score erfolgt für die Probe FT16P01, da einige Teilnehmer (Auswertenummern unter 200) auf der Basis der FTIR-Messergebnisse berechnete Werte entgegen den Anweisungen zur Ringversuchsdurchführung in der Ergebnismappe auf dem Registerblatt für herkömmliche Ergebnisse eingetragen haben. Weitere Teilnehmer (Auswertenummern über 200) haben diese Eintragungen korrekt auf dem Registerblatt für FTIR-Ergebnisse mitgeteilt, um der Anweisung zu genügen, dass für diese Probe die berechneten Werte im Rahmen des Umfangs der amtlichen Qualitätsweinanalyse angefordert waren. Die Bewertung der FTIR-Ergebnisse erfolgte mit der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden, da kein Wert für eine Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung bekannt ist.



6.5 Vorhandener Alkohol [g/L]

6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	94,05	0,150	0,06	0,28	
04	LwK 2.9	95,29	1,390	0,52	2,60	
05	LwK 2.9	93,52	-0,375	-0,14	-0,70	
06	LwK 2.4	93,62	-0,280	-0,10	-0,52	
07	LwK 2.4	93,25	-0,650	-0,24	-1,21	
08	LwK 2.4	93,95	0,050	0,02	0,09	
12	LwK 2.1	94,27	0,370	0,14	0,69	
13	LwK 2.1	94,70	0,800	0,30	1,50	
14	LwK 2.1	92,70	-1,200	-0,45	-2,24	
15	LwK 2.9	94,00	0,100	0,04	0,19	
16	LwK 2.1	94,10	0,200	0,07	0,37	
18	LwK 2.9	94,00	0,100	0,04	0,19	
19	LwK 2.7	93,54	-0,360	-0,13	-0,67	
20	LwK 2.9	93,90	0,000	0,00	0,00	
21	LwK 2.7	94,03	0,125	0,05	0,23	
22	LwK 2.4	94,67	0,770	0,29	1,44	
23	LwK 2.7	93,56	-0,340	-0,13	-0,64	
24	LwK 2.9	94,50	0,600	0,22	1,12	
25	LwK 2.5	93,60	-0,300	-0,11	-0,56	
26	LwK 2.9	95,40	1,500	0,56	2,80	
27	LwK 2.1	93,18	-0,720	-0,27	-1,35	
28	LwK 2.4	94,10	0,200	0,07	0,37	
29	LwK 2.5	94,30	0,400	0,15	0,75	
30	LwK 2.4	94,70	0,800	0,30	1,50	
31	LwK 2.4	93,80	-0,100	-0,04	-0,19	
32	LwK 2.1	94,50	0,600	0,22	1,12	
33	LwK 2.9	94,50	0,600	0,22	1,12	
34	LwK 2.4	93,95	0,050	0,02	0,09	
35	LwK 2.1	93,80	-0,100	-0,04	-0,19	
36	LwK 2.8	92,70	-1,200	-0,45	-2,24	
39	LwK 2.2	93,60	-0,300	-0,11	-0,56	
40	LwK 2.9	94,60	0,700	0,26	1,31	
41	LwK 2.4	93,90	0,000	0,00	0,00	
42	LwK 2.4	93,45	-0,450	-0,17	-0,84	
43	LwK 2.5	93,63	-0,270	-0,10	-0,50	
44	LwK 2.4	93,90	0,000	0,00	0,00	
45	LwK 2.9	93,95	0,050	0,02	0,09	
46	LwK 2.9	94,10	0,200	0,07	0,37	
47	LwK 2.1	93,30	-0,600	-0,22	-1,12	
48	LwK 2.5	95,20	1,300	0,48	2,43	
49	LwK 2.1	93,90	0,000	0,00	0,00	
50	LwK 2.4	93,80	-0,100	-0,04	-0,19	
51	LwK 2.4	93,90	0,000	0,00	0,00	
52	LwK 2.9	94,70	0,800	0,30	1,50	
53	LwK 2.9	94,00	0,100	0,04	0,19	
54	LwK 2.9	94,84	0,940	0,35	1,76	
55	LwK 2.9	92,10	-1,800	-0,67	-3,36	
57	LwK 2.1	93,41	-0,490	-0,18	-0,92	
58	LwK 2.9	94,52	0,620	0,23	1,16	
59	LwK 2.5	94,70	0,800	0,30	1,50	
60	LwK 2.9	94,20	0,300	0,11	0,56	
61	LwK 2.9	94,73	0,830	0,31	1,55	
62	LwK 2.1	93,30	-0,600	-0,22	-1,12	
63	LwK 2.7	95,90	2,000	0,75	3,74	
64	LwK 2.1	93,50	-0,400	-0,15	-0,75	
66	LwK 2.5	93,00	-0,900	-0,34	-1,68	
70	LwK 2.4	92,80	-1,100	-0,41	-2,06	
71	LwK 2.4	94,00	0,100	0,04	0,19	
72	LwK 2.9	94,26	0,360	0,13	0,67	
75	LwK 2.3	93,50	-0,400	-0,15	-0,75	
78	LwK 2.1	94,16	0,260	0,10	0,49	
79	LwK 2.9	93,50	-0,400	-0,15	-0,75	

Der Messwert in **roter** Schrift wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
90	LwK 2.1	93,60	-0,300	-0,11	-0,56	
92	LwK 2.9	93,50	-0,400	-0,15	-0,75	
93	LwK 2.5	95,30	1,400	0,52	2,62	
94	LwK 2.9	94,50	0,600	0,22	1,12	
95	LwK 2.1	92,91	-0,990	-0,37	-1,85	
97	LwK 2.5	94,10	0,200	0,07	0,37	
98	LwK 2.1	94,90	1,000	0,37	1,87	
99	LwK 2.9	93,70	-0,200	-0,07	-0,37	
100	LwK 2.9	94,40	0,500	0,19	0,93	
103	LwK 2.1	93,00	-0,900	-0,34	-1,68	
104	LwK 2.9	94,32	0,420	0,16	0,79	
107	LwK 2.4	92,80	-1,100	-0,41	-2,06	
111	LwK 2.9	94,20	0,300	0,11	0,56	
112	LwK 2.9	94,20	0,300	0,11	0,56	
113	LwK 2.9	94,31	0,414	0,15	0,77	
114	LwK 2.7	93,40	-0,500	-0,19	-0,93	
115	LwK 2.9	94,50	0,600	0,22	1,12	
116	LwK 2.1	93,20	-0,700	-0,26	-1,31	
117	LwK 2.3	94,50	0,600	0,22	1,12	
118	LwK 2.7	93,93	0,030	0,01	0,06	
119	LwK 2.5	95,20	1,300	0,48	2,43	
120	LwK 2.1	94,40	0,500	0,19	0,93	
121	LwK 2.5	94,00	0,100	0,04	0,19	
122	LwK 2.9	94,30	0,400	0,15	0,75	
123	LwK 2.5	94,50	0,600	0,22	1,12	
124	LwK 2.5	93,90	0,000	0,00	0,00	
125	LwK 2.9	94,00	0,098	0,04	0,18	
126	LwK 2.3	93,40	-0,500	-0,19	-0,93	
127	LwK 2.5	94,70	0,800	0,30	1,50	
128	LwK 2.5	93,60	-0,300	-0,11	-0,56	
129	LwK 2.5	94,35	0,450	0,17	0,84	
130	LwK 2.5	95,40	1,500	0,56	2,80	
131	LwK 2.5	94,30	0,400	0,15	0,75	
132	LwK 2.1	94,40	0,500	0,19	0,93	
133	LwK 2.4	93,10	-0,800	-0,30	-1,50	
134	LwK 2.7	94,80	0,900	0,34	1,68	
135	LwK 2.2	95,40	1,500	0,56	2,80	
136	LwK 2.5	94,80	0,900	0,34	1,68	
137	LwK 2.4	94,10	0,200	0,07	0,37	
138	LwK 2.9	94,60	0,700	0,26	1,31	
139	LwK 2.1	93,90	0,000	0,00	0,00	
140	LwK 2.5	94,50	0,600	0,22	1,12	
141	LwK 2.1	94,00	0,100	0,04	0,19	
142	LwK 2.3	94,00	0,100	0,04	0,19	
143	LwK 2.9	94,40	0,500	0,19	0,93	
144	LwK 2.7	93,90	0,000	0,00	0,00	
145	LwK 2.9	94,50	0,600	0,22	1,12	
146	LwK 2.1	95,00	1,100	0,41	2,06	
147	LwK 2.3	93,10	-0,800	-0,30	-1,50	
148	LwK 2.4	94,60	0,700	0,26	1,31	
149	LwK 2.9	93,80	-0,100	-0,04	-0,19	
150	LwK 2.4	92,50	-1,400	-0,52	-2,62	
151	LwK 2.2	93,90	0,000	0,00	0,00	
152	LwK 2.7	93,90	0,000	0,00	0,00	
153	LwK 2.5	94,90	1,000	0,37	1,87	
154	LwK 2.1	94,40	0,500	0,19	0,93	

6.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	93,36	-0,540	-0,20	-0,61	
202	LwK 2.8	94,34	0,440	0,16	0,50	
203	LwK 2.8	94,00	0,100	0,04	0,11	
204	LwK 2.8	93,10	-0,800	-0,30	-0,90	
205	LwK 2.8	92,81	-1,085	-0,40	-1,23	
206	LwK 2.8	95,00	1,100	0,41	1,24	
207	LwK 2.8	94,90	1,000	0,37	1,13	
208	LwK 2.8	92,70	-1,200	-0,45	-1,35	
209	LwK 2.8	94,77	0,870	0,32	0,98	
210	LwK 2.8	94,94	1,040	0,39	1,17	
211	LwK 2.8	93,60	-0,300	-0,11	-0,34	
212	LwK 2.8	94,18	0,280	0,10	0,32	
213	LwK 2.8	94,50	0,600	0,22	0,68	
215	LwK 2.8	94,20	0,300	0,11	0,34	
216	LwK 2.8	93,90	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 2.8	94,30	0,400	0,15	0,45	
218	LwK 2.8	95,60	1,700	0,63	1,92	
219	LwK 2.8	93,90	0,000	0,00	0,00	
220	LwK 2.8	95,00	1,100	0,41	1,24	
221	LwK 2.8	94,30	0,400	0,15	0,45	
222	LwK 2.8	93,34	-0,560	-0,21	-0,63	
223	LwK 2.8	94,37	0,470	0,18	0,53	
224	LwK 2.8	95,10	1,200	0,45	1,35	
225	LwK 2.8	93,20	-0,700	-0,26	-0,79	
226	LwK 2.8	94,86	0,960	0,36	1,08	
227	LwK 2.8	94,09	0,190	0,07	0,21	
228	LwK 2.8	93,03	-0,870	-0,32	-0,98	
229	LwK 2.8	94,50	0,600	0,22	0,68	
230	LwK 2.8	93,70	-0,200	-0,07	-0,23	
231	LwK 2.8	90,22	-3,680	-1,37	-4,15	
232	LwK 2.8	94,00	0,100	0,04	0,11	
234	LwK 2.8	93,30	-0,600	-0,22	-0,68	
236	LwK 2.8	92,70	-1,200	-0,45	-1,35	
238	LwK 2.8	94,10	0,200	0,07	0,23	
239	LwK 2.8	93,20	-0,700	-0,26	-0,79	
242	LwK 2.8	94,50	0,600	0,22	0,68	
243	LwK 2.8	93,00	-0,900	-0,34	-1,02	
244	LwK 2.8	94,47	0,570	0,21	0,64	
245	LwK 2.8	94,10	0,200	0,07	0,23	
246	LwK 2.8	94,40	0,500	0,19	0,56	
247	LwK 2.8	93,37	-0,530	-0,20	-0,60	
248	LwK 2.8	93,65	-0,250	-0,09	-0,28	
249	LwK 2.8	93,39	-0,510	-0,19	-0,58	
250	LwK 2.8	93,67	-0,230	-0,09	-0,26	
251	LwK 2.8	92,70	-1,200	-0,45	-1,35	
252	LwK 2.8	93,36	-0,540	-0,20	-0,61	
253	LwK 2.8	93,60	-0,300	-0,11	-0,34	
254	LwK 2.8	94,40	0,500	0,19	0,56	
256	LwK 2.8	95,70	1,800	0,67	2,03	
257	LwK 2.8	93,20	-0,700	-0,26	-0,79	
258	LwK 2.8	94,60	0,700	0,26	0,79	
259	LwK 2.8	94,50	0,600	0,22	0,68	
260	LwK 2.8	93,90	0,000	0,00	0,00	
261	LwK 2.8	93,94	0,040	0,01	0,05	
262	LwK 2.8	91,85	-2,050	-0,76	-2,31	
263	LwK 2.8	94,90	1,000	0,37	1,13	
264	LwK 2.8	93,90	0,000	0,00	0,00	
265	LwK 2.8	94,00	0,100	0,04	0,11	
266	LwK 2.8	92,60	-1,300	-0,48	-1,47	
267	LwK 2.8	93,50	-0,400	-0,15	-0,45	
268	LwK 2.8	93,53	-0,370	-0,14	-0,42	
269	LwK 2.8	94,30	0,400	0,15	0,45	
270	LwK 2.8	93,70	-0,200	-0,07	-0,23	
271	LwK 2.8	94,05	0,150	0,06	0,17	

Der Messwert in roter Schrift wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

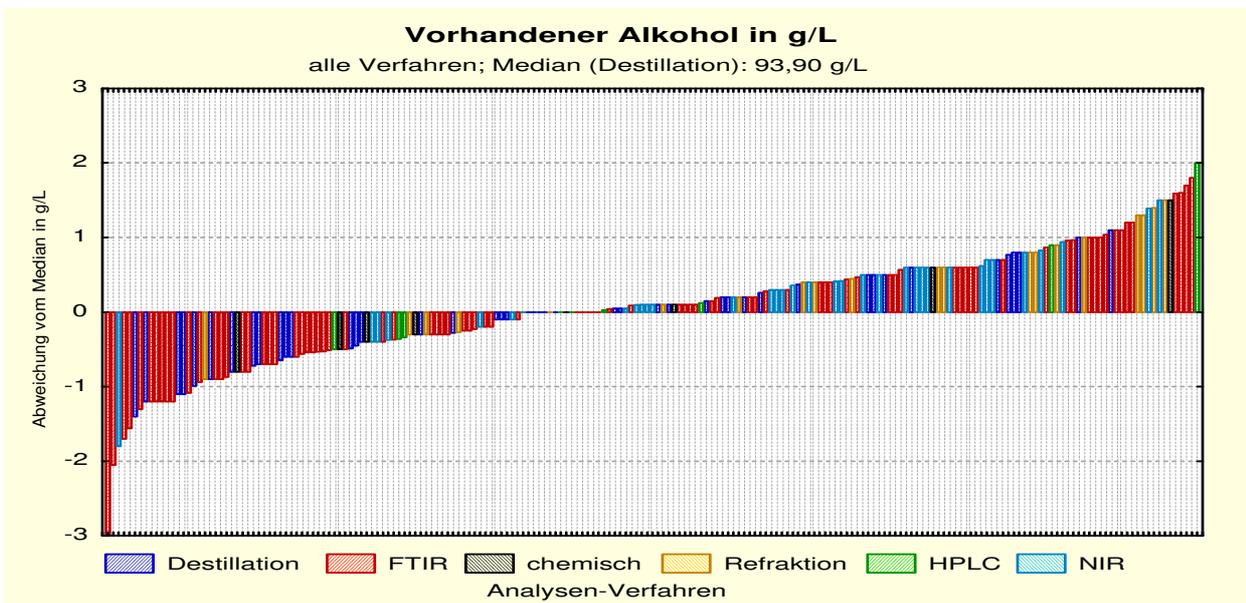
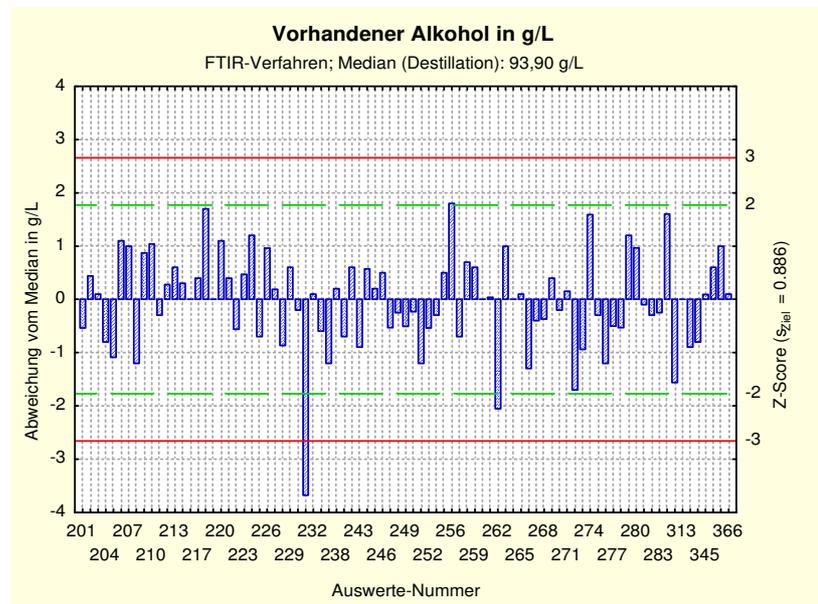
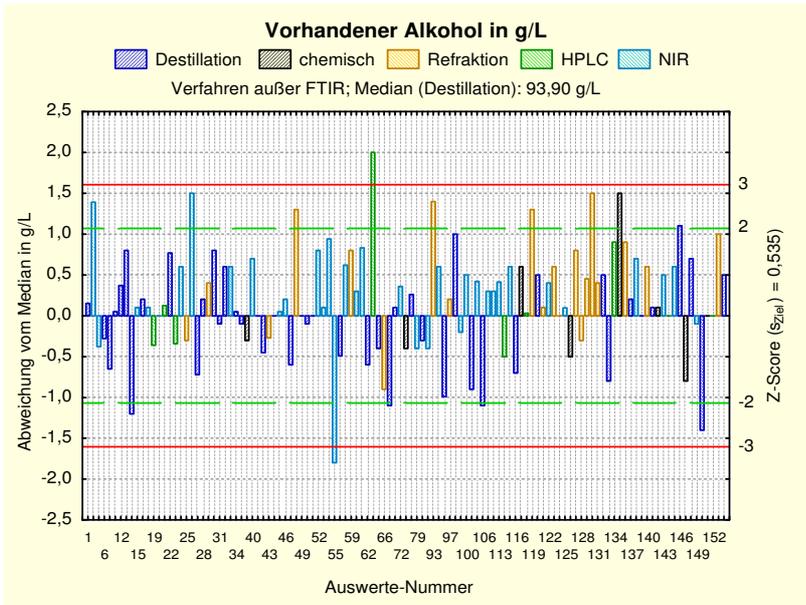
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 2.8	92,20	-1,700	-0,63	-1,92	
273	LwK 2.8	92,96	-0,940	-0,35	-1,06	
274	LwK 2.8	95,49	1,590	0,59	1,79	
275	LwK 2.8	93,60	-0,300	-0,11	-0,34	
276	LwK 2.8	92,70	-1,200	-0,45	-1,35	
277	LwK 2.8	93,40	-0,500	-0,19	-0,56	
278	LwK 2.8	93,37	-0,533	-0,20	-0,60	
279	LwK 2.8	95,10	1,200	0,45	1,35	
280	LwK 2.8	94,87	0,967	0,36	1,09	
281	LwK 2.8	93,80	-0,100	-0,04	-0,11	
282	LwK 2.8	93,60	-0,300	-0,11	-0,34	
283	LwK 2.8	93,65	-0,250	-0,09	-0,28	
284	LwK 2.8	95,50	1,600	0,60	1,81	
285	LwK 2.8	92,34	-1,560	-0,58	-1,76	
286	LwK 2.8	91,39	-2,510	-0,94	-2,83	
313	LwK 2.8	93,90	0,000	0,00	0,00	
320	LwK 2.8	95,80	1,900	0,71	2,14	
321	LwK 2.8	93,00	-0,900	-0,34	-1,02	
339	LwK 2.8	93,10	-0,800	-0,30	-0,90	
345	LwK 2.8	93,99	0,090	0,03	0,10	
346	LwK 2.8	94,50	0,600	0,22	0,68	
351	LwK 2.8	94,90	1,000	0,37	1,13	
366	LwK 2.8	94,00	0,100	0,04	0,11	
371	LwK 2.8	93,80	-0,100	-0,04	-0,11	

6.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	92,50
Mittelwert	93,810
Median	93,900
Maximalwert	95,00
Standardabweichung (s_L)	0,620
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,092
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,681
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,23
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,16
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,70
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,10

6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	25	93,864	0,704
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	20	93,770	0,637
	Destillationsverfahren	45	93,814	0,670
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	3	94,249	0,994
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	5	93,678	0,582
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	20	94,418	0,695
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	9	93,989	0,588
	herkömmliche Verfahren	82	93,982	0,692
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	86	93,868	0,859
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	35	94,251	0,435



6.6 Gesamtextrakt [g/L]**6.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	38,2	-0,50	-0,40	-0,84	
04	LwK 3.3	39,2	0,50	0,40	0,84	
06	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
07	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
08	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
12	LwK 3.3	39,1	0,45	0,36	0,76	
13	LwK 3.2	38,9	0,20	0,16	0,34	
14	LwK 3.3	38,0	-0,70	-0,55	-1,18	
15	LwK 3.3	39,5	0,80	0,63	1,35	
16	LwK 3.3	38,7	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 3.3	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
20	LwK 3.3	39,1	0,40	0,32	0,67	
21	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
22	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
23	LwK 3.3	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
24	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
25	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
26	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
27	LwK 3.2	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
28	LwK 3.3	38,8	0,11	0,08	0,18	
29	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
30	LwK 3.1	38,9	0,20	0,16	0,34	
31	LwK 3.2	38,9	0,20	0,16	0,34	
32	LwK 3.2	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
33	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
34	LwK 3.3	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
35	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
36	LwK 3.3	38,1	-0,60	-0,48	-1,01	
39	LwK 3.3	37,8	-0,90	-0,71	-1,52	
40	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
41	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
42	LwK 3.3	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
43	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
44	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
45	LwK 3.2	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
46	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
47	LwK 3.2	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
48	k. A.	39,0	0,30	0,24	0,51	
49	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
50	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
51	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
52	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
53	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
54	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
55	LwK 3.3	38,1	-0,60	-0,48	-1,01	
58	LwK 3.3	38,7	-0,04	-0,03	-0,07	
59	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
60	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
61	LwK 3.3	40,0	1,29	1,02	2,17	
62	LwK 3.2	38,1	-0,60	-0,48	-1,01	
63	LwK 3.3	40,3	1,60	1,27	2,69	
64	LwK 3.2	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
70	LwK 3.3	38,1	-0,60	-0,48	-1,01	
71	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
79	LwK 3.3	39,6	0,90	0,71	1,52	
90	LwK 3.2	38,1	-0,55	-0,44	-0,93	
95	LwK 3.2	38,7	0,00	0,00	0,00	
97	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
98	LwK 3.2	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
99	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
100	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
111	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
112	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
113	LwK 3.3	38,7	0,00	0,00	0,00	
114	LwK 3.3	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
115	LwK 3.2	38,8	0,10	0,08	0,17	
116	LwK 3.2	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
117	LwK 3.3	38,7	0,00	0,00	0,00	
118	LwK 3.3	38,7	0,00	0,00	0,00	
119	LwK 3.3	39,1	0,40	0,32	0,67	
120	LwK 3.2	38,8	0,10	0,08	0,17	
121	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
122	LwK 3.3	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
123	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
124	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
125	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
126	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
127	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
128	LwK 3.3	38,2	-0,50	-0,40	-0,84	
129	LwK 3.3	38,7	0,00	0,00	0,00	
130	LwK 3.3	39,2	0,50	0,40	0,84	
131	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
132	LwK 3.2	38,8	0,10	0,08	0,17	
133	LwK 3.3	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
134	LwK 3.2	38,9	0,20	0,16	0,34	
135	LwK 3.3	39,0	0,30	0,24	0,51	
136	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
137	LwK 3.2	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
138	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
139	LwK 3.2	38,7	0,00	0,00	0,00	
140	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
141	LwK 3.2	39,1	0,40	0,32	0,67	
142	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
143	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
144	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
145	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
146	LwK 3.2	41,1	2,40	1,90	4,04	
147	LwK 3.3	38,0	-0,70	-0,55	-1,18	
148	LwK 3.2	38,7	0,00	0,00	0,00	
149	LwK 3.3	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
150	LwK 3.3	38,3	-0,40	-0,32	-0,67	
151	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
152	LwK 3.3	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	
153	LwK 3.3	38,9	0,20	0,16	0,34	
154	LwK 3.2	38,5	-0,20	-0,16	-0,34	

6.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	37,9	-0,77	-0,61	-1,30	
202	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
203	FTIR	38,9	0,20	0,16	0,34	
204	FTIR	40,1	1,40	1,11	2,36	
206	FTIR	43,3	4,57	3,62	7,69	(**)
209	FTIR	39,0	0,30	0,24	0,51	
210	FTIR	38,8	0,10	0,08	0,17	
211	FTIR	38,8	0,10	0,08	0,17	
216	FTIR	39,6	0,90	0,71	1,52	
217	FTIR	38,4	-0,28	-0,22	-0,47	
218	FTIR	39,1	0,40	0,32	0,67	
219	FTIR	38,7	0,00	0,00	0,00	
221	FTIR	39,5	0,80	0,63	1,35	
223	FTIR	38,8	0,10	0,08	0,17	
225	FTIR	39,2	0,50	0,40	0,84	
226	LwK 3.3	38,8	0,10	0,08	0,17	
227	FTIR	39,1	0,45	0,36	0,76	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
228	LwK 3.3	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
229	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
230	FTIR	39,4	0,70	0,55	1,18	
231	FTIR	38,8	0,05	0,04	0,08	
232	FTIR	38,1	-0,60	-0,48	-1,01	
234	FTIR	39,8	1,05	0,83	1,77	
238	FTIR	39,2	0,50	0,40	0,84	
239	FTIR	39,9	1,20	0,95	2,02	
242	FTIR	39,4	0,70	0,55	1,18	
244	FTIR	38,7	0,00	0,00	0,00	
245	FTIR	38,9	0,20	0,16	0,34	
248	FTIR	39,1	0,40	0,32	0,67	
249	FTIR	39,2	0,50	0,40	0,84	
251	FTIR	39,5	0,80	0,63	1,35	
253	FTIR	39,8	1,10	0,87	1,85	
254	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
256	FTIR	39,9	1,20	0,95	2,02	
257	FTIR	39,6	0,90	0,71	1,52	
260	FTIR	38,9	0,20	0,16	0,34	
261	FTIR	39,1	0,39	0,31	0,66	
264	FTIR	39,9	1,20	0,95	2,02	
265	FTIR	38,6	-0,10	-0,08	-0,17	
266	FTIR	40,2	1,50	1,19	2,53	
268	FTIR	37,7	-1,00	-0,79	-1,68	
269	FTIR	39,7	1,00	0,79	1,68	
270	FTIR	38,2	-0,50	-0,40	-0,84	
271	FTIR	39,9	1,20	0,95	2,02	
272	FTIR	37,8	-0,90	-0,71	-1,52	
273	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
274	FTIR	39,8	1,05	0,83	1,77	
275	FTIR	38,8	0,10	0,08	0,17	
276	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
279	FTIR	39,4	0,69	0,55	1,16	
281	FTIR	40,1	1,40	1,11	2,36	
282	FTIR	51,6	12,90	10,22	21,72	(**)
283	FTIR	39,3	0,60	0,48	1,01	
321	FTIR	38,4	-0,30	-0,24	-0,51	
339	FTIR	39,9	1,20	0,95	2,02	
366	FTIR	40,4	1,70	1,35	2,86	

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

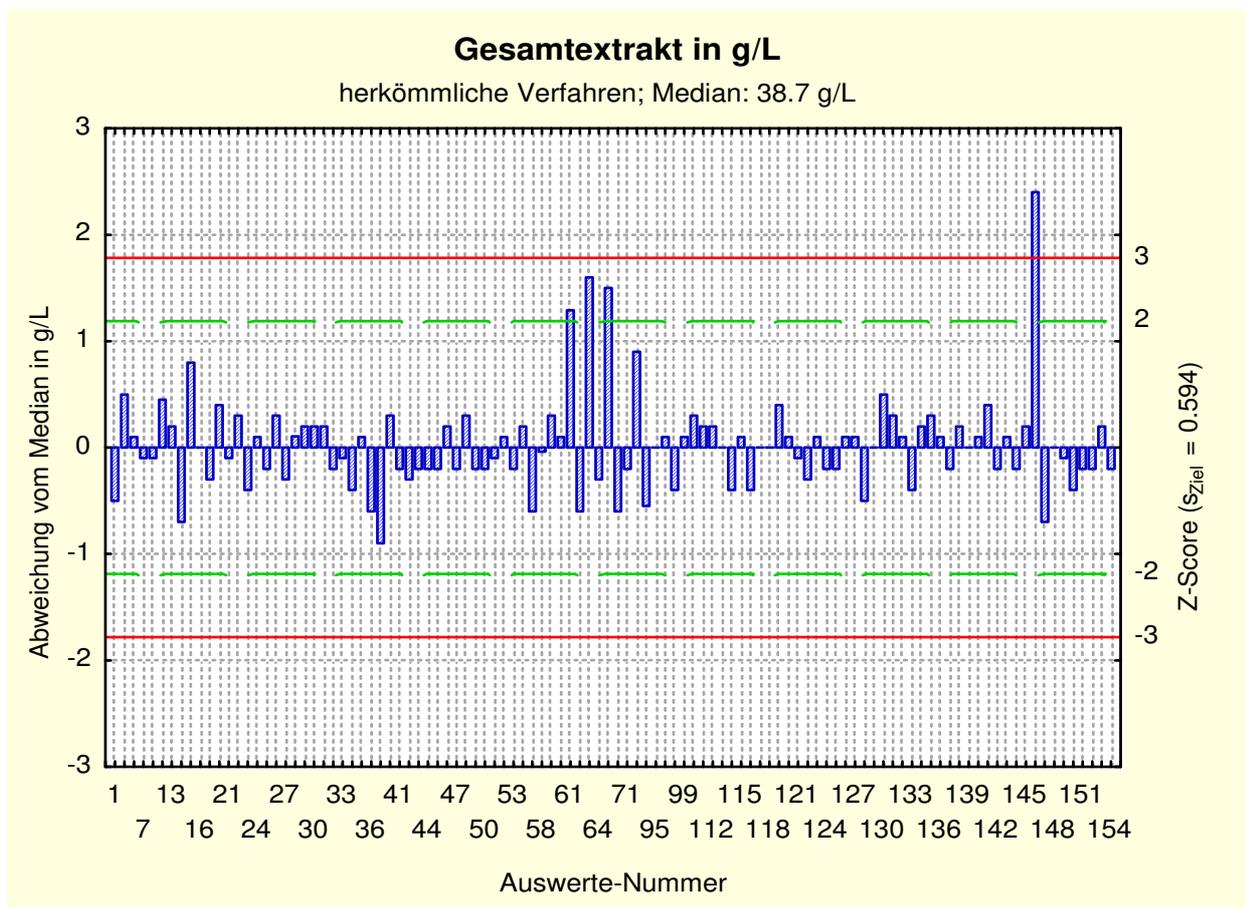
6.6.3 Angaben zu den Analyseverfahren

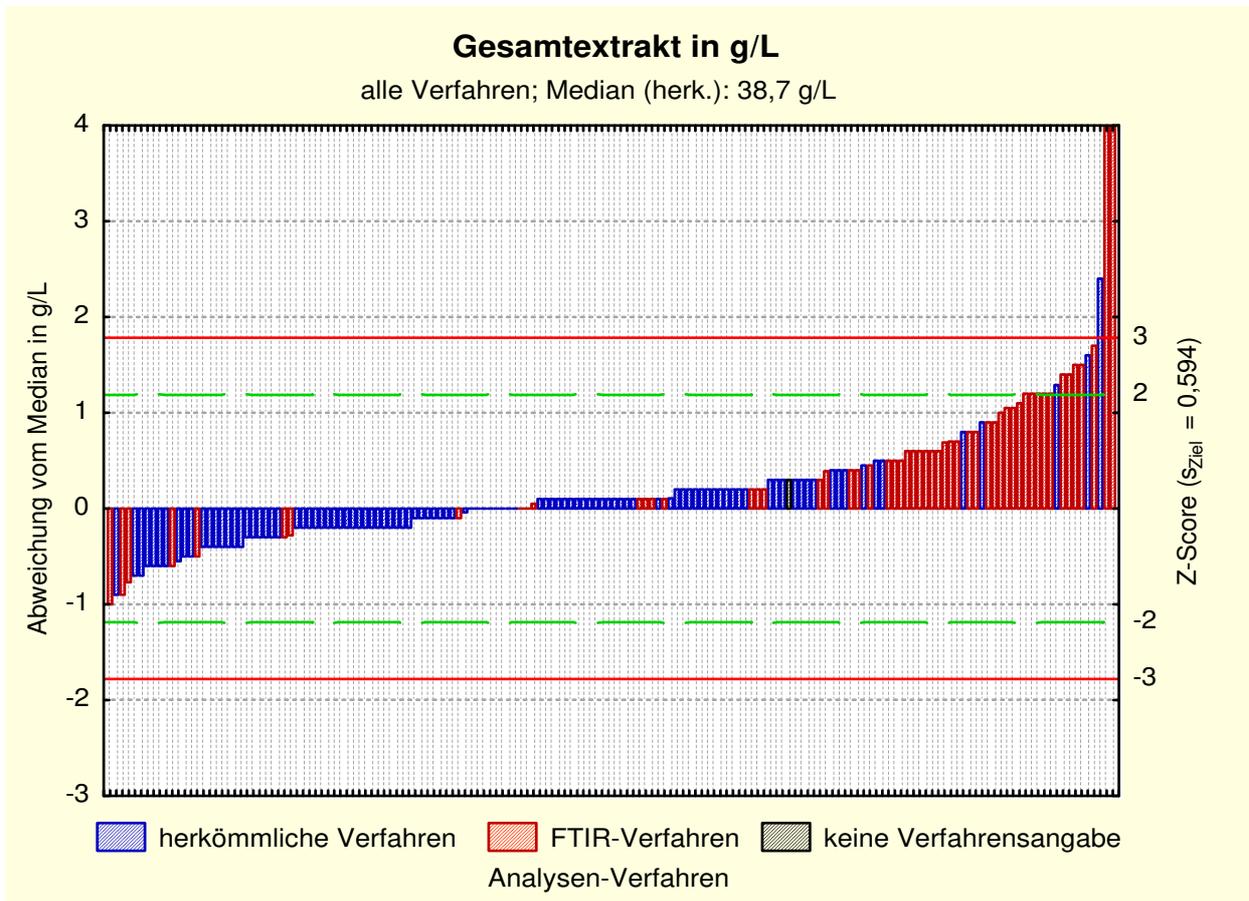
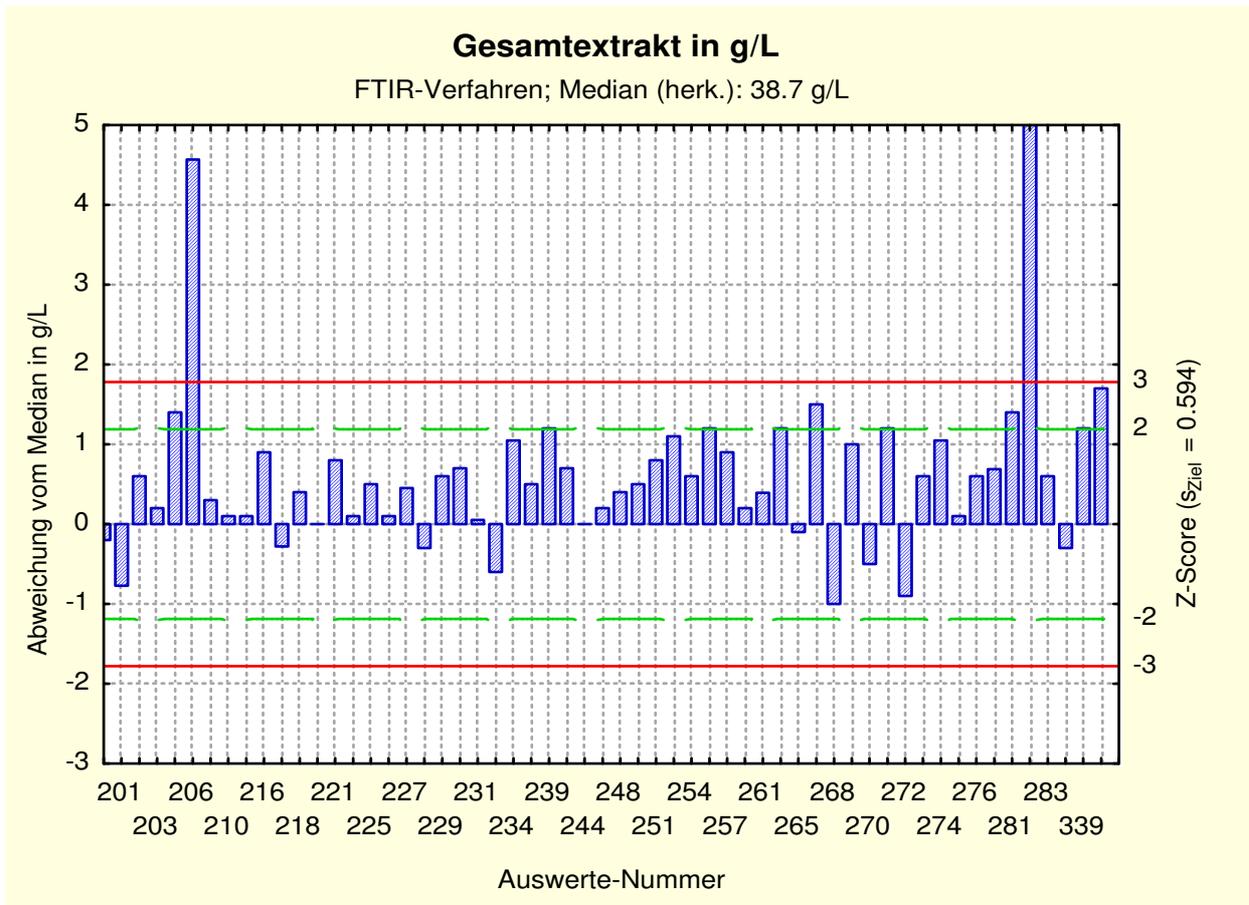
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	38,900	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n.LwK 2.1	23	38,597	0,324
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	82	38,689	0,318
	herkömmliche Verfahren	106	38,671	0,319
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	54	39,253	0,654
k. A.	keine Angabe	1	39,000	

6.6.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	104
Minimalwert	37,8
Mittelwert	38,71
Median	38,70
Maximalwert	41,1
Standardabweichung (s_L)	0,444
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,263
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,565) *)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,35
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,75
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,79)
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,07
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	(0,08)

*) Die Bewertung der FTIR-Ergebnisse erfolgte mit der herkömmlichen Zielstandardabweichung.





6.7 Zuckerfreier Extrakt [g/L]**6.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	23,1	-0,96	-1,14	-0,92	
04	LwK 3.3	24,9	0,82	0,97	0,78	
06	LwK 3.3	24,9	0,80	0,95	0,76	
07	LwK 3.3	24,4	0,30	0,36	0,29	
12	LwK 3.3	25,4	1,30	1,54	1,24	
13	LwK 3.2	24,2	0,10	0,12	0,10	
14	LwK 3.2	23,3	-0,80	-0,95	-0,76	
15	LwK 3.3	25,1	1,00	1,18	0,95	
16	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
18	LwK 3.3	22,7	-1,40	-1,66	-1,34	
20	LwK 3.3	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
21	LwK 3.3	23,6	-0,50	-0,59	-0,48	
22	LwK 3.3	24,6	0,50	0,59	0,48	
23	LwK 3.3	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
24	LwK 3.3	24,5	0,42	0,50	0,40	
25	LwK 3.3	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
26	LwK 3.3	22,5	-1,60	-1,89	-1,53	
27	LwK 3.2	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
28	LwK 3.3	24,1	0,01	0,01	0,00	
29	LwK 3.3	38,9	14,80	17,53	14,12	(*)
30	LwK 3.1	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
31	LwK 3.2	24,0	-0,10	-0,12	-0,10	
32	LwK 3.2	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
33	LwK 3.2	24,0	-0,10	-0,12	-0,10	
34	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
35	LwK 3.3	23,6	-0,50	-0,59	-0,48	
36	LwK 3.3	23,3	-0,80	-0,95	-0,76	
39	LwK 3.3	22,8	-1,30	-1,54	-1,24	
40	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
41	LwK 3.3	24,4	0,30	0,36	0,29	
42	LwK 3.3	24,3	0,20	0,24	0,19	
43	LwK 3.3	24,4	0,30	0,36	0,29	
44	LwK 3.3	24,0	-0,10	-0,12	-0,10	
45	LwK 3.1	26,0	1,90	2,25	1,81	
46	LwK 3.3	24,7	0,60	0,71	0,57	
47	LwK 3.2	24,4	0,30	0,36	0,29	
48	k. A.	25,0	0,90	1,07	0,86	
49	LwK 3.3	24,3	0,20	0,24	0,19	
50	LwK 3.3	24,1	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
52	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
53	LwK 3.3	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
54	LwK 3.3	24,9	0,80	0,95	0,76	
55	LwK 3.3	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
58	LwK 3.3	24,6	0,51	0,60	0,49	
59	LwK 3.3	24,3	0,20	0,24	0,19	
60	LwK 3.3	24,1	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 3.3	25,0	0,90	1,07	0,86	
62	LwK 3.2	20,8	-3,35	-3,97	-3,20	
63	LwK 3.3	25,7	1,60	1,89	1,53	
64	LwK 3.2	22,6	-1,50	-1,78	-1,43	
70	LwK 3.3	23,2	-0,90	-1,07	-0,86	
71	LwK 3.3	25,1	1,00	1,18	0,95	
79	LwK 3.3	26,1	2,04	2,42	1,95	
90	LwK 3.2	23,9	-0,23	-0,27	-0,22	
95	LwK 3.2	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
100	LwK 3.2	24,8	0,70	0,83	0,67	
111	LwK 3.2	24,5	0,40	0,47	0,38	
112	LwK 3.3	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
113	LwK 3.3	24,1	0,00	0,00	0,00	
114	LwK 3.3	23,4	-0,70	-0,83	-0,67	
115	LwK 3.2	24,8	0,70	0,83	0,67	
116	LwK 3.2	22,7	-1,40	-1,66	-1,34	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
117	LwK 3.3	22,7	-1,40	-1,66	-1,34	
118	LwK 3.3	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
119	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
120	LwK 3.2	24,7	0,60	0,71	0,57	
121	LwK 3.3	24,2	0,10	0,12	0,10	
122	LwK 3.3	24,0	-0,10	-0,12	-0,10	
123	LwK 3.3	23,4	-0,70	-0,83	-0,67	
124	LwK 3.3	22,4	-1,70	-2,01	-1,62	
125	LwK 3.3	24,1	0,00	0,00	0,00	
126	LwK 3.3	24,2	0,10	0,12	0,10	
127	LwK 3.3	22,7	-1,40	-1,66	-1,34	
128	LwK 3.3	23,2	-0,90	-1,07	-0,86	
129	LwK 3.3	22,9	-1,25	-1,48	-1,19	
130	LwK 3.3	24,5	0,40	0,47	0,38	
131	LwK 3.3	23,0	-1,10	-1,30	-1,05	
132	LwK 3.2	24,7	0,60	0,71	0,57	
133	LwK 3.2	24,0	-0,10	-0,12	-0,10	
134	LwK 3.2	24,2	0,10	0,12	0,10	
135	LwK 3.3	25,1	0,98	1,16	0,93	
136	LwK 3.3	24,4	0,30	0,36	0,29	
137	LwK 3.2	24,2	0,10	0,12	0,10	
138	LwK 3.3	24,3	0,20	0,24	0,19	
139	LwK 3.2	24,3	0,20	0,24	0,19	
140	LwK 3.3	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
141	LwK 3.2	23,6	-0,50	-0,59	-0,48	
142	LwK 3.3	23,3	-0,80	-0,95	-0,76	
143	LwK 3.3	24,6	0,50	0,59	0,48	
144	LwK 3.3	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
145	LwK 3.3	25,0	0,90	1,07	0,86	
146	LwK 3.2	26,7	2,60	3,08	2,48	
147	LwK 3.3	22,2	-1,90	-2,25	-1,81	
148	LwK 3.2	24,7	0,60	0,71	0,57	
149	LwK 3.3	24,8	0,70	0,83	0,67	
150	LwK 3.3	23,3	-0,80	-0,95	-0,76	
151	LwK 3.3	24,1	0,00	0,00	0,00	
152	LwK 3.3	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
153	LwK 3.3	23,0	-1,10	-1,30	-1,05	
154	LwK 3.2	24,5	0,40	0,47	0,38	

6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	24,8	0,68	0,81	0,65	
204	FTIR	25,8	1,68	1,99	1,60	
206	FTIR	27,1	2,96	3,51	2,82	
209	FTIR	25,3	1,16	1,37	1,11	
210	FTIR	23,6	-0,53	-0,63	-0,51	
216	FTIR	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
217	FTIR	24,2	0,08	0,09	0,08	
218	FTIR	19,2	-4,90	-5,80	-4,67	
219	FTIR	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
226	FTIR	23,2	-0,90	-1,07	-0,86	
228	FTIR	25,6	1,50	1,78	1,43	
230	FTIR	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
232	FTIR	23,7	-0,40	-0,47	-0,38	
238	FTIR	24,6	0,54	0,64	0,52	
244	FTIR	24,8	0,70	0,83	0,67	
245	FTIR	23,8	-0,30	-0,36	-0,29	
248	FTIR	23,9	-0,20	-0,24	-0,19	
253	LwK 3.3	26,2	2,07	2,45	1,97	
254	FTIR	24,7	0,60	0,71	0,57	
261	FTIR	23,6	-0,51	-0,60	-0,49	
269	FTIR	24,8	0,70	0,83	0,67	
283	FTIR	24,2	0,10	0,12	0,10	

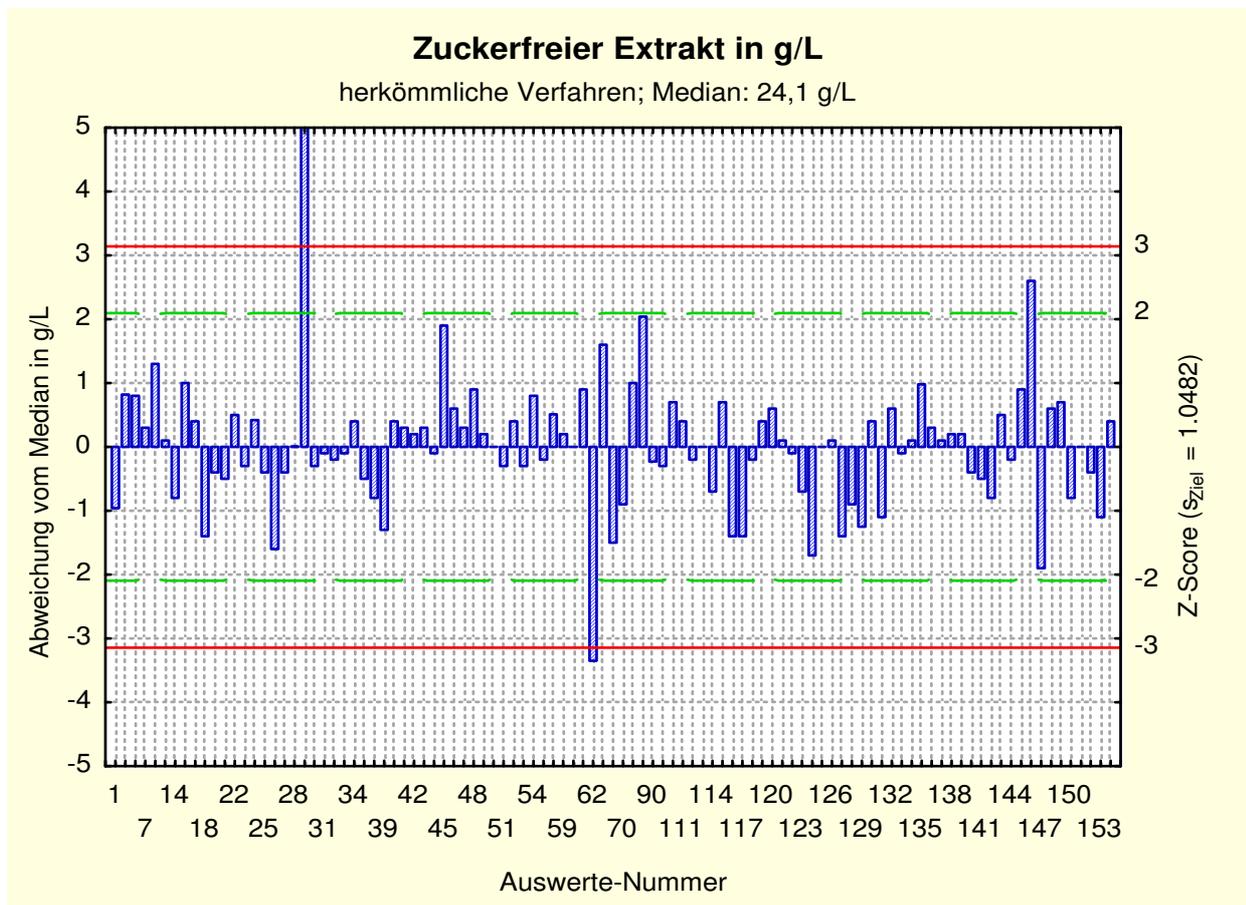
6.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

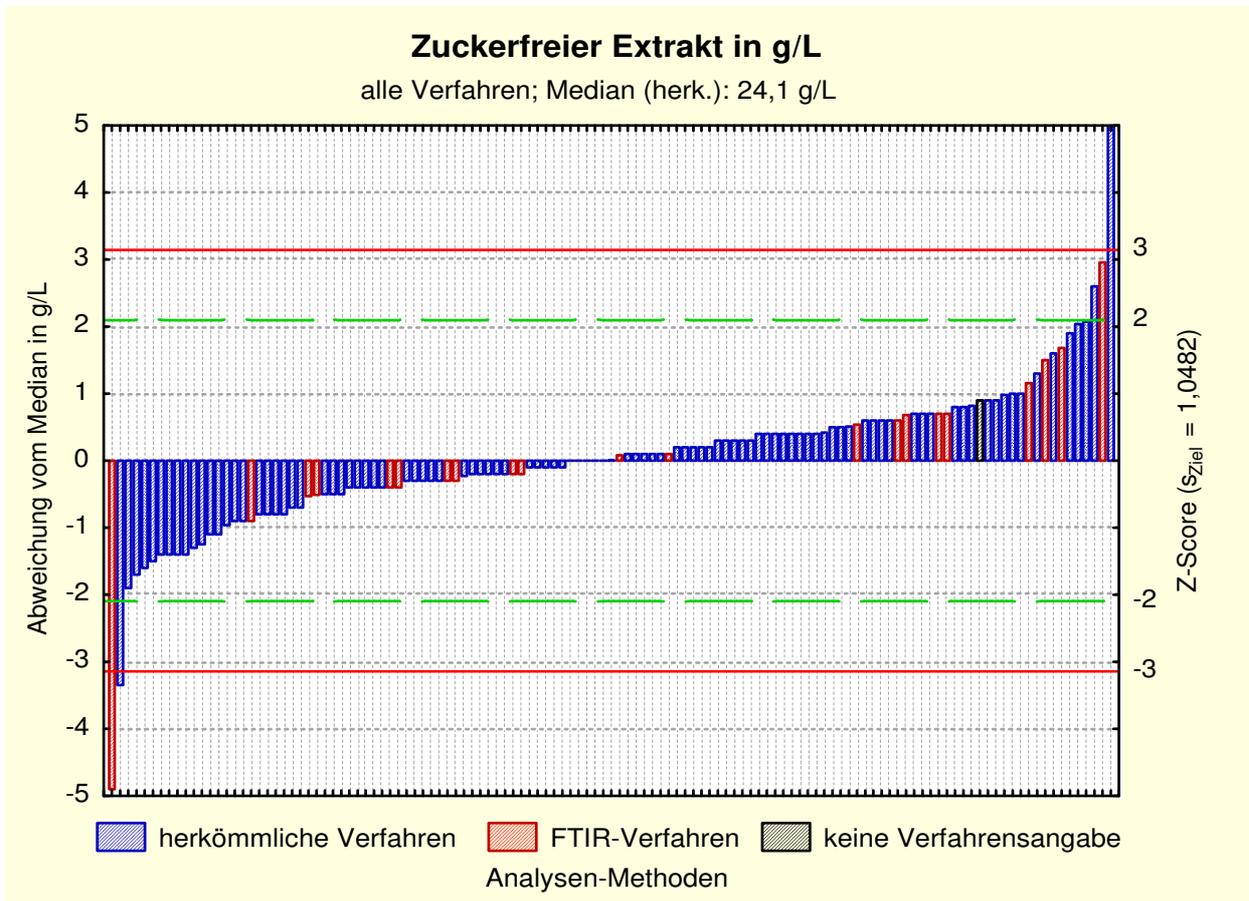
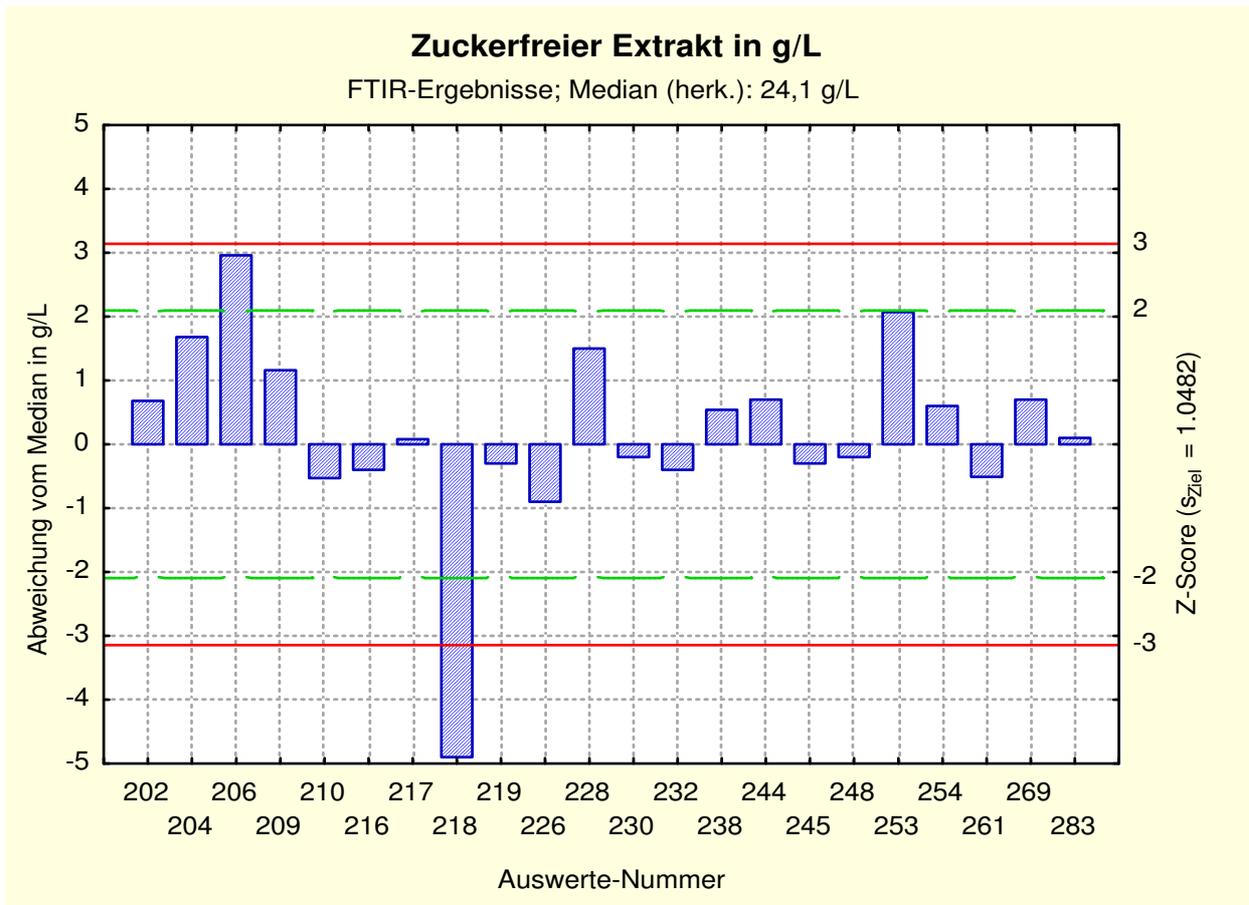
Ergebnisse für Zuckerfreier Extrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	99
Minimalwert	20,8
Mittelwert	24,05
Median	24,10
Maximalwert	26,7
Standardabweichung (s_L)	0,877
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,088
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,844
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,04
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,84
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,10
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,08
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	

Die Bewertung der FTIR-Ergebnisse erfolgte mit der herkömmlichen Zielstandardabweichung.

6.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	24,900	1,764
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n. LwK 2.1	26	24,062	0,672
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	72	24,084	0,829
	herkömmliche Verfahren	100	24,073	0,763
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	21	24,298	0,901
k. A.	keine Angabe	1	25,000	





6.8 Vergärbare Zucker [g/L]

6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse enzymatischer und HPLC-Bestimmungen (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 4.5	15,06	0,665	1,22	1,54	
04	LwK 4.7	14,28	-0,115	-0,21	-0,27	
06	LwK 4.5	13,90	-0,495	-0,91	-1,15	
07	LwK 4.5	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
08	LwK 4.5	14,40	0,005	0,01	0,01	
12	LwK 4.5	13,79	-0,605	-1,11	-1,40	
13	LwK 4.7	14,70	0,305	0,56	0,71	
14	LwK 4.7	14,67	0,275	0,50	0,64	
15	LwK 4.5	14,30	-0,095	-0,17	-0,22	
16	LwK 4.5	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
18	LwK 4.8	15,80	1,405	2,58	3,26	
19	LwK 4.7	14,83	0,435	0,80	1,01	
20	LwK 4.4	15,40	1,005	1,84	2,33	
21	LwK 4.7	15,03	0,635	1,16	1,47	
22	LwK 4.5	14,38	-0,015	-0,03	-0,03	
23	LwK 4.7	14,46	0,065	0,12	0,15	
24	NMR	14,28	-0,115	-0,21	-0,27	
25	LwK 4.4	14,60	0,205	0,38	0,48	
26	LwK 4.4	16,50	2,105	3,86	4,88	
27	LwK 4.5	14,44	0,045	0,08	0,10	
28	LwK 4.7	14,70	0,305	0,56	0,71	
29	LwK 4.4	15,70	1,305	2,39	3,02	
30	LwK 4.4	15,10	0,705	1,29	1,63	
31	LwK 4.4	5,10	-9,295	-17,05	-21,54	(*)
32	LwK 4.5	14,60	0,205	0,38	0,48	
33	LwK 4.7	14,50	0,105	0,19	0,24	
34	LwK 4.4	13,80	-0,595	-1,09	-1,38	
35	LwK 4.4	15,20	0,805	1,48	1,87	
36	LwK 4.8	14,80	0,405	0,74	0,94	
39	LwK 4.3	15,00	0,605	1,11	1,40	
40	LwK 4.5	14,50	0,105	0,19	0,24	
41	LwK 4.7	14,10	-0,295	-0,54	-0,68	
42	LwK 4.5	14,13	-0,265	-0,49	-0,61	
43	LwK 4.5	14,03	-0,365	-0,67	-0,85	
44	LwK 4.7	14,55	0,150	0,28	0,35	
45	LwK 4.4	12,52	-1,875	-3,44	-4,34	
46	LwK 4.5	14,14	-0,255	-0,47	-0,59	
47	LwK 4.5	14,05	-0,345	-0,63	-0,80	
48	LwK 4.3	14,00	-0,395	-0,72	-0,92	
49	LwK 4.5	14,14	-0,255	-0,47	-0,59	
50	LwK 4.5	14,39	-0,005	-0,01	-0,01	
51	LwK 4.4	14,80	0,405	0,74	0,94	
52	LwK 4.7	14,30	-0,095	-0,17	-0,22	
53	LwK 4.4	14,60	0,205	0,38	0,48	
54	LwK 4.5	14,21	-0,185	-0,34	-0,43	
55	LwK 4.5	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
57	LwK 4.5	15,30	0,905	1,66	2,10	
58	LwK 4.5	14,09	-0,305	-0,56	-0,71	
59	LwK 4.4	14,70	0,305	0,56	0,71	
60	LwK 4.4	14,70	0,305	0,56	0,71	
61	LwK 4.7	13,80	-0,595	-1,09	-1,38	
62	LwK 4.4	17,35	2,955	5,42	6,85	(**)
63	LwK 4.7	14,60	0,205	0,38	0,48	
64	LwK 4.4	15,80	1,405	2,58	3,26	
66	LwK 4.4	15,20	0,805	1,48	1,87	
70	LwK 4.1	14,85	0,455	0,83	1,05	
71	LwK 4.4	13,40	-0,995	-1,83	-2,31	
72	LwK 4.5	14,04	-0,355	-0,65	-0,82	
78	LwK 4.4	16,50	2,105	3,86	4,88	
79	LwK 4.4	17,10	2,705	4,96	6,27	(**)

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

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
95	LwK 4.5	14,21	-0,185	-0,34	-0,43	
97	LwK 4.7	15,04	0,645	1,18	1,49	
100	LwK 4.7	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
111	LwK 4.5	14,40	0,005	0,01	0,01	
112	LwK 4.5	15,00	0,605	1,11	1,40	
113	LwK 4.7	14,60	0,205	0,38	0,48	
114	LwK 4.7	14,90	0,505	0,93	1,17	
115	LwK 4.5	14,00	-0,395	-0,72	-0,92	
116	LwK 4.4	15,60	1,205	2,21	2,79	
117	LwK 4.4	16,00	1,605	2,94	3,72	
118	LwK 4.7	14,83	0,435	0,80	1,01	
119	LwK 4.7	14,60	0,205	0,38	0,48	
120	LwK 4.5	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
121	LwK 4.5	14,40	0,005	0,01	0,01	
122	LwK 4.5	14,40	0,005	0,01	0,01	
123	LwK 4.4	15,40	1,005	1,84	2,33	
124	LwK 4.4	16,10	1,705	3,13	3,95	
125	LwK 4.7	14,40	0,005	0,01	0,01	
126	LwK 4.5	14,60	0,205	0,38	0,48	
127	LwK 4.1	16,10	1,705	3,13	3,95	
128	LwK 4.4	15,00	0,605	1,11	1,40	
129	LwK 4.1	15,85	1,455	2,67	3,37	
130	LwK 4.7	14,70	0,305	0,56	0,71	
131	LwK 4.4	16,00	1,605	2,94	3,72	
132	LwK 4.5	14,10	-0,295	-0,54	-0,68	
133	LwK 4.5	14,30	-0,095	-0,17	-0,22	
134	LwK 4.7	14,70	0,305	0,56	0,71	
135	LwK 4.5	13,92	-0,475	-0,87	-1,10	
136	LwK 4.5	14,50	0,105	0,19	0,24	
137	LwK 4.5	14,30	-0,095	-0,17	-0,22	
138	LwK 4.5	14,53	0,135	0,25	0,31	
139	LwK 4.7	14,37	-0,025	-0,05	-0,06	
140	LwK 4.6	15,12	0,725	1,33	1,68	
141	LwK 4.3	15,50	1,105	2,03	2,56	
142	LwK 4.4	15,20	0,805	1,48	1,87	
143	LwK 4.7	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
144	LwK 4.7	14,60	0,205	0,38	0,48	
145	LwK 4.5	13,90	-0,495	-0,91	-1,15	
146	LwK 4.4	14,20	-0,195	-0,36	-0,45	
147	LwK 4.4	15,80	1,405	2,58	3,26	
148	LwK 4.5	14,02	-0,375	-0,69	-0,87	
149	LwK 4.5	13,80	-0,595	-1,09	-1,38	
150	LwK 4.5	15,00	0,605	1,11	1,40	
151	LwK 4.3	14,40	0,005	0,01	0,01	
152	LwK 4.7	14,80	0,405	0,74	0,94	
153	LwK 4.4	15,90	1,505	2,76	3,49	
154	LwK 4.4	14,00	-0,395	-0,72	-0,92	

6.8.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse enzymatischer und HPLC-Bestimmungen (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	14,52	0,125	0,23	0,21	
203	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
204	LwK 4.8	14,95	0,555	1,02	0,95	
206	LwK 4.8	16,21	1,815	3,33	3,11	
207	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
208	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
209	LwK 4.8	13,74	-0,655	-1,20	-1,12	
210	LwK 4.8	14,73	0,335	0,61	0,57	
211	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
212	LwK 4.8	13,90	-0,495	-0,91	-0,85	
213	LwK 4.8	15,29	0,895	1,64	1,53	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
215	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
216	LwK 4.8	14,28	-0,115	-0,21	-0,20	
217	LwK 4.8	14,25	-0,145	-0,27	-0,25	
218	LwK 4.8	19,90	5,505	10,10	9,43	(**)
219	LwK 4.8	15,01	0,615	1,13	1,05	
220	LwK 4.8	16,30	1,905	3,49	3,26	
221	LwK 4.8	15,14	0,745	1,37	1,28	
222	LwK 4.8	14,67	0,275	0,50	0,47	
223	LwK 4.8	14,82	0,425	0,78	0,73	
224	LwK 4.8	14,10	-0,295	-0,54	-0,51	
225	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
226	LwK 4.8	15,68	1,285	2,36	2,20	
227	LwK 4.8	14,88	0,485	0,89	0,83	
228	LwK 4.8	12,80	-1,595	-2,93	-2,73	
229	LwK 4.8	15,48	1,085	1,99	1,86	
230	LwK 4.8	15,50	1,105	2,03	1,89	
231	LwK 4.8	13,67	-0,725	-1,33	-1,24	
232	LwK 4.8	14,40	0,005	0,01	0,01	
234	LwK 4.8	13,68	-0,715	-1,31	-1,22	
236	LwK 4.8	14,81	0,415	0,76	0,71	
238	LwK 4.8	14,56	0,165	0,30	0,28	
239	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
242	LwK 4.8	15,73	1,335	2,45	2,29	
243	LwK 4.8	15,50	1,105	2,03	1,89	
244	LwK 4.8	13,90	-0,495	-0,91	-0,85	
245	LwK 4.8	15,10	0,705	1,29	1,21	
246	LwK 4.8	14,10	-0,295	-0,54	-0,51	
247	LwK 4.8	15,39	0,995	1,83	1,70	
248	LwK 4.8	14,00	-0,395	-0,72	-0,68	
249	LwK 4.8	14,58	0,185	0,34	0,32	
250	LwK 4.8	14,51	0,115	0,21	0,20	
251	LwK 4.8	15,40	1,005	1,84	1,72	
252	LwK 4.8	14,43	0,035	0,06	0,06	
253	LwK 4.8	13,63	-0,765	-1,40	-1,31	
254	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
256	LwK 4.8	15,80	1,405	2,58	2,41	
257	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
258	LwK 4.8	14,70	0,305	0,56	0,52	
259	LwK 4.8	15,09	0,695	1,28	1,19	
260	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
261	LwK 4.8	15,52	1,125	2,06	1,93	
262	LwK 4.8	16,50	2,105	3,86	3,60	
263	LwK 4.8	15,00	0,605	1,11	1,04	
264	LwK 4.8	14,90	0,505	0,93	0,86	
265	LwK 4.8	14,30	-0,095	-0,17	-0,16	
266	LwK 4.8	15,90	1,505	2,76	2,58	
267	LwK 4.8	14,19	-0,205	-0,38	-0,35	
268	LwK 4.8	14,32	-0,075	-0,14	-0,13	
269	LwK 4.8	14,90	0,505	0,93	0,86	
270	LwK 4.8	13,94	-0,455	-0,83	-0,78	
271	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
272	LwK 4.8	15,80	1,405	2,58	2,41	
273	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
274	LwK 4.8	17,08	2,685	4,93	4,60	
275	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
276	LwK 4.8	15,64	1,245	2,28	2,13	
277	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
278	LwK 4.8	14,18	-0,215	-0,39	-0,37	
279	LwK 4.8	16,30	1,905	3,49	3,26	
280	LwK 4.8	14,64	0,245	0,45	0,42	
281	LwK 4.8	15,61	1,215	2,23	2,08	
282	LwK 4.8	15,10	0,705	1,29	1,21	
283	LwK 4.8	15,06	0,665	1,22	1,14	
284	LwK 4.8	13,65	-0,745	-1,37	-1,28	
285	LwK 4.8	11,68	-2,715	-4,98	-4,65	

Mit (**) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom gültigen Median ab.

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
286	LwK 4.8	13,60	-0,795	-1,46	-1,36	
320	LwK 4.8	16,50	2,105	3,86	3,60	
321	LwK 4.8	15,94	1,545	2,83	2,65	
339	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
346	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
351	LwK 4.8	14,80	0,405	0,74	0,69	
366	LwK 4.8	16,60	2,205	4,05	3,78	
371	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	

6.8.3 Reduktometrische Laboregebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse reduktometrischer Bestimmungen (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
20	LwK 4.4	15,40	0,200	0,35	0,44	
25	LwK 4.4	14,60	-0,600	-1,05	-1,32	
26	LwK 4.4	16,50	1,300	2,28	2,87	
29	LwK 4.4	15,70	0,500	0,88	1,10	
30	LwK 4.4	15,10	-0,100	-0,18	-0,22	
31	LwK 4.4	5,10	-10,100	-17,69	-22,28	(*)
34	LwK 4.4	13,80	-1,400	-2,45	-3,09	
35	LwK 4.4	15,20	0,000	0,00	0,00	
39	LwK 4.3	15,00	-0,200	-0,35	-0,44	
45	LwK 4.4	12,52	-2,680	-4,69	-5,91	(**)
48	LwK 4.3	14,00	-1,200	-2,10	-2,65	
51	LwK 4.4	14,80	-0,400	-0,70	-0,88	
53	LwK 4.4	14,60	-0,600	-1,05	-1,32	
59	LwK 4.4	14,70	-0,500	-0,88	-1,10	
60	LwK 4.4	14,70	-0,500	-0,88	-1,10	
62	LwK 4.4	17,35	2,150	3,77	4,74	
64	LwK 4.4	15,80	0,600	1,05	1,32	
66	LwK 4.4	15,20	0,000	0,00	0,00	
70	LwK 4.1	14,85	-0,350	-0,61	-0,77	
71	LwK 4.4	13,40	-1,800	-3,15	-3,97	
78	LwK 4.4	16,50	1,300	2,28	2,87	
79	LwK 4.4	17,10	1,900	3,33	4,19	
116	LwK 4.4	15,60	0,400	0,70	0,88	
117	LwK 4.4	16,00	0,800	1,40	1,76	
123	LwK 4.4	15,40	0,200	0,35	0,44	
124	LwK 4.4	16,10	0,900	1,58	1,99	
127	LwK 4.1	16,10	0,900	1,58	1,99	
128	LwK 4.4	15,00	-0,200	-0,35	-0,44	
129	LwK 4.1	15,85	0,650	1,14	1,43	
131	LwK 4.4	16,00	0,800	1,40	1,76	
140	LwK 4.6	15,12	-0,080	-0,14	-0,18	
141	LwK 4.3	15,50	0,300	0,53	0,66	
142	LwK 4.4	15,20	0,000	0,00	0,00	
146	LwK 4.4	14,20	-1,000	-1,75	-2,21	
147	LwK 4.4	15,80	0,600	1,05	1,32	
151	LwK 4.3	14,40	-0,800	-1,40	-1,76	
153	LwK 4.4	15,90	0,700	1,23	1,54	
154	LwK 4.4	14,00	-1,200	-2,10	-2,65	

Mit (*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der reduktometrischen Werte ab.

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

6.8.4 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse reduktometrischer Bestimmungen (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	14,52	-0,680	-1,19	-1,16	
203	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	
204	LwK 4.8	14,95	-0,250	-0,44	-0,43	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r) (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
206	LwK 4.8	16,21	1,010	1,77	1,73	
207	LwK 4.8	14,50	-0,700	-1,23	-1,20	
208	LwK 4.8	14,60	-0,600	-1,05	-1,03	
209	LwK 4.8	13,74	-1,460	-2,56	-2,50	
210	LwK 4.8	14,73	-0,470	-0,82	-0,80	
211	LwK 4.8	15,20	0,000	0,00	0,00	
212	LwK 4.8	13,90	-1,300	-2,28	-2,23	
213	LwK 4.8	15,29	0,090	0,16	0,15	
215	LwK 4.8	14,50	-0,700	-1,23	-1,20	
216	LwK 4.8	14,28	-0,920	-1,61	-1,58	
217	LwK 4.8	14,25	-0,950	-1,66	-1,63	
218	LwK 4.8	19,90	4,700	8,23	8,05	(**)
219	LwK 4.8	15,01	-0,190	-0,33	-0,33	
220	LwK 4.8	16,30	1,100	1,93	1,88	
221	LwK 4.8	15,14	-0,060	-0,11	-0,10	
222	LwK 4.8	14,67	-0,530	-0,93	-0,91	
223	LwK 4.8	14,82	-0,380	-0,67	-0,65	
224	LwK 4.8	14,10	-1,100	-1,93	-1,88	
225	LwK 4.8	14,50	-0,700	-1,23	-1,20	
226	LwK 4.8	15,68	0,480	0,84	0,82	
227	LwK 4.8	14,88	-0,320	-0,56	-0,55	
228	LwK 4.8	12,80	-2,400	-4,20	-4,11	
229	LwK 4.8	15,48	0,280	0,49	0,48	
230	LwK 4.8	15,50	0,300	0,53	0,51	
231	LwK 4.8	13,67	-1,530	-2,68	-2,62	
232	LwK 4.8	14,40	-0,800	-1,40	-1,37	
234	LwK 4.8	13,68	-1,520	-2,66	-2,60	
236	LwK 4.8	14,81	-0,390	-0,68	-0,67	
238	LwK 4.8	14,56	-0,640	-1,12	-1,10	
239	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	
242	LwK 4.8	15,73	0,530	0,93	0,91	
243	LwK 4.8	15,50	0,300	0,53	0,51	
244	LwK 4.8	13,90	-1,300	-2,28	-2,23	
245	LwK 4.8	15,10	-0,100	-0,18	-0,17	
246	LwK 4.8	14,10	-1,100	-1,93	-1,88	
247	LwK 4.8	15,39	0,190	0,33	0,33	
248	LwK 4.8	14,00	-1,200	-2,10	-2,05	
249	LwK 4.8	14,58	-0,620	-1,09	-1,06	
250	LwK 4.8	14,51	-0,690	-1,21	-1,18	
251	LwK 4.8	15,40	0,200	0,35	0,34	
252	LwK 4.8	14,43	-0,770	-1,35	-1,32	
253	LwK 4.8	13,63	-1,570	-2,75	-2,69	
254	LwK 4.8	14,60	-0,600	-1,05	-1,03	
256	LwK 4.8	15,80	0,600	1,05	1,03	
257	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	
258	LwK 4.8	14,70	-0,500	-0,88	-0,86	
259	LwK 4.8	15,09	-0,110	-0,19	-0,19	
260	LwK 4.8	14,50	-0,700	-1,23	-1,20	
261	LwK 4.8	15,52	0,320	0,56	0,55	
262	LwK 4.8	16,50	1,300	2,28	2,23	
263	LwK 4.8	15,00	-0,200	-0,35	-0,34	
264	LwK 4.8	14,90	-0,300	-0,53	-0,51	
265	LwK 4.8	14,30	-0,900	-1,58	-1,54	
266	LwK 4.8	15,90	0,700	1,23	1,20	
267	LwK 4.8	14,19	-1,010	-1,77	-1,73	
268	LwK 4.8	14,32	-0,880	-1,54	-1,51	
269	LwK 4.8	14,90	-0,300	-0,53	-0,51	
270	LwK 4.8	13,94	-1,260	-2,21	-2,16	
271	LwK 4.8	14,60	-0,600	-1,05	-1,03	
272	LwK 4.8	15,80	0,600	1,05	1,03	
273	LwK 4.8	14,50	-0,700	-1,23	-1,20	
274	LwK 4.8	17,08	1,880	3,29	3,22	
275	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	
276	LwK 4.8	15,64	0,440	0,77	0,75	
277	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	

Mit (**) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom gültigen Median ab.

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r) (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	LwK 4.8	14,18	-1,020	-1,79	-1,75	
279	LwK 4.8	16,30	1,100	1,93	1,88	
280	LwK 4.8	14,64	-0,560	-0,98	-0,96	
281	LwK 4.8	15,61	0,410	0,72	0,70	
282	LwK 4.8	15,10	-0,100	-0,18	-0,17	
283	LwK 4.8	15,06	-0,140	-0,25	-0,24	
284	LwK 4.8	13,65	-1,550	-2,72	-2,65	
285	LwK 4.8	11,68	-3,520	-6,17	-6,03	(**)
286	LwK 4.8	13,60	-1,600	-2,80	-2,74	
320	LwK 4.8	16,50	1,300	2,28	2,23	
321	LwK 4.8	15,94	0,740	1,30	1,27	
339	LwK 4.8	15,30	0,100	0,18	0,17	
346	LwK 4.8	15,20	0,000	0,00	0,00	
351	LwK 4.8	14,80	-0,400	-0,70	-0,68	
366	LwK 4.8	16,60	1,400	2,45	2,40	
371	LwK 4.8	14,60	-0,600	-1,05	-1,03	

Mit (**) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom gültigen Median ab.

6.8.5 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse enzymatischer und HPLC-Bestimmungen (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	14,53	0,135	0,25	0,23	
202	LwK 4.8	14,52	0,125	0,23	0,21	
203	LwK 4.8	15,03	0,635	1,16	1,09	
204	LwK 4.8	14,32	-0,075	-0,14	-0,13	
205	LwK 4.8	14,56	0,165	0,30	0,28	
206	LwK 4.8	16,21	1,815	3,33	3,11	
207	LwK 4.8	13,80	-0,595	-1,09	-1,02	
208	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
209	LwK 4.8	13,74	-0,655	-1,20	-1,12	
210	LwK 4.8	14,73	0,335	0,61	0,57	
211	LwK 4.8	13,30	-1,095	-2,01	-1,87	
212	LwK 4.8	13,95	-0,445	-0,82	-0,76	
213	LwK 4.8	14,28	-0,115	-0,21	-0,20	
215	LwK 4.8	14,30	-0,095	-0,17	-0,16	
216	LwK 4.8	15,79	1,395	2,56	2,39	
217	LwK 4.8	13,20	-1,195	-2,19	-2,05	
218	LwK 4.8	19,90	5,505	10,10	9,43	(**)
219	LwK 4.8	14,13	-0,265	-0,49	-0,45	
220	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
221	LwK 4.8	13,91	-0,485	-0,89	-0,83	
222	LwK 4.8	15,84	1,445	2,65	2,47	
223	LwK 4.8	13,35	-1,045	-1,92	-1,79	
224	LwK 4.8	14,10	-0,295	-0,54	-0,51	
225	LwK 4.8	15,30	0,905	1,66	1,55	
226	LwK 4.8	14,18	-0,215	-0,39	-0,37	
227	LwK 4.8	14,94	0,545	1,00	0,93	
228	LwK 4.8	13,84	-0,555	-1,02	-0,95	
229	LwK 4.8	14,14	-0,255	-0,47	-0,44	
230	LwK 4.8	13,75	-0,645	-1,18	-1,10	
231	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
232	LwK 4.8	14,10	-0,295	-0,54	-0,51	
234	LwK 4.8	13,68	-0,715	-1,31	-1,22	
236	LwK 4.8	14,64	0,245	0,45	0,42	
238	LwK 4.8	14,19	-0,205	-0,38	-0,35	
239	LwK 4.8	15,50	1,105	2,03	1,89	
242	LwK 4.8	13,85	-0,545	-1,00	-0,93	
243	LwK 4.8	14,20	-0,195	-0,36	-0,33	
244	LwK 4.8	13,90	-0,495	-0,91	-0,85	
245	LwK 4.8	14,63	0,235	0,43	0,40	
246	LwK 4.8	14,30	-0,095	-0,17	-0,16	
247	LwK 4.8	15,72	1,325	2,43	2,27	

Mit (**) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom gültigen Median ab.

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S) (informative Bewertung)

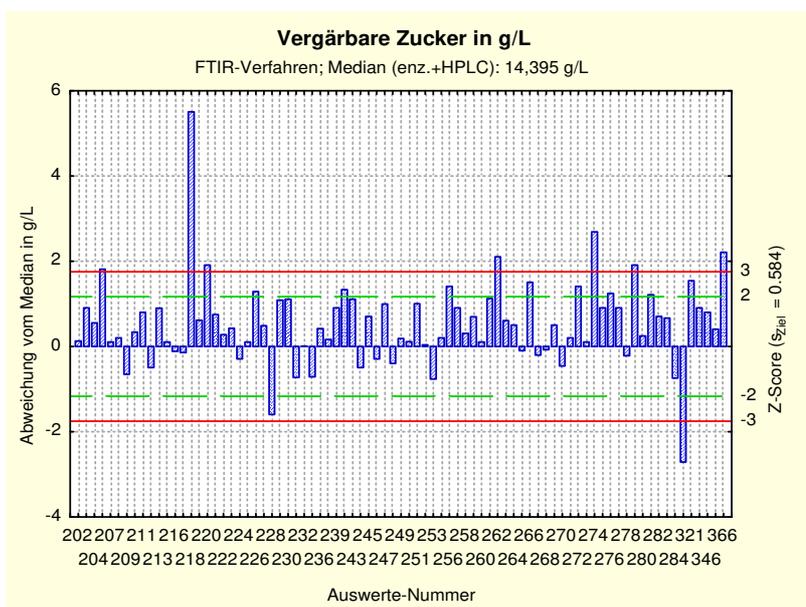
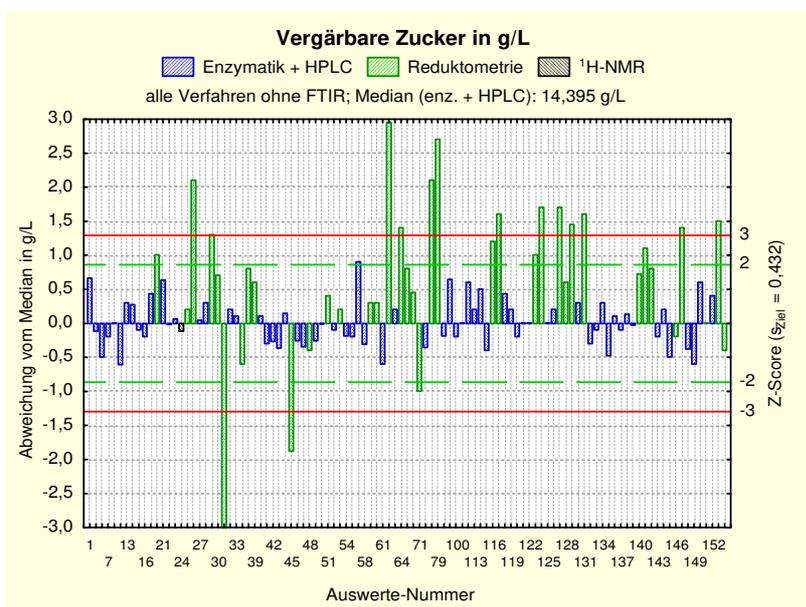
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
248	LwK 4.8	14,00	-0,395	-0,72	-0,68	
249	LwK 4.8	15,21	0,815	1,50	1,40	
251	LwK 4.8	15,40	1,005	1,84	1,72	
252	LwK 4.8	14,89	0,495	0,91	0,85	
253	LwK 4.8	13,64	-0,755	-1,39	-1,29	
254	LwK 4.8	14,53	0,135	0,25	0,23	
256	LwK 4.8	14,40	0,005	0,01	0,01	
257	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
258	LwK 4.8	11,80	-2,595	-4,76	-4,44	
259	LwK 4.8	14,43	0,035	0,06	0,06	
260	LwK 4.8	14,32	-0,075	-0,14	-0,13	
261	LwK 4.8	14,43	0,035	0,06	0,06	
262	LwK 4.8	14,18	-0,215	-0,39	-0,37	
263	LwK 4.8	14,40	0,005	0,01	0,01	
264	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
265	LwK 4.8	14,30	-0,095	-0,17	-0,16	
266	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
267	LwK 4.8	14,44	0,045	0,08	0,08	
268	LwK 4.8	13,56	-0,835	-1,53	-1,43	
269	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
270	LwK 4.8	13,79	-0,605	-1,11	-1,04	
271	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
273	LwK 4.8	14,20	-0,195	-0,36	-0,33	
274	LwK 4.8	14,36	-0,035	-0,06	-0,06	
275	LwK 4.8	14,70	0,305	0,56	0,52	
276	LwK 4.8	15,29	0,895	1,64	1,53	
277	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
279	LwK 4.8	15,60	1,205	2,21	2,06	
281	LwK 4.8	14,35	-0,045	-0,08	-0,08	
282	LwK 4.8	13,70	-0,695	-1,28	-1,19	
283	LwK 4.8	14,50	0,105	0,19	0,18	
284	LwK 4.8	13,65	-0,745	-1,37	-1,28	
285	LwK 4.8	11,68	-2,715	-4,98	-4,65	
286	LwK 4.8	13,58	-0,815	-1,50	-1,40	
313	LwK 4.8	12,96	-1,435	-2,63	-2,46	
320	LwK 4.8	14,80	0,405	0,74	0,69	
321	LwK 4.8	13,85	-0,545	-1,00	-0,93	
339	LwK 4.8	14,60	0,205	0,38	0,35	
345	LwK 4.8	14,63	0,235	0,43	0,40	
346	LwK 4.8	12,80	-1,595	-2,93	-2,73	
351	LwK 4.8	15,20	0,805	1,48	1,38	
366	LwK 4.8	14,70	0,305	0,56	0,52	
371	LwK 4.8	14,10	-0,295	-0,54	-0,51	

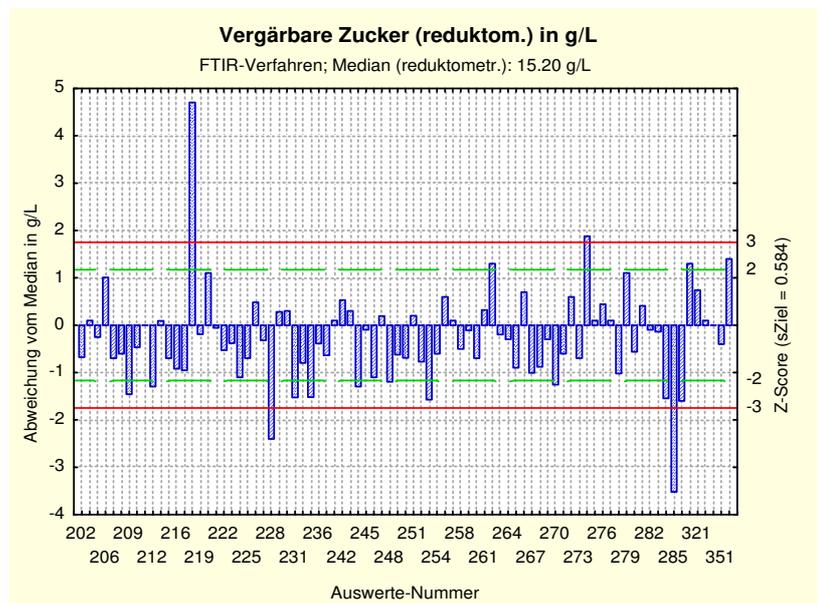
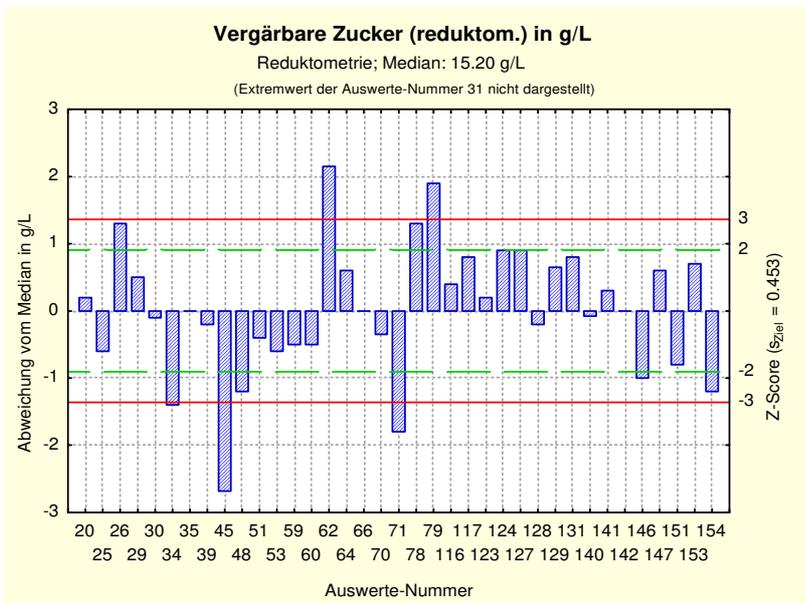
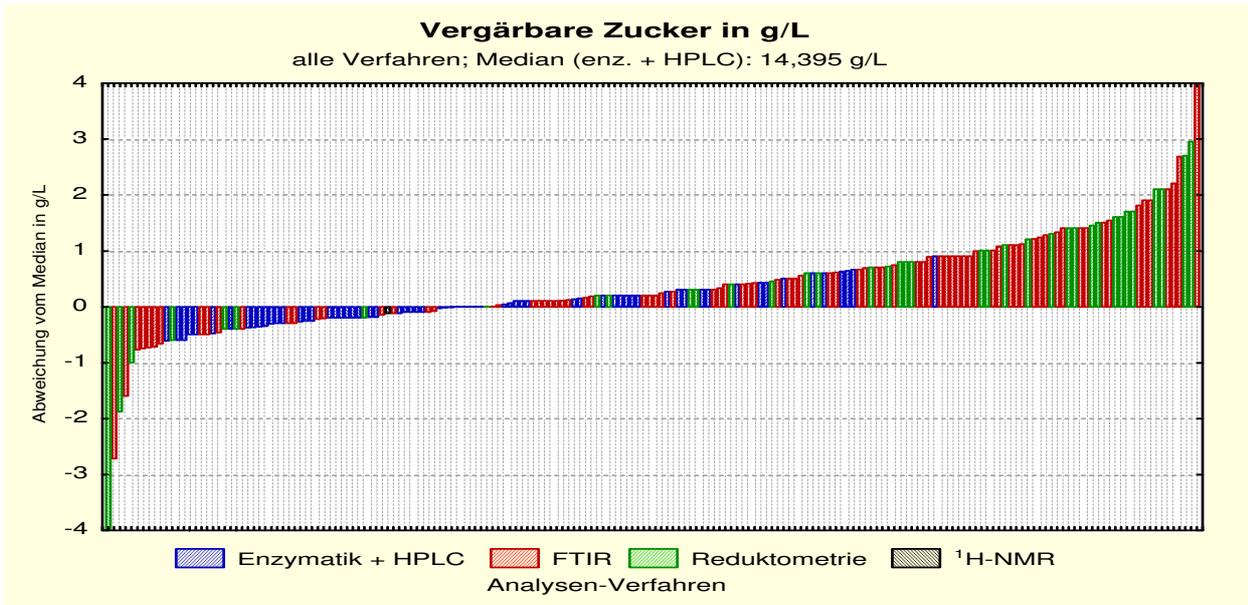
6.8.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

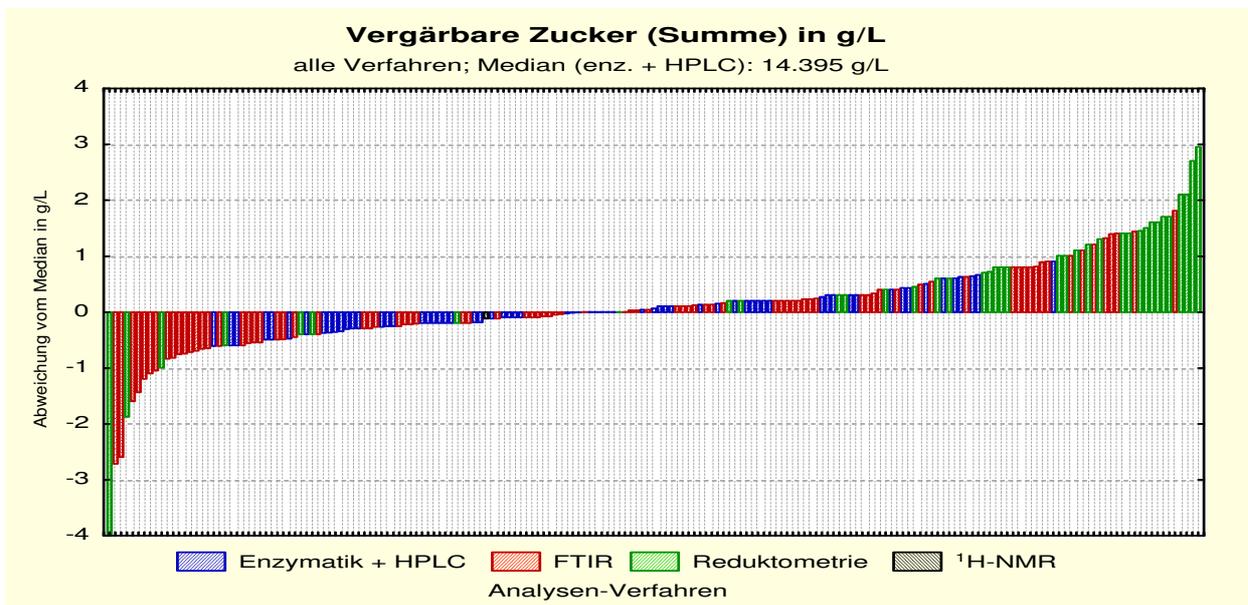
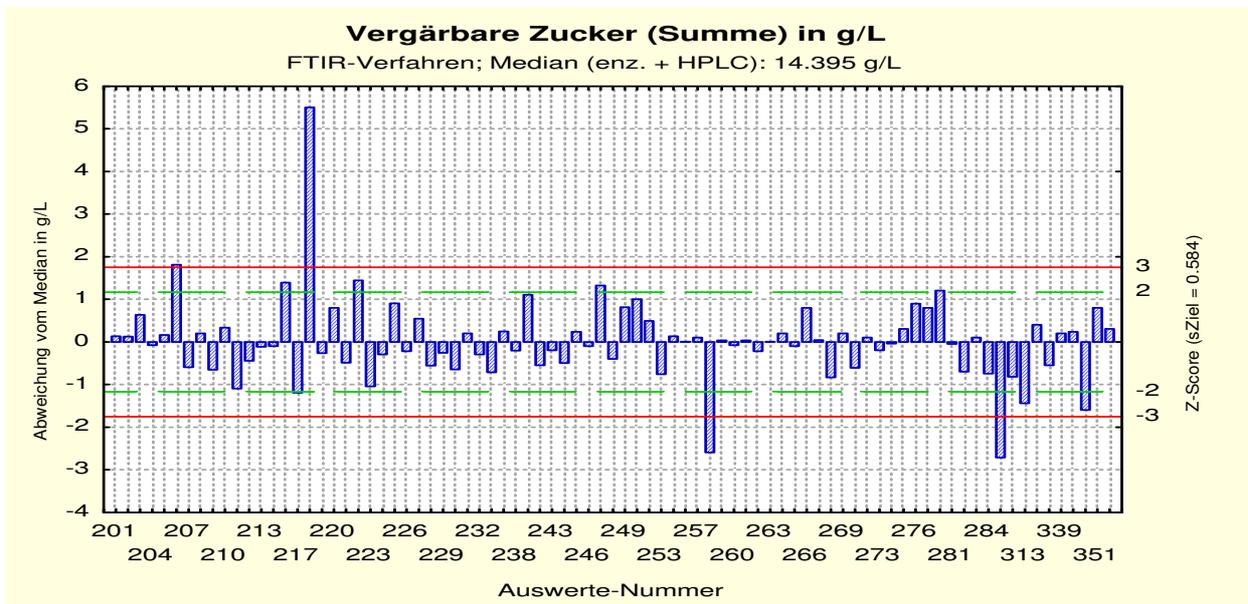
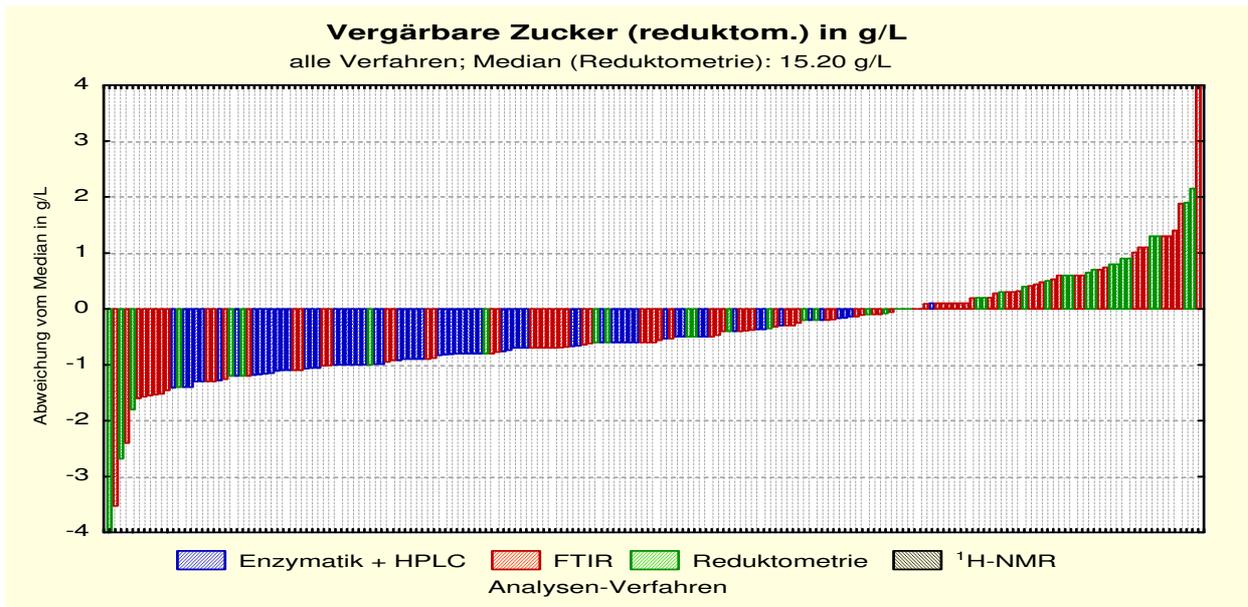
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten		Reduktometrisch alle Daten	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	66	37	37	36
Minimalwert	13,79	12,52	12,52	13,40
Mittelwert	14,402	15,216	15,216	15,291
Median	14,395	15,200	15,200	15,200
Maximalwert	15,30	17,35	17,35	17,35
Standardabweichung (s _L)	0,343	0,989	0,989	0,890
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,042	0,163	0,163	0,148
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,545	0,571	0,571	0,571
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,432	0,453	0,453	0,453
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,584	0,584	0,584	0,584
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,63	1,73	1,73	1,56
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,80	2,18	2,18	1,96
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,59	1,02	1,02	0,74
Quotient (u _M /s _H)	0,08	0,28	0,28	0,26
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,10	0,36	0,36	0,33
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,07	0,28	0,28	0,25

6.8.7 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	3	15,665	0,624
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	4	14,725	0,749
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	30	15,211	1,063
LwK 4.6	Neocuproinmethode	1	15,120	
	reduktometrische Verfahren	38	15,189	0,968
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	40	14,264	0,282
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	26	14,568	0,293
	Enzymatik und HPLC	66	14,392	0,348
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis Reduktometrie)	83	14,899	0,788
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis Summe FTIR-Glucose + FTIR-Fructose)	85	14,405	0,694
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	14,280	







6.9 Gesamtsäure [g/L]

6.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,16	-0,095	-0,41	-0,89	
05	LwK 5.2.1	5,19	-0,065	-0,28	-0,61	
06	LwK 5.1	5,11	-0,145	-0,63	-1,35	
07	LwK 5.1	5,28	0,025	0,11	0,23	
08	LwK 5.2.1	5,35	0,095	0,41	0,89	
12	LwK 5.2.1	5,22	-0,035	-0,15	-0,33	
13	LwK 5.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
14	LwK 5.1	5,37	0,115	0,50	1,07	
15	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
16	LwK 5.2.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
18	LwK 5.2.2	5,50	0,245	1,06	2,29	
19	LwK 5.2.1	5,35	0,095	0,41	0,89	
20	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
21	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
22	LwK 5.1	5,14	-0,115	-0,50	-1,07	
23	LwK 5.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
24	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
26	LwK 5.1	5,22	-0,035	-0,15	-0,33	
27	LwK 5.1	5,26	0,005	0,02	0,05	
28	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
29	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
30	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
32	LwK 5.2.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
33	LwK 5.1	5,24	-0,015	-0,06	-0,14	
34	LwK 5.1	5,50	0,245	1,06	2,29	
35	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
36	LwK 5.2.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
39	LwK 5.1	5,35	0,095	0,41	0,89	
40	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
41	LwK 5.2.1	5,27	0,015	0,06	0,14	
42	LwK 5.1	5,15	-0,105	-0,45	-0,98	
43	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
44	LwK 5.1	5,17	-0,085	-0,37	-0,79	
45	LwK 5.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
46	LwK 5.1	5,26	0,005	0,02	0,05	
47	LwK 5.1	5,21	-0,045	-0,19	-0,42	
48	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
49	LwK 5.1	5,15	-0,105	-0,45	-0,98	
50	LwK 5.1	5,44	0,185	0,80	1,73	
51	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
52	LwK 5.1	5,25	-0,005	-0,02	-0,05	
53	LwK 5.1	5,50	0,245	1,06	2,29	
54	LwK 5.2.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
55	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
57	LwK 5.2.2	5,30	0,045	0,19	0,42	
58	LwK 5.2.1	5,24	-0,015	-0,06	-0,14	
59	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
60	LwK 5.1	5,48	0,225	0,97	2,10	
61	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
62	LwK 5.2.1	5,22	-0,035	-0,15	-0,33	
63	LwK 5.2.2	5,30	0,045	0,19	0,42	
64	LwK 5.1	4,90	-0,355	-1,53	-3,31	
65	LwK 5.2.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
66	LwK 5.1	5,17	-0,085	-0,37	-0,79	
70	LwK 5.1	5,17	-0,085	-0,37	-0,79	
71	LwK 5.1	5,25	-0,005	-0,02	-0,05	
72	LwK 5.2.1	5,31	0,055	0,24	0,51	
78	LwK 5.1	5,48	0,225	0,97	2,10	
79	LwK 5.1	5,31	0,055	0,24	0,51	
83	LwK 5.2.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
90	LwK 5.2.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
100	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
111	LwK 5.2.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
112	LwK 5.1	5,40	0,145	0,63	1,35	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
113	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
114	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
115	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
116	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
117	LwK 5.1	5,00	-0,255	-1,10	-2,38	
118	LwK 5.2.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
119	LwK 5.1	4,90	-0,355	-1,53	-3,31	
120	LwK 5.2.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
121	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
122	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
123	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
124	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
125	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
126	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
127	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
128	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
129	LwK 5.1	5,38	0,125	0,54	1,17	
130	LwK 5.2.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
131	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
132	LwK 5.1	5,33	0,075	0,32	0,70	
133	LwK 5.2.1	5,50	0,245	1,06	2,29	
134	LwK 5.1	5,50	0,245	1,06	2,29	
135	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
136	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
137	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
138	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
139	LwK 5.2.1	5,16	-0,095	-0,41	-0,89	
140	LwK 5.1	5,40	0,145	0,63	1,35	
141	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
142	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
143	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
144	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
145	LwK 5.1	5,32	0,065	0,28	0,61	
146	LwK 5.1	5,00	-0,255	-1,10	-2,38	
147	LwK 5.1	5,10	-0,155	-0,67	-1,45	
148	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
149	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
150	LwK 5.1	5,22	-0,035	-0,15	-0,33	
151	LwK 5.1	5,30	0,045	0,19	0,42	
152	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	
153	LwK 5.1	5,32	0,065	0,28	0,61	
154	LwK 5.1	5,20	-0,055	-0,24	-0,51	

6.9.1 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,21	-0,045	-0,19	-0,31	
202	LwK 5.3	5,27	0,015	0,06	0,10	
203	LwK 5.3	5,16	-0,095	-0,41	-0,66	
204	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
205	LwK 5.3	5,22	-0,035	-0,15	-0,24	
206	LwK 5.3	5,17	-0,085	-0,37	-0,59	
207	LwK 5.3	5,10	-0,155	-0,67	-1,07	
208	LwK 5.3	5,10	-0,155	-0,67	-1,07	
209	LwK 5.3	5,13	-0,125	-0,54	-0,86	
210	LwK 5.3	5,11	-0,145	-0,63	-1,00	
211	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
212	LwK 5.3	5,17	-0,085	-0,37	-0,59	
213	LwK 5.3	5,21	-0,045	-0,19	-0,31	
215	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
216	LwK 5.3	5,51	0,255	1,10	1,76	
217	LwK 5.3	5,11	-0,145	-0,63	-1,00	
218	LwK 5.3	5,01	-0,245	-1,06	-1,69	
219	LwK 5.3	5,27	0,015	0,06	0,10	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
221	LwK 5.3	5,22	-0,035	-0,15	-0,24	
222	LwK 5.3	5,06	-0,195	-0,84	-1,34	
223	LwK 5.3	5,02	-0,235	-1,01	-1,62	
224	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
225	LwK 5.3	5,40	0,145	0,63	1,00	
226	LwK 5.3	5,34	0,085	0,37	0,59	
227	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
228	LwK 5.3	5,00	-0,255	-1,10	-1,76	
229	LwK 5.3	5,40	0,145	0,63	1,00	
230	LwK 5.3	5,40	0,145	0,63	1,00	
231	LwK 5.3	5,05	-0,205	-0,89	-1,41	
232	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
234	LwK 5.3	5,55	0,295	1,27	2,03	
236	LwK 5.3	5,15	-0,105	-0,45	-0,72	
238	LwK 5.3	5,17	-0,085	-0,37	-0,59	
239	LwK 5.3	5,40	0,145	0,63	1,00	
242	LwK 5.3	5,41	0,155	0,67	1,07	
243	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
244	LwK 5.3	5,17	-0,085	-0,37	-0,59	
245	LwK 5.3	5,00	-0,255	-1,10	-1,76	
246	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
247	LwK 5.3	5,46	0,205	0,89	1,41	
248	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
249	LwK 5.3	5,29	0,035	0,15	0,24	
250	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
251	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
252	LwK 5.3	5,15	-0,105	-0,45	-0,72	
253	LwK 5.3	5,41	0,155	0,67	1,07	
254	LwK 5.3	5,60	0,345	1,49	2,38	
256	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
257	LwK 5.3	5,50	0,245	1,06	1,69	
258	LwK 5.3	5,24	-0,015	-0,06	-0,10	
259	LwK 5.3	5,26	0,005	0,02	0,03	
260	LwK 5.3	5,53	0,275	1,19	1,90	
261	LwK 5.3	5,11	-0,145	-0,63	-1,00	
262	LwK 5.3	4,91	-0,345	-1,49	-2,38	
263	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
264	LwK 5.3	5,00	-0,255	-1,10	-1,76	
265	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
266	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
267	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
268	LwK 5.3	5,10	-0,155	-0,67	-1,07	
269	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
270	LwK 5.3	5,13	-0,125	-0,54	-0,86	
271	LwK 5.3	5,22	-0,030	-0,13	-0,21	
272	LwK 5.3	4,90	-0,355	-1,53	-2,45	
273	LwK 5.3	5,60	0,345	1,49	2,38	
274	LwK 5.3	5,18	-0,075	-0,32	-0,52	
275	LwK 5.3	5,00	-0,255	-1,10	-1,76	
276	LwK 5.3	5,17	-0,085	-0,37	-0,59	
277	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
278	LwK 5.3	5,42	0,165	0,71	1,14	
279	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
281	LwK 5.3	5,21	-0,045	-0,19	-0,31	
282	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
283	LwK 5.3	5,54	0,285	1,23	1,97	
284	LwK 5.3	4,90	-0,355	-1,53	-2,45	
285	LwK 5.3	3,43	-1,825	-7,88	-12,59	(**)
286	LwK 5.3	5,10	-0,155	-0,67	-1,07	
313	LwK 5.3	5,32	0,065	0,28	0,45	
320	LwK 5.3	5,20	-0,055	-0,24	-0,38	
321	LwK 5.3	5,25	-0,005	-0,02	-0,03	
339	LwK 5.3	5,40	0,145	0,63	1,00	
345	LwK 5.3	5,34	0,085	0,37	0,59	
346	LwK 5.3	5,60	0,345	1,49	2,38	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

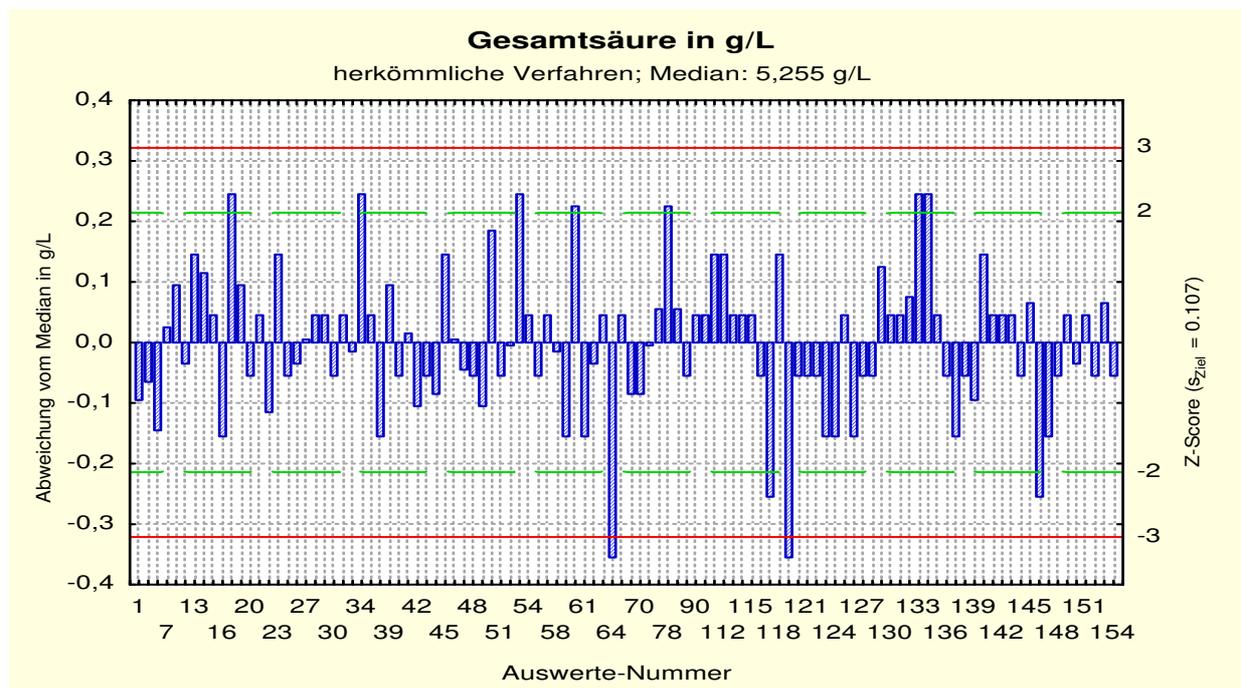
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
351	LwK 5.3	5,10	-0,155	-0,67	-1,07	
366	LwK 5.3	5,30	0,045	0,19	0,31	
371	LwK 5.3	5,00	-0,255	-1,10	-1,76	

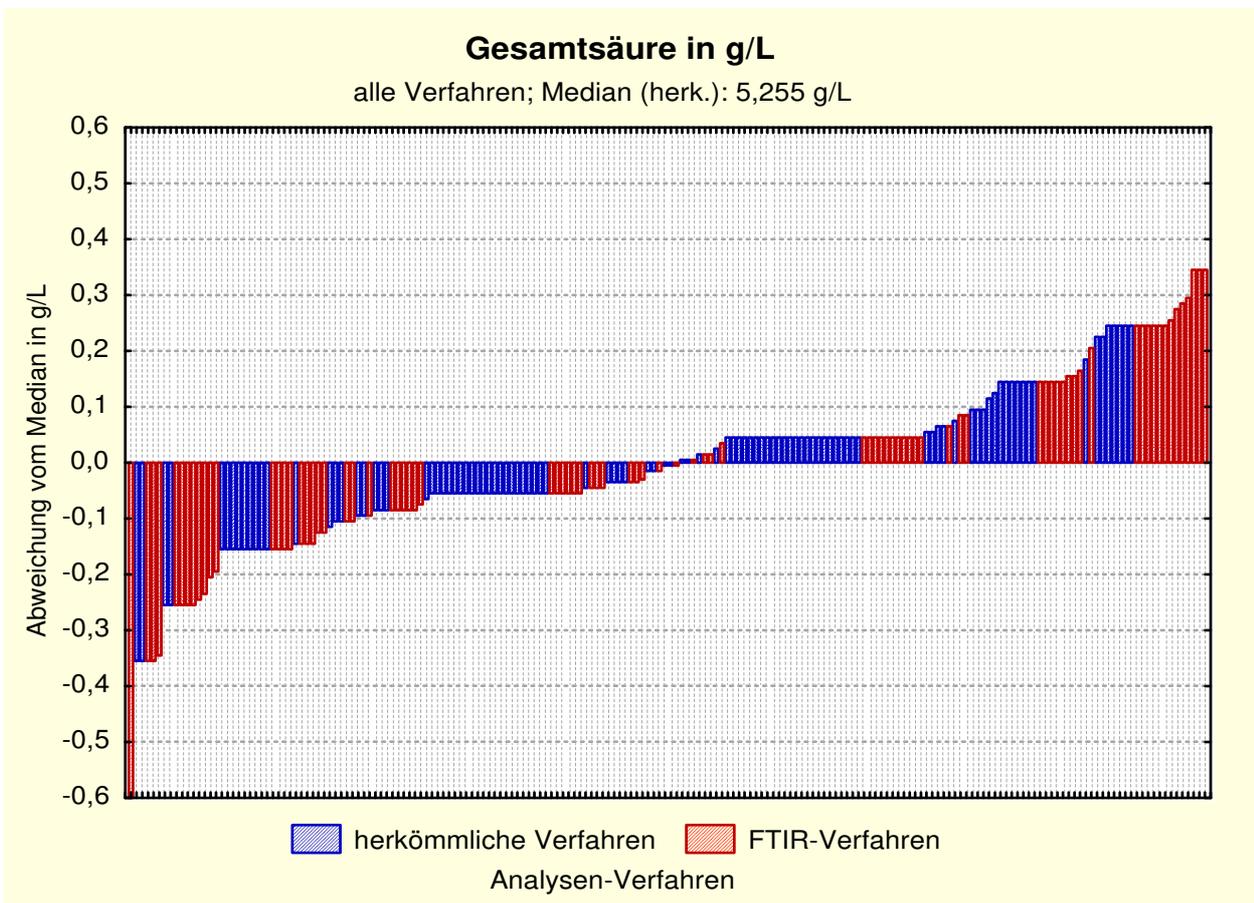
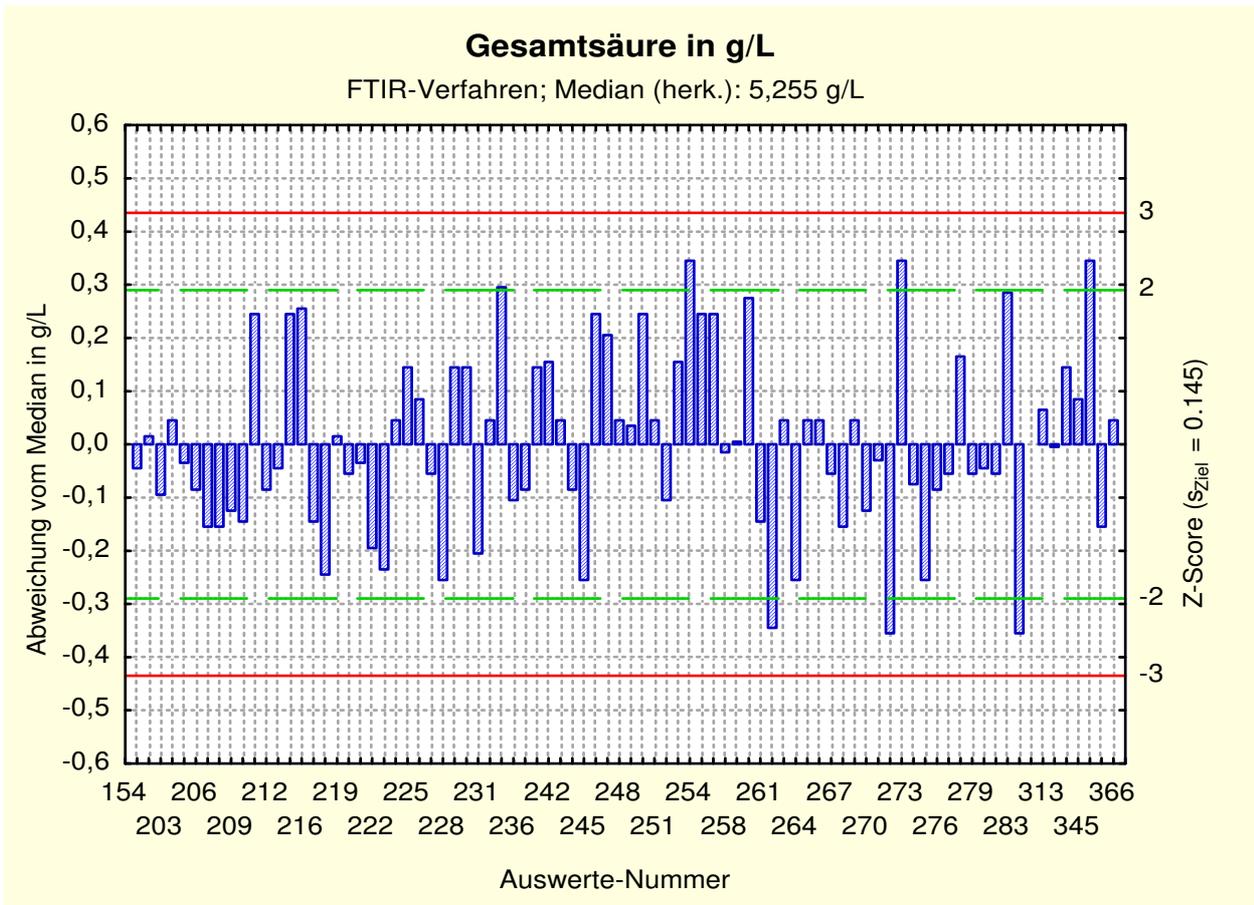
6.9.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	106
Minimalwert	4,90
Mittelwert	5,254
Median	5,255
Maximalwert	5,50
Standardabweichung (s _L)	0,119
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,232
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,145
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,51
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,11
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,82
Quotient (u _M /s _H)	0,05
Quotient (u _M / s _{exp herk.})	0,11
Quotient (u _M / s _{Ü FTIR})	0,08

6.9.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	81	5,247	0,109
LwK 5.2.1	Potentiometrische Bestimmung; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	22	5,264	0,102
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	3	5,365	0,129
	Herkömmliche Verfahren	106	5,253	0,108
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	5,251	0,179





6.10 Reduktone [mg/L]**6.10.1 Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
06	Acetaldehyd/potent.	30	3,0	-15,00	-8,05	(*)
13	Glyoxal/potentiometr.	10	19,0	1,00	0,54	
14	Glyoxal/potentiometr.	20	17,2	-0,80	-0,43	
15	Glyoxal/potentiometr.	12	16,0	-2,00	-1,07	
16	Glyoxal/Stärke	5	21,0	3,00	1,61	
17	Propionaldehyd/Stärke	5	23,0	5,00	2,68	
18	Glyoxal/Stärke	5	26,0	8,00	4,29	
19	Glyoxal/potentiometr.	30	20,4	2,40	1,29	
20	Glyoxal/Stärke	15	11,0	-7,00	-3,76	
21	Glyoxal/Stärke	8	20,0	2,00	1,07	
22	Glyoxal/potentiometr.	10	11,0	-7,00	-3,76	
23	Glyoxal/potentiometr.	15	23,0	5,00	2,68	
24	Glyoxal/Stärke	7	18,0	0,00	0,00	
25	Glyoxal/Stärke	10	20,0	2,00	1,07	
26	Glyoxal/Stärke	5	6,3	-11,70	-6,28	(*)
27	Glyoxal/potentiometr.	20	14,7	-3,31	-1,78	
28	Propionaldehyd/Stärke	5	18,0	0,00	0,00	
30	Glyoxal/Stärke	5	31,0	13,00	6,97	(*)
31	Glyoxal/Stärke	5	15,0	-3,00	-1,61	
32	Glyoxal/Stärke	30	24,0	6,00	3,22	
33	Glyoxal/potentiometr.	12	5,0	-13,00	-6,97	(*)
34	Propionaldehyd/Stärke	10	22,0	4,00	2,15	
35	Glyoxal/potentiometr.	15	17,0	-1,00	-0,54	
36	Glyoxal/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
38	Glyoxal/Stärke	15	15,0	-3,00	-1,61	
39	Glyoxal/potentiometr.	10	26,0	8,00	4,29	
40	Glyoxal/potentiometr.	7	23,0	5,00	2,68	
41	Glyoxal/potentiometr.	10	15,4	-2,60	-1,39	
42	Glyoxal/Stärke	15	13,0	-5,00	-2,68	
43	Glyoxal/Stärke	10	17,0	-1,00	-0,54	
44	Glyoxal/Stärke	15	21,0	3,00	1,61	
45	Glyoxal/Stärke	10	15,0	-3,00	-1,61	
46	Glyoxal/potentiometr.	12	17,0	-1,02	-0,55	
47	Propionaldehyd/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
48	Glyoxal/Stärke	5	19,0	1,00	0,54	
51	Glyoxal/Stärke	10	11,0	-7,00	-3,76	
52	Glyoxal/potentiometr.	5	20,0	2,00	1,07	
53	Glyoxal/Stärke	10	12,0	-6,00	-3,22	
54	Propionaldehyd/Stärke	5	5,0	-13,00	-6,97	(*)
56	Glyoxal/Stärke	5	17,0	-1,00	-0,54	
58	Glyoxal/MTT	15	9,0	-9,00	-4,83	
60	Glyoxal/potentiometr.	5	20,0	2,00	1,07	
62	Glyoxal/potentiometr.	5	17,0	-1,00	-0,54	
63	Glyoxal/Stärke	5	24,0	6,00	3,22	
64	Glyoxal/potentiometr.	5	40,0	22,00	11,80	(*)
66	Glyoxal/Stärke	5	24,0	6,00	3,22	
67	Glyoxal/Stärke	5	29,0	11,00	5,90	(*)
68	Glyoxal/potentiometr.	5	19,0	1,00	0,54	
71	Glyoxal/potentiometr.	10	16,0	-2,00	-1,07	
72	Glyoxal/potentiometr.	2,5	15,0	-3,00	-1,61	
75	Glyoxal/potentiometr.	5	28,0	10,00	5,36	(*)
77	Glyoxal/potentiometr.	8	32,0	14,00	7,51	(*)
78	Glyoxal/potentiometr.	5	26,0	8,00	4,29	
79	Acetaldehyd/Stärke	5	31,0	13,00	6,97	(*)
83	Glyoxal/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
96	Glyoxal/Stärke	8	20,0	2,00	1,07	
100	Glyoxal/Stärke	10	14,0	-4,00	-2,15	
109	Glyoxal/potentiometr.	5	18,0	0,00	0,00	
111	Glyoxal/potentiometr.	10	24,0	6,00	3,22	
112	Acetaldehyd/Stärke	10	18,0	0,00	0,00	
113	Glyoxal/potentiometr.	10	10,0	-8,00	-4,29	
114	Propionaldehyd/Stärke	5	23,0	5,00	2,68	

(*) Diese Werte wurden wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse

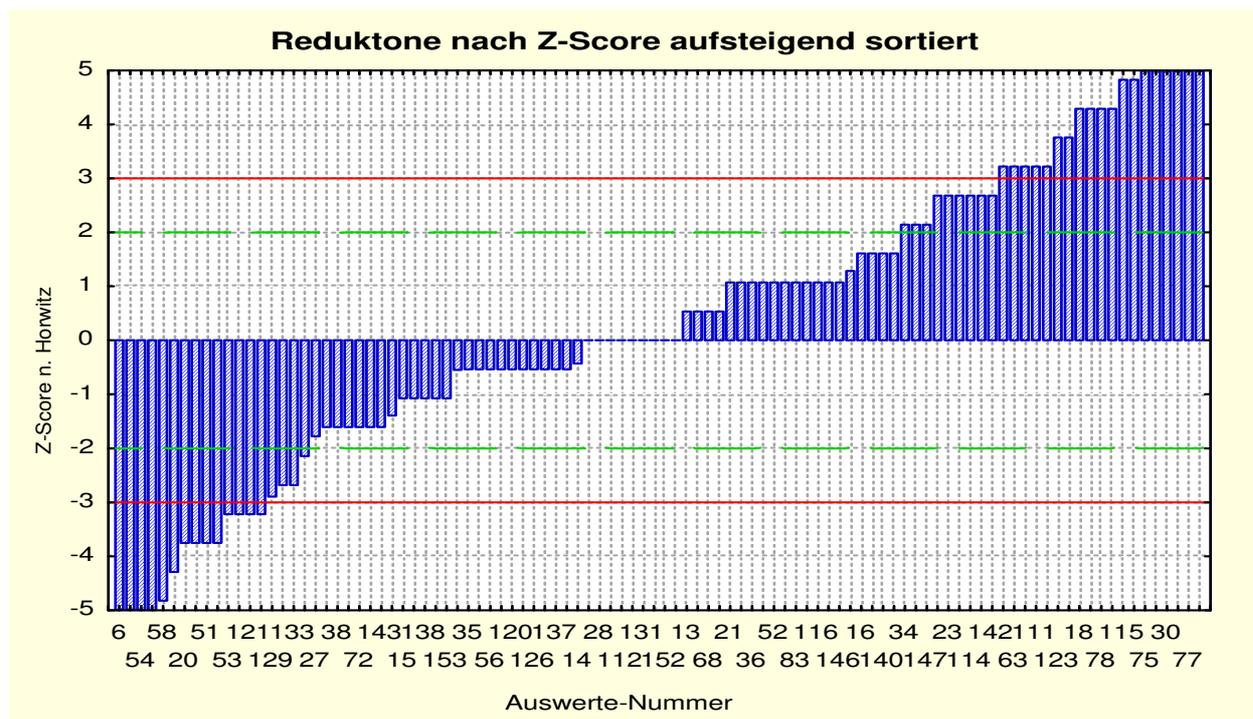
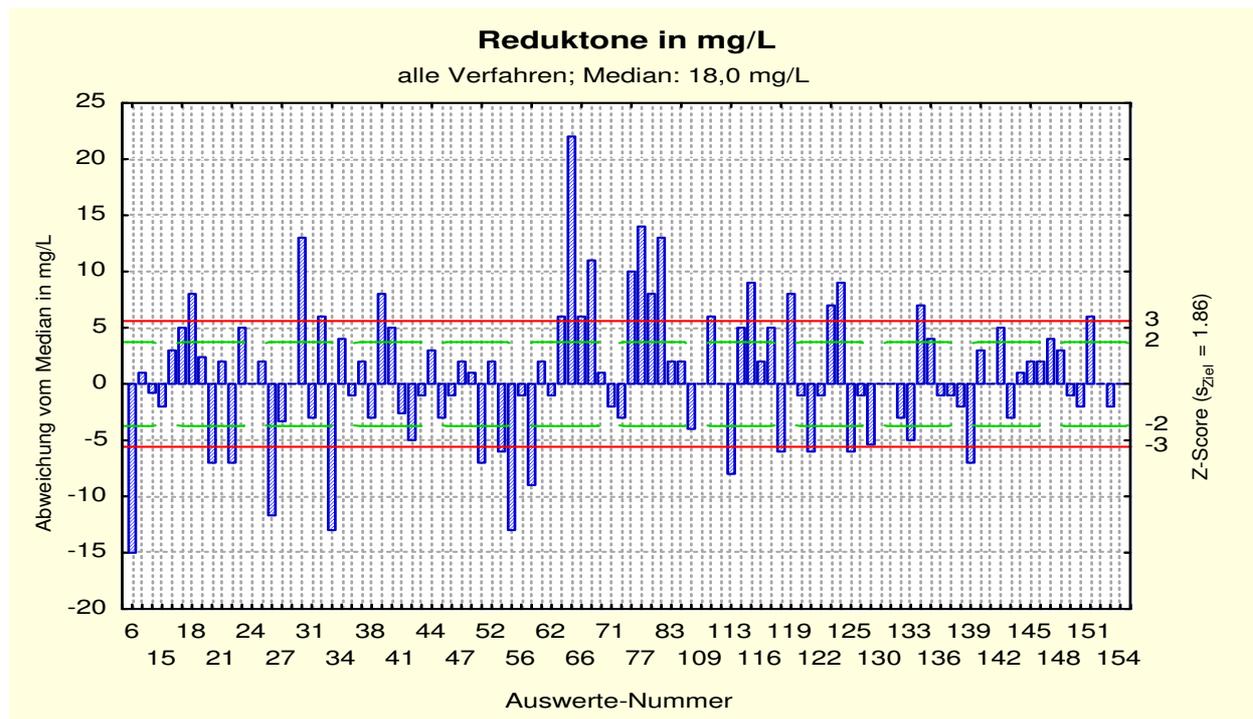
Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
115	Glyoxal/Stärke	5	27,0	9,00	4,83	
116	Glyoxal/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
117	Glyoxal/Stärke	10	23,0	5,00	2,68	
118	Glyoxal/potentiometr.	10	12,0	-6,00	-3,22	
119	Propionaldehyd/Stärke	5	26,0	8,00	4,29	
120	Glyoxal/Stärke	5	17,0	-1,00	-0,54	
121	Glyoxal/potentiometr.	10	12,0	-6,00	-3,22	
122	Glyoxal/potentiometr.	5	17,0	-1,00	-0,54	
123	Propionaldehyd/Stärke	5	25,0	7,00	3,76	
124	Acetaldehyd/Stärke	10	27,0	9,00	4,83	
125	Glyoxal/potentiometr.	10	12,0	-6,00	-3,22	
126	Propionaldehyd/Stärke	5	17,0	-1,00	-0,54	
129	Glyoxal/Stärke	5	12,6	-5,40	-2,90	
130	Glyoxal/Stärke	10	18,0	0,00	0,00	
131	Propionaldehyd/Stärke	10	18,0	0,00	0,00	
132	Glyoxal/potentiometr.	17	15,0	-3,00	-1,61	
133	Glyoxal/potentiometr.	10	13,0	-5,00	-2,68	
134	Glyoxal/Stärke	10	25,0	7,00	3,76	
135	Glyoxal/Stärke	5	22,0	4,00	2,15	
136	Glyoxal/potentiometr.	5	17,0	-1,00	-0,54	
137	Propionaldehyd/Stärke	15	17,0	-1,00	-0,54	
138	Propionaldehyd/potent.	10	16,0	-2,00	-1,07	
139	Glyoxal/potentiometr.	10	11,0	-7,00	-3,76	
140	Propionaldehyd/Stärke	7	21,0	3,00	1,61	
141	Glyoxal/Stärke	10	18,0	0,00	0,00	
142	Glyoxal/Stärke	5	23,0	5,00	2,68	
143	Glyoxal/potentiometr.	10	15,0	-3,00	-1,61	
144	Propionaldehyd/Stärke	5	19,0	1,00	0,54	
145	Glyoxal/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
146	Propionaldehyd/Stärke	5	20,0	2,00	1,07	
147	Glyoxal/Stärke	5	22,0	4,00	2,15	
148	Glyoxal/Stärke	25	21,0	3,00	1,61	
149	Glyoxal/potentiometr.	12	17,0	-1,00	-0,54	
150	Glyoxal/Stärke	5	16,0	-2,00	-1,07	
151	Propionaldehyd/Stärke	5	24,0	6,00	3,22	
152	Glyoxal/potentiometr.	5	18,0	0,00	0,00	
153	Glyoxal/Stärke	5	16,0	-2,00	-1,07	
154	Glyoxal/potentiometr.	25	18,0	0,00	0,00	

6.10.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone in mg/L	alle Daten
Gültige Werte	90
Minimalwert	9,0
Mittelwert	18,47
Median	18,00
Maximalwert	27,0
Standardabweichung (s _L)	4,302
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,454
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,864
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,31
Quotient (s _L /s _{exp})	
Quotient (u _M /s _H)	0,24
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	

6.10.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	3	25,37	7,49
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	3,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	14	20,56	3,85
Propionaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Platinelektrode	1	16,00	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	40	19,43	4,87
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	40	17,30	4,96
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Farbreaktion mit MTT	1	9,00	
alle Verfahren		100	18,66	5,38



6.11 Freie Schweflige Säure [mg/L]

6.11.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	70,0	16,50	3,51	
06	LwK 6.2	52,7	-0,80	-0,17	
07	LwK 6.2	60,0	6,50	1,38	
12	LwK 6.2	59,2	5,70	1,21	
29	LwK 6.2	59,4	5,90	1,25	
49	LwK 6.3	71,0	17,50	3,72	
50	LwK 6.3	42,0	-11,50	-2,45	
55	LwK 6.3	42,0	-11,50	-2,45	
57	LwK 6.4	42,0	-11,50	-2,45	
58	LwK 6.4	54,7	1,20	0,26	
59	LwK 6.4	63,0	9,50	2,02	
70	LwK 6.4	45,0	-8,50	-1,81	
91	LwK 6.2 m	69,1	15,62	3,32	
95	LwK 6.2	63,2	9,70	2,06	
104	LwK 6.3	35,0	-18,50	-3,93	
106	LwK 6.2	56,7	3,20	0,68	
107	LwK 6.3	52,6	-0,90	-0,19	
111	LwK 6.3	42,0	-11,50	-2,45	
138	LwK 6.3	39,0	-14,50	-3,08	
206	LwK 6.5	52,0	-1,50	-0,32	
207	LwK 6.5	60,0	6,50	1,38	
210	LwK 6.5	58,2	4,70	1,00	
219	LwK 6.5	58,0	4,50	0,96	
226	LwK 6.5	58,0	4,50	0,96	
239	LwK 6.5	54,0	0,50	0,11	(***)
253	LwK 6.5	51,0	-2,50	-0,53	
254	LwK 6.5	53,0	-0,50	-0,11	
260	LwK 6.5	69,0	15,50	3,30	
264	LwK 6.5	34,0	-19,50	-4,15	
265	LwK 6.5	54,0	0,50	0,11	
270	LwK 6.5	52,0	-1,50	-0,32	
273	LwK 6.5	52,0	-1,50	-0,32	
320	LwK 6.5	59,0	5,50	1,17	
339	LwK 6.5	40,0	-13,50	-2,87	
351	LwK 6.5	63,0	9,50	2,02	
366	LwK 6.5	52,0	-1,50	-0,32	

LwK 6.5 = FTIR in der Gasphase

6.11.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	57,0	-1,15	-0,23	
13	LwK 6.1(incl.Red.)	52,0	-6,15	-1,22	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	53,1	-5,05	-1,00	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	55,0	-3,15	-0,62	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	57,0	-1,15	-0,23	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	-2,15	-0,43	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	-17,15	-3,40	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	54,0	-4,15	-0,82	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
26	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	-2,15	-0,43	
27	LwK 6.1(incl.Red.)	57,8	-0,34	-0,07	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

Die ursprüngliche Angabe erfolgte fehlerhaft, da die Mitteilung einschließlich Reduktone aufgegeben war.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	63,0	4,85	0,96	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	-13,15	-2,61	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	22,0	-36,15	-7,16	(*)
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	2,85	0,56	
33	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	-7,15	-1,42	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
35	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	-9,15	-1,81	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	-7,15	-1,42	
39	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,5	-7,65	-1,52	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
43	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,5	2,35	0,47	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	68,0	9,85	1,95	
45	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,0	-3,15	-0,62	
46	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,4	1,23	0,24	
47	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
48	LwK 6.1 (incl.Red.)	63,0	4,85	0,96	
51	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	2,85	0,56	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	54,0	-4,15	-0,82	
53	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-2,15	-0,43	
56	LwK 6.1 (incl.Red.)	53,0	-5,15	-1,02	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
61	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	-8,15	-1,61	
62	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-2,15	-0,43	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	7,85	1,56	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	66,0	7,85	1,56	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	69,0	10,85	2,15	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	69,0	10,85	2,15	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
71	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	-12,15	-2,41	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	72,0	13,85	2,74	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
79	LwK 6.1 (incl.Red.)	67,0	8,85	1,75	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
100	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	-13,15	-2,61	
109	Redox	58,0	-0,15	-0,03	
112	LwK 6.1 (incl.Red.)	56,0	-2,15	-0,43	
113	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
114	LwK 6.1 (incl.Red.)	65,0	6,85	1,36	
115	LwK 6.1 (incl.Red.)	72,0	13,85	2,74	
116	LwK 6.1 (incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
117	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
118	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	-9,15	-1,81	
119	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,0	-3,15	-0,62	
120	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
121	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	-7,15	-1,42	
122	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	-12,15	-2,41	
123	LwK 6.1 (incl.Red.)	59,0	0,85	0,17	
124	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	-19,15	-3,79	
125	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
126	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	-7,15	-1,42	
127	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	-12,15	-2,41	
128	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	-8,15	-1,61	
129	LwK 6.1 (incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
130	LwK 6.1 (incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
131	LwK 6.1 (incl.Red.)	63,0	4,85	0,96	
132	LwK 6.1 (incl.Red.)	55,0	-3,15	-0,62	

(*) Wert wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

Die ursprüngliche Angabe war fehlerhaft, da die Mitteilung einschließlich Reduktone aufgegeben war.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren inklusive Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
133	LwK 6.1(incl.Red.)	55,0	-3,15	-0,62	
134	LwK 6.1(incl.Red.)	61,0	2,85	0,56	
135	LwK 6.1(incl.Red.)	80,0	21,85	4,33	
136	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
137	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
139	LwK 6.1(incl.Red.)	58,3	0,15	0,03	
140	LwK 6.1(incl.Red.)	61,0	2,85	0,56	
141	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
142	LwK 6.1(incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
143	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	-16,15	-3,20	
144	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
145	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	5,85	1,16	
146	LwK 6.1(incl.Red.)	65,0	6,85	1,36	
147	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
148	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
149	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	9,85	1,95	
150	LwK 6.1(incl.Red.)	62,0	3,85	0,76	
151	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
152	LwK 6.1(incl.Red.)	58,0	-0,15	-0,03	
153	LwK 6.1(incl.Red.)	60,0	1,85	0,37	
154	LwK 6.1(incl.Red.)	63,0	4,85	0,96	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

Die ursprüngliche Angabe war fehlerhaft, da die Mitteilung einschließlich Reduktone aufgegeben war.

6.11.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren exclusive Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
13	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	-7,00	-1,91	-1,39	
14	LwK 6.1(excl.Red.)	35,9	-4,10	-1,12	-0,81	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
16	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
17	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	-7,00	-1,91	-1,39	
18	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	-7,00	-1,91	-1,39	
20	LwK 6.1(excl.Red.)	47,0	7,00	1,91	1,39	
21	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	-0,40	
22	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	-10,00	-2,72	-1,98	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	49,7	9,70	2,64	1,92	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	43,1	3,12	0,85	0,62	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
30	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-26,00	-7,08	-5,15	(*)
31	LwK 6.1(excl.Red.)	7,0	-33,00	-8,98	-6,54	(*)
32	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	-0,59	
33	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	6,00	1,63	1,19	
34	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
35	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	-8,00	-2,18	-1,58	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	-0,40	
38	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	-1,19	
40	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	-0,59	
41	LwK 6.1(excl.Red.)	35,1	-4,90	-1,33	-0,97	
42	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	43,5	3,50	0,95	0,69	
44	LwK 6.1(excl.Red.)	47,0	7,00	1,91	1,39	
45	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
46	LwK 6.1(excl.Red.)	42,4	2,40	0,65	0,48	
47	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
48	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	4,00	1,09	0,79	
51	LwK 6.1(excl.Red.)	50,0	10,00	2,72	1,98	

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

(*) Werte wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren excl. Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
52	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	-1,19	
53	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	8,00	2,18	1,58	
54	LwK 6.1(excl.Red.)	51,0	11,00	2,99	2,18	
56	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
60	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	2,00	0,54	0,40	
61	LwK 6.1(excl.Red.)	-50,0	-90,00	-24,50	-17,83	(*)
62	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
63	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	2,00	0,54	0,40	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-14,00	-3,81	-2,77	
66	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
71	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	6,00	1,63	1,19	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	-9,00	-2,45	-1,78	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	-10,00	-2,72	-1,98	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
78	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	-7,00	-1,91	-1,39	
79	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
83	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	-0,40	
100	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	-9,00	-2,45	-1,78	
109	Redox excl.	40,0	0,00	0,00	0,00	
112	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	-0,40	
113	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	9,00	2,45	1,78	
114	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	2,00	0,54	0,40	
115	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
116	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-2,00	-0,54	-0,40	
117	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	-0,59	
118	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	-0,59	
119	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	-11,00	-2,99	-2,18	
120	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	2,00	0,54	0,40	
121	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	-1,00	-0,27	-0,20	
122	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	-11,00	-2,99	-2,18	
123	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	-1,19	
124	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	-28,00	-7,62	-5,55	(*)
125	LwK 6.1(excl.Red.)	50,0	10,00	2,72	1,98	
126	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	-1,19	
129	LwK 6.1(excl.Red.)	47,4	7,40	2,01	1,47	
130	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	4,00	1,09	0,79	
131	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
132	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
133	LwK 6.1(excl.Red.)	42,0	2,00	0,54	0,40	
134	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
135	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	18,00	4,90	3,57	
136	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	1,00	0,27	0,20	
137	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	1,00	0,27	0,20	
139	LwK 6.1(excl.Red.)	47,3	7,30	1,99	1,45	
140	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
141	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
142	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	-3,00	-0,82	-0,59	
143	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-13,00	-3,54	-2,58	
144	LwK 6.1(excl.Red.)	43,0	3,00	0,82	0,59	
145	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	4,00	1,09	0,79	
146	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	
147	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	-4,00	-1,09	-0,79	
148	LwK 6.1(excl.Red.)	41,0	1,00	0,27	0,20	
149	LwK 6.1(excl.Red.)	51,0	11,00	2,99	2,18	
150	LwK 6.1(excl.Red.)	46,0	6,00	1,63	1,19	
151	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	-6,00	-1,63	-1,19	
152	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	0,00	0,00	0,00	
153	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	4,00	1,09	0,79	
154	LwK 6.1(excl.Red.)	45,0	5,00	1,36	0,99	

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

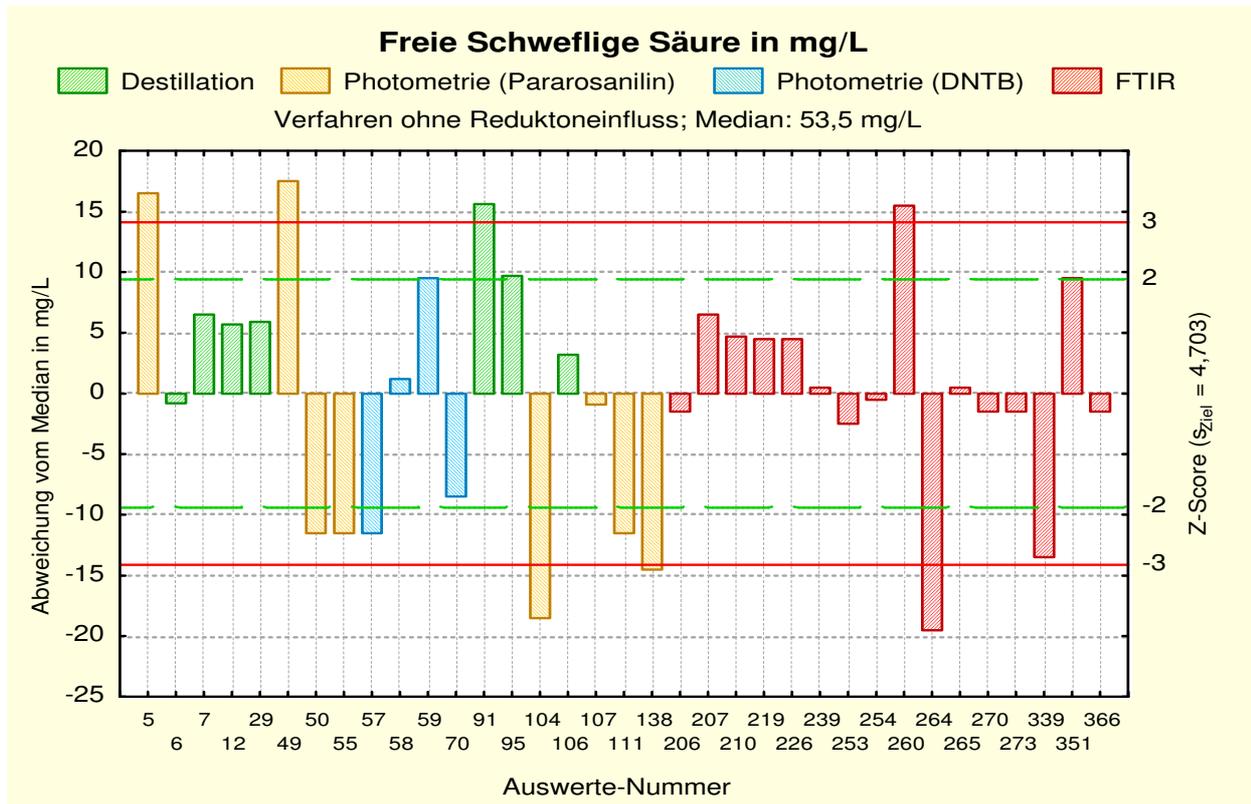
(*) Werte wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

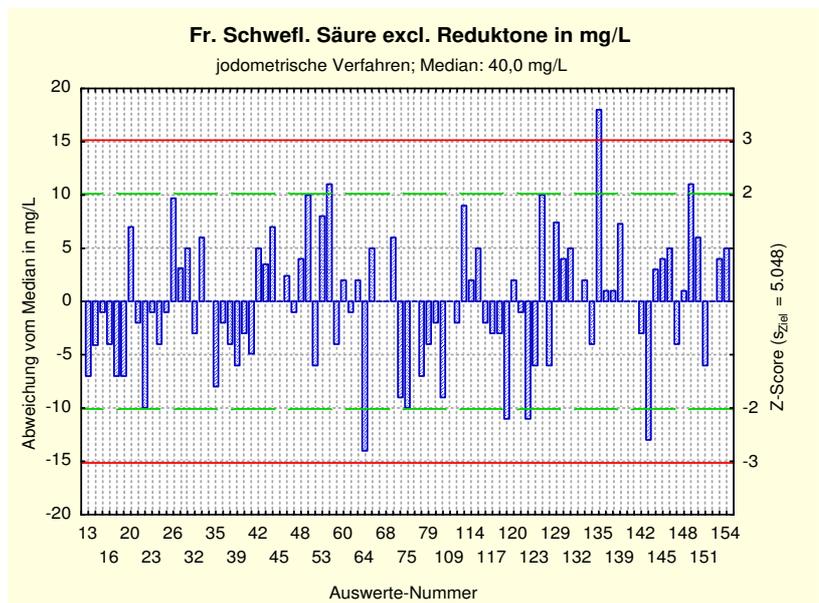
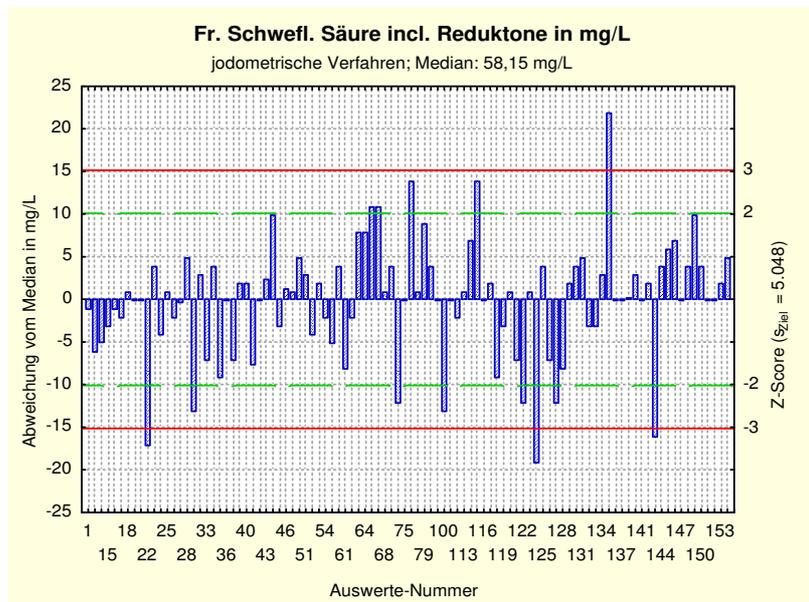
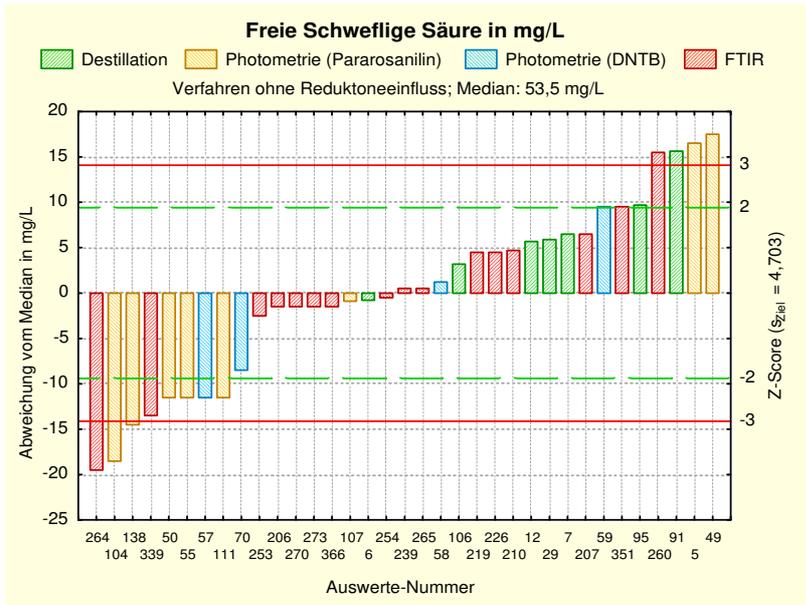
6.11.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	18	34	98	91
Minimalwert	35,0	34,0	39,0	26,0
Mittelwert	52,75	53,23	58,01	39,87
Median	53,70	53,50	58,15	40,00
Maximalwert	71,0	71,0	80,0	58,0
Standardabweichung (s_L)	10,925	9,615	6,738	6,009
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	2,575	1,649	0,681	0,630
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	4,717	4,703	5,048	3,673
- n. Horwitz incl. Reduktone (s_H incl. Red.)				5,048
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,32	2,04	1,33	1,64
Quotient (s_L/s_{exp})				1,19
Quotient (u_M/s_H)	0,55	0,35	0,13	0,17
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)				0,12

6.11.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1 (incl. Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	98	58,06	5,96
Redox (excl. Red.)	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone mit Abzug der Reduktone	1	58,00	
		95	39,37	6,51
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	6	58,50	3,93
LwK 6.2 m	- modifiziert: 10 ml Probe, 5ml 15%ige Phosphorsäure	1	69,12	
LwK 6.3	Pararosanilimethode (auch automatisiert)	8	48,73	15,00
LwK 6.4	photometrisch mit DNTB (auch automatisiert)	4	51,17	10,85
	Destillations- und photometrische Verfahren (ohne LwK 6.2m)	18	57,75	12,39
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	16	54,45	5,94
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren (o. LwK 6.2m)	34	53,33	10,15





6.12 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

6.12.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren (jodometr. Ergebnisse incl. Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	132,0	-15,50	-1,39	-2,89	
04	LwK 7.3	176,3	28,80	2,59	5,38	(**)
05	LwK 7.7	157,0	9,50	0,85	1,77	
06	LwK 7.3	152,0	4,50	0,40	0,84	
07	LwK 7.3	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
09	LwK 7.3	146,9	-0,60	-0,05	-0,11	
12	LwK 7.3	145,6	-1,90	-0,17	-0,35	
13	LwK 7.3	137,0	-10,50	-0,94	-1,96	
14	LwK 7.4.2	150,0	2,50	0,22	0,47	
15	LwK 7.4.2	144,0	-3,50	-0,31	-0,65	
16	LwK 7.4.1	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	-7,50	-0,67	-1,40	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	-7,50	-0,67	-1,40	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
21	LwK 7.4.2	150,0	2,50	0,22	0,47	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	161,0	13,50	1,21	2,52	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	166,0	18,50	1,66	3,45	
24	LwK 7.4.2m	154,0	6,50	0,58	1,21	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,0	-3,50	-0,31	-0,65	
27	LwK 7.4.2	156,0	8,50	0,76	1,59	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	-13,50	-1,21	-2,52	
29	LwK 7.3	167,3	19,80	1,78	3,70	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	-64,50	-5,80	-12,04	(**)
32	LwK 7.4.1	148,0	0,50	0,04	0,09	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	153,0	5,50	0,49	1,03	
34	LwK 7.5.2(incl. Red.)	165,0	17,50	1,57	3,27	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	159,0	11,50	1,03	2,15	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	10,50	0,94	1,96	
39	LwK 7.4.1	138,0	-9,50	-0,85	-1,77	
40	LwK 7.7	150,0	2,50	0,22	0,47	
41	LwK 7.4.2	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
42	LwK 7.4.1	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,5	-9,00	-0,81	-1,68	
44	LwK 7.4.2	153,0	5,50	0,49	1,03	
45	LwK 7.5.3(incl. Red.)	138,0	-9,50	-0,85	-1,77	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	157,1	9,64	0,87	1,80	
47	LwK 7.4.2	149,0	1,50	0,13	0,28	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	160,0	12,50	1,12	2,33	
49	LwK 7.4.2	139,0	-8,50	-0,76	-1,59	
50	LwK 7.7	150,0	2,50	0,22	0,47	
51	LwK 7.4.2	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
52	LwK 7.4.2	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
53	LwK 7.5.1(incl. Red.)	141,0	-6,50	-0,58	-1,21	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,0	-17,50	-1,57	-3,27	
55	LwK 7.4.1	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
56	LwK 7.4.2	148,0	0,50	0,04	0,09	
57	LwK 7.7	129,0	-18,50	-1,66	-3,45	
58	LwK 7.7	146,1	-1,40	-0,13	-0,26	
59	LwK 7.4.2	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
60	LwK 7.4.2	144,0	-3,50	-0,31	-0,65	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,2	14,70	1,32	2,74	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,0	-10,50	-0,94	-1,96	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	3,50	0,31	0,65	
66	LwK 7.4.2	152,0	4,50	0,40	0,84	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	

Rot eingetragene Werte wurden vom Auswerter auf den angeforderten Wert einschließlich der Reduktone geändert.
Mit (**) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.
Derartige Ergebnisse von Destillationsverfahren wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	-12,50	-1,12	-2,33	
70	LwK 7.4.2	166,0	18,50	1,66	3,45	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	156,0	8,50	0,76	1,59	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	3,50	0,31	0,65	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	4,50	0,40	0,84	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	142,0	-5,50	-0,49	-1,03	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,8	-2,70	-0,24	-0,50	
79	LwK 7.4.1	147,0	-0,50	-0,04	-0,09	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	184,0	36,50	3,28	6,81	(**)
91	LwK 7.3 m	160,6	13,14	1,18	2,45	
92	LwK 7.4.2	153,0	5,50	0,49	1,03	
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,2	6,70	0,60	1,25	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	127,0	-20,50	-1,84	-3,83	
95	LwK 7.3	146,5	-1,00	-0,09	-0,19	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	0,50	0,04	0,09	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,7	7,19	0,65	1,34	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
100	LwK 7.4.2	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
101	LwK 7.4.2	148,0	0,50	0,04	0,09	
104	LwK 7.6	142,0	-5,50	-0,49	-1,03	
105	LwK 7.7	147,0	-0,50	-0,04	-0,09	
106	LwK 7.3	157,2	9,70	0,87	1,81	
107	LwK 7.6	157,3	9,80	0,88	1,83	
109	Redox (incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
111	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	14,50	1,30	2,71	
112	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,0	6,50	0,58	1,21	
113	LwK 7.5.2(incl. Red.)	158,0	10,50	0,94	1,96	
114	LwK 7.3	154,0	6,50	0,58	1,21	
115	LwK 7.5.1(incl. Red.)	147,0	-0,50	-0,04	-0,09	
116	LwK 7.5.2(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	
117	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	2,50	0,22	0,47	
118	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	3,50	0,31	0,65	
119	LwK 7.5.1(incl. Red.)	149,0	1,50	0,13	0,28	
120	LwK 7.4.2	151,0	3,50	0,31	0,65	
121	LwK 7.4.2	155,0	7,50	0,67	1,40	
122	LwK 7.5.2(incl. Red.)	147,0	-0,50	-0,04	-0,09	
123	LwK 7.3m2	139,0	-8,50	-0,76	-1,59	
124	LwK 7.3	142,0	-5,50	-0,49	-1,03	
125	LwK 7.5.2(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	
126	LwK 7.4.2	118,0	-29,50	-2,65	-5,51	(**)
127	LwK 7.4.2	154,0	6,50	0,58	1,21	
128	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
129	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	10,50	0,94	1,96	
130	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	10,50	0,94	1,96	
131	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	
132	LwK 7.1	155,0	7,50	0,67	1,40	
133	LwK 7.4.2	156,0	8,50	0,76	1,59	
134	LwK 7.5.2(incl. Red.)	149,0	1,50	0,13	0,28	
135	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	4,50	0,40	0,84	
136	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
137	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
138	LwK 7.6	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
139	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	15,50	1,39	2,89	
140	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	7,50	0,67	1,40	
141	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	-9,50	-0,85	-1,77	
142	LwK 7.4.2	148,0	0,50	0,04	0,09	
143	LwK 7.4.2	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
144	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
145	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	0,50	0,04	0,09	
146	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
147	LwK 7.4.1	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
148	LwK 7.4.2	135,0	-12,50	-1,12	-2,33	

Rot eingetragene Werte und Verfahrensangaben wurden vom Auswerter auf die Form einschließlich der Reduktone geändert. Mit (**) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab. Derartige Ergebnisse von Destillationsverfahren wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
149	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	15,50	1,39	2,89	
150	LwK 7.5.2(incl. Red.)	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
151	LwK 7.1	156,0	8,50	0,76	1,59	
152	LwK 7.4.2	150,0	2,50	0,22	0,47	
153	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-4,50	-0,40	-0,84	
154	LwK 7.4.2	142,0	-5,50	-0,49	-1,03	
206	LwK 7.8	135,0	-12,50	-1,12	-2,33	
207	LwK 7.8	152,0	4,50	0,40	0,84	
208	LwK 7.8	95,0	-52,50	-4,72	-9,80	(**)
209	LwK 7.8	142,2	-5,30	-0,48	-0,99	
210	LwK 7.8	149,6	2,10	0,19	0,39	
219	LwK 7.8	121,0	-26,50	-2,38	-4,95	
226	LwK 7.8	145,0	-2,50	-0,22	-0,47	
239	LwK 7.8	126,0	-21,50	-1,93	-4,01	
253	LwK 7.8	131,0	-16,50	-1,48	-3,08	
254	LwK 7.8	144,0	-3,50	-0,31	-0,65	
260	LwK 7.8	134,0	-13,50	-1,21	-2,52	
264	LwK 7.8	162,0	14,50	1,30	2,71	
265	LwK 7.8	159,0	11,50	1,03	2,15	
270	LwK 7.8	162,0	14,50	1,30	2,71	
273	LwK 7.8	146,0	-1,50	-0,13	-0,28	
320	LwK 7.8	138,0	-9,50	-0,85	-1,77	
339	LwK 7.8	127,0	-20,50	-1,84	-3,83	
351	LwK 7.8	144,0	-3,50	-0,31	-0,65	
366	LwK 7.8	152,0	4,50	0,40	0,84	

LwK 7.8 = Bestimmung mit FTIR in der Gasphase

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

6.12.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	-9,00	-0,80	-1,68	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	-9,00	-0,80	-1,68	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	-3,00	-0,27	-0,56	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	161,0	12,00	1,07	2,24	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	166,0	17,00	1,51	3,17	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-6,00	-0,53	-1,12	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,0	-5,00	-0,45	-0,93	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	-15,00	-1,34	-2,80	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
31	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	-66,00	-5,88	-12,32	(**)
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	153,0	4,00	0,36	0,75	
34	LwK 7.5.2(incl. Red.)	165,0	16,00	1,43	2,99	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	159,0	10,00	0,89	1,87	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	146,0	-3,00	-0,27	-0,56	
38	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	9,00	0,80	1,68	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,5	-10,50	-0,94	-1,96	
45	LwK 7.5.3(incl. Red.)	138,0	-11,00	-0,98	-2,05	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	157,1	8,14	0,73	1,52	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	160,0	11,00	0,98	2,05	
53	LwK 7.5.1(incl. Red.)	141,0	-8,00	-0,71	-1,49	
54	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,0	-19,00	-1,69	-3,55	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,2	13,20	1,18	2,46	
62	LwK 7.5.2(incl. Red.)	143,0	-6,00	-0,53	-1,12	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,0	-12,00	-1,07	-2,24	
64	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	2,00	0,18	0,37	
67	LwK 7.5.3(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	-14,00	-1,25	-2,61	
71	LwK 7.5.1(incl. Red.)	156,0	7,00	0,62	1,31	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	2,00	0,18	0,37	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	3,00	0,27	0,56	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	142,0	-7,00	-0,62	-1,31	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,8	-4,20	-0,37	-0,78	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	184,0	35,00	3,12	6,53	(**)
93	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,2	5,20	0,46	0,97	
94	LwK 7.5.2(incl. Red.)	127,0	-22,00	-1,96	-4,11	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	-1,00	-0,09	-0,19	
97	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,7	5,69	0,51	1,06	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
109	Redox (incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
111	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	13,00	1,16	2,43	
112	LwK 7.5.1(incl. Red.)	154,0	5,00	0,45	0,93	
113	LwK 7.5.2(incl. Red.)	158,0	9,00	0,80	1,68	
115	LwK 7.5.1(incl. Red.)	147,0	-2,00	-0,18	-0,37	
116	LwK 7.5.2(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
117	LwK 7.5.1(incl. Red.)	150,0	1,00	0,09	0,19	
118	LwK 7.5.1(incl. Red.)	151,0	2,00	0,18	0,37	
119	LwK 7.5.1(incl. Red.)	149,0	0,00	0,00	0,00	
122	LwK 7.5.2(incl. Red.)	147,0	-2,00	-0,18	-0,37	
125	LwK 7.5.2(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
128	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
129	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	9,00	0,80	1,68	
130	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	9,00	0,80	1,68	
131	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
134	LwK 7.5.2(incl. Red.)	149,0	0,00	0,00	0,00	
135	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	3,00	0,27	0,56	
136	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
137	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-6,00	-0,53	-1,12	
139	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	14,00	1,25	2,61	
140	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	6,00	0,53	1,12	
141	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	-11,00	-0,98	-2,05	
144	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
145	LwK 7.5.1(incl. Red.)	148,0	-1,00	-0,09	-0,19	
146	LwK 7.5.1(incl. Red.)	145,0	-4,00	-0,36	-0,75	
149	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	14,00	1,25	2,61	
150	LwK 7.5.2(incl. Red.)	146,0	-3,00	-0,27	-0,56	
153	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	-6,00	-0,53	-1,12	

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

6.12.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,0	-11,50	-1,16	-2,15	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	114,0	-14,50	-1,46	-2,71	
20	LwK 7.5.1(excl. Red.)	135,0	6,50	0,66	1,21	
22	LwK 7.5.1(excl. Red.)	150,0	21,50	2,17	4,01	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-5,50	-0,56	-1,03	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	137,7	9,20	0,93	1,72	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	-12,50	-1,26	-2,33	
30	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
31	LwK 7.5.1(excl. Red.)	68,0	-60,50	-6,11	-11,29	(**)
33	LwK 7.5.1(excl. Red.)	148,0	19,50	1,97	3,64	
34	LwK 7.5.2(excl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	
35	LwK 7.5.1(excl. Red.)	142,0	13,50	1,36	2,52	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
38	LwK 7.5.1(excl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	121,5	-7,00	-0,71	-1,31	
45	LwK 7.5.3(excl. Red.)	123,0	-5,50	-0,56	-1,03	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	140,2	11,66	1,18	2,18	
48	LwK 7.5.1(excl. Red.)	141,0	12,50	1,26	2,33	
53	LwK 7.5.1(excl. Red.)	129,0	0,50	0,05	0,09	
54	LwK 7.5.2(excl. Red.)	125,0	-3,50	-0,35	-0,65	

Sofern zu Werten inklusive Reduktone ein Reduktionwert vorlag, wurde der Wert exclusive Reduktone berechnet..

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	162,2	33,70	3,40	6,29	(**)
62	LwK 7.5.2(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	113,0	-15,50	-1,57	-2,89	
64	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	-17,50	-1,77	-3,27	
67	LwK 7.5.3(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	-12,50	-1,26	-2,33	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	140,0	11,50	1,16	2,15	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	7,50	0,76	1,40	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	-18,50	-1,87	-3,45	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	118,8	-9,70	-0,98	-1,81	
83	LwK 7.5.3(excl. Red.)	164,0	35,50	3,59	6,63	(**)
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	
109	Redox (excl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
111	LwK 7.5.1(excl. Red.)	138,0	9,50	0,96	1,77	
112	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	7,50	0,76	1,40	
113	LwK 7.5.2(excl. Red.)	148,0	19,50	1,97	3,64	
115	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	-8,50	-0,86	-1,59	
116	LwK 7.5.2(excl. Red.)	135,0	6,50	0,66	1,21	
117	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
118	LwK 7.5.1(excl. Red.)	139,0	10,50	1,06	1,96	
119	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-5,50	-0,56	-1,03	
122	LwK 7.5.2(excl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
125	LwK 7.5.2(excl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	
129	LwK 7.5.1(excl. Red.)	145,4	16,90	1,71	3,15	
130	LwK 7.5.1(excl. Red.)	140,0	11,50	1,16	2,15	
131	LwK 7.5.1(excl. Red.)	137,0	8,50	0,86	1,59	
134	LwK 7.5.2(excl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
135	LwK 7.5.1(excl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
136	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	
137	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
139	LwK 7.5.1(excl. Red.)	152,0	23,50	2,37	4,39	
140	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	5,50	0,56	1,03	
141	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	-8,50	-0,86	-1,59	
144	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
145	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	
146	LwK 7.5.1(excl. Red.)	125,0	-3,50	-0,35	-0,65	
149	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	17,50	1,77	3,27	
150	LwK 7.5.2(excl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
153	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	

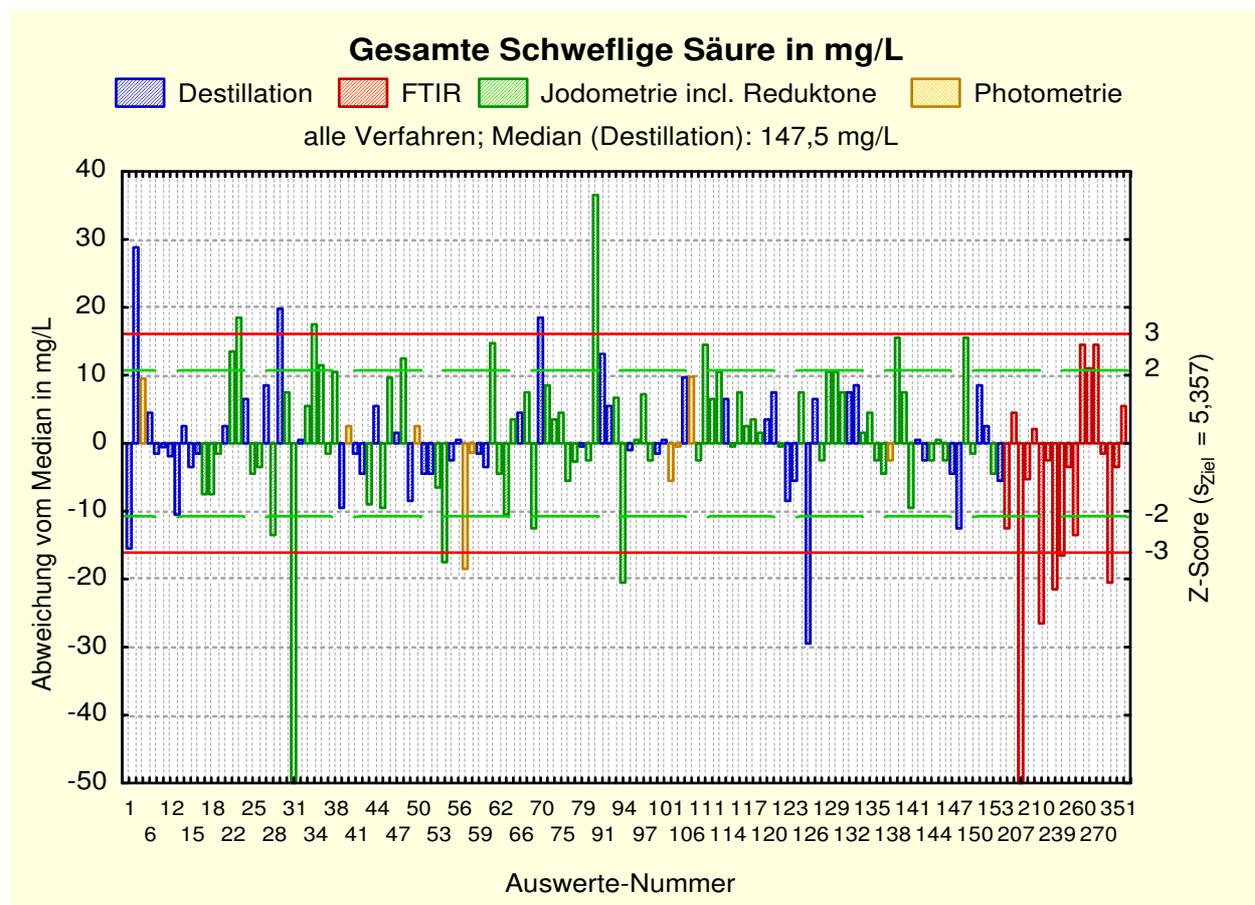
Sofern zu Werten inclusive Reduktone ein Reduktonwert vorlag, wurde der Wert exclusive Reduktone berechnet..

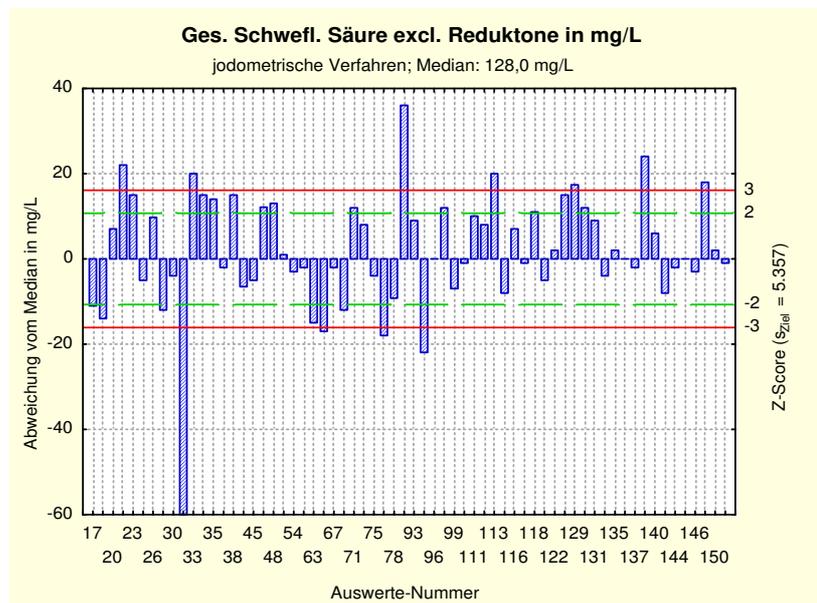
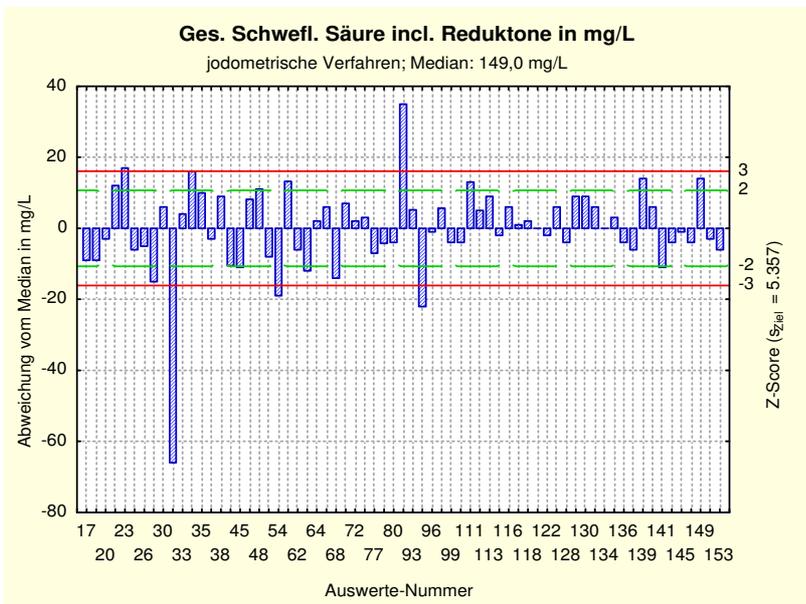
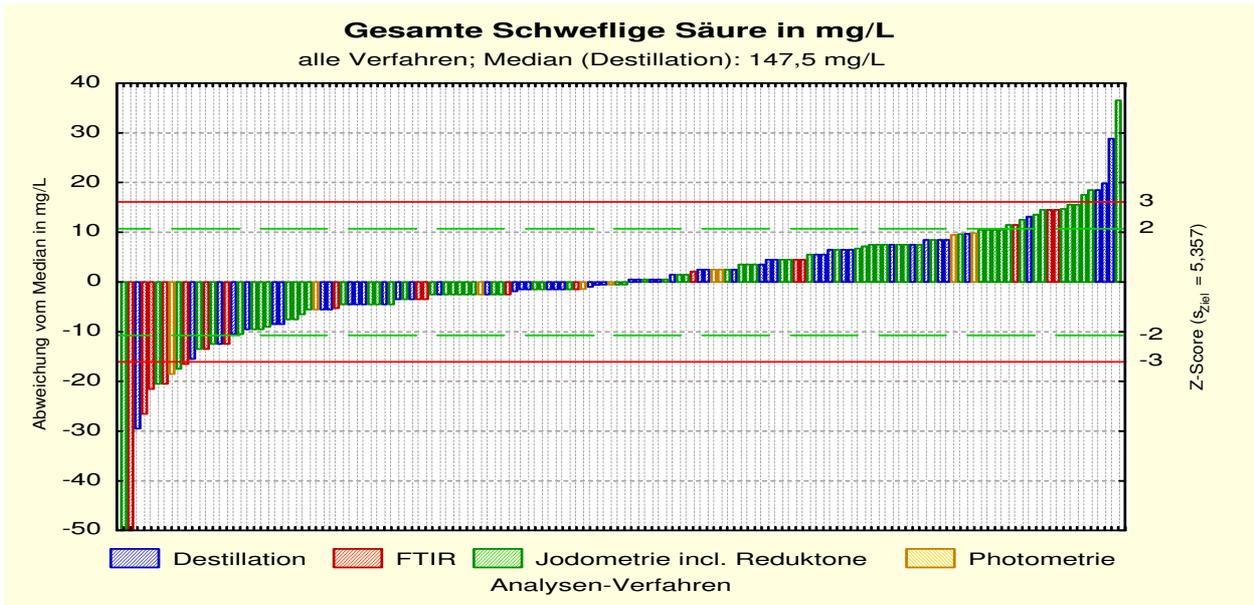
6.12.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillation		Jodometrie			
	alle Daten	ber. Daten	incl. Reduktone		excl. Reduktone	
			alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	52	50	67	65	61	58
Minimalwert	118,0	132,0	83,0	127,0	68,0	110,0
Mittelwert	148,22	148,26	148,78	149,25	130,93	130,91
Median	147,50	147,50	149,00	149,00	129,00	128,50
Maximalwert	176,3	167,3	184,0	166,0	164,0	152,0
Standardabweichung (s _L)	9,076	7,142	12,542	8,661	14,463	10,694
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,259	1,010	1,532	1,074	1,852	1,404
Zielstandardabweichung						
- n. Horwitz (s _H)	11,130	11,130	11,226	11,226	9,932	9,899
- experimentell (s _{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,82	0,64	1,12	0,77	1,46	1,08
Quotient (s _L /s _{exp})	1,69	1,33	2,34	1,62	2,70	2,00
Quotient (u _M /s _H)	0,11	0,09	0,14	0,10	0,19	0,14
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,23	0,19	0,29	0,20	0,35	0,26

6.12.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	2	155,50	0,80
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	151,14	11,01
LwK 7.3 m	- modifiziert: 10 ml Probe, 5ml 15%ige Phosphorsäure	1	160,64	
LwK 7.3m2	Wasserdampfdestillation mit Vapodest; Titration fehlt!	1	139,00	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	7	144,53	3,23
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	29	147,67	6,43
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein modifiziert	1	154,00	
alle Destillationsverfahren		52	148,07	7,12
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	53	149,52	9,05
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	10	147,54	12,89
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Reduktonabzug	3	159,00	26,38
Redox (incl. Red.)	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	145,00	
alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug		67	149,41	9,37
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	51	129,60	12,72
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	9	133,30	9,46
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Reduktonabzug	3	136,09	22,83
Redox (excl. Red.)	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	127,00	
alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug		64	130,34	12,07
LwK 7.6	Pararosanilinverfahren	3	147,22	7,49
LwK 7.7	DNTB-Verfahren (z. B. FOSS FIAStar)	6	147,68	7,55
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	18	141,84	14,99





6.13 Glucose [g/L]**6.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,13	0,530	1,89	2,40	
04	HPLC	6,32	-0,280	-1,00	-1,27	
05	enzymat., autom.	6,73	0,130	0,46	0,59	
06	enzymat., autom.	6,49	-0,110	-0,39	-0,50	
07	enzymat. Hand	6,35	-0,250	-0,89	-1,13	
08	enzymat. Hand	6,70	0,100	0,36	0,45	
12	enzymat., autom.	6,49	-0,110	-0,39	-0,50	
13	HPLC	6,65	0,050	0,18	0,23	
14	HPLC	6,64	0,040	0,14	0,18	
15	enzymat., autom.	6,70	0,100	0,36	0,45	
16	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
19	HPLC	6,70	0,100	0,36	0,45	
21	HPLC	6,85	0,250	0,89	1,13	
22	enzymat., autom.	6,65	0,050	0,18	0,23	
23	HPLC	6,51	-0,090	-0,32	-0,41	
24	NMR	6,55	-0,050	-0,18	-0,23	
27	enzymat., autom.	6,77	0,170	0,60	0,77	
28	HPLC	7,10	0,500	1,78	2,26	
32	enzymat., autom.	6,40	-0,200	-0,71	-0,90	
33	HPLC	6,47	-0,130	-0,46	-0,59	
40	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
41	HPLC	6,30	-0,300	-1,07	-1,36	
42	enzymat., autom.	6,63	0,030	0,11	0,14	
43	enzymat., autom.	6,44	-0,160	-0,57	-0,72	
44	HPLC	6,59	-0,008	-0,03	-0,04	
46	enzymat., autom.	6,42	-0,180	-0,64	-0,81	
47	enzymat., autom.	6,55	-0,050	-0,18	-0,23	
49	enzymat., autom.	6,64	0,040	0,14	0,18	
50	enzymat., autom.	6,82	0,220	0,78	1,00	
52	HPLC	6,42	-0,180	-0,64	-0,81	
54	enzymat., autom.	6,66	0,060	0,21	0,27	
55	enzymat., autom.	6,58	-0,020	-0,07	-0,09	
57	enzymat., autom.	6,70	0,100	0,36	0,45	
58	enzymat., autom.	6,62	0,024	0,09	0,11	
60	enzymat., autom.	6,51	-0,090	-0,32	-0,41	
61	HPLC	6,30	-0,300	-1,07	-1,36	
63	HPLC	6,63	0,031	0,11	0,14	
66	enzymat. Hand	6,96	0,360	1,28	1,63	
70	enzymat., autom.	6,54	-0,060	-0,21	-0,27	
72	enzymat., autom.	6,46	-0,140	-0,50	-0,63	
79	enzymat. Hand	6,46	-0,140	-0,50	-0,63	
95	enzymat., autom.	6,52	-0,080	-0,28	-0,36	
97	HPLC	6,90	0,300	1,07	1,36	
100	HPLC	6,20	-0,400	-1,42	-1,81	
111	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
113	HPLC	6,65	0,050	0,18	0,23	
118	HPLC	6,72	0,120	0,43	0,54	
120	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
121	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
122	enzymat., autom.	6,65	0,050	0,18	0,23	
125	HPLC	6,60	0,000	0,00	0,00	
130	HPLC	6,60	0,000	0,00	0,00	
132	enzymat., autom.	6,70	0,100	0,36	0,45	
134	HPLC	6,60	0,000	0,00	0,00	
136	enzymat., autom.	6,70	0,100	0,36	0,45	
137	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
138	enzymat., autom.	6,85	0,250	0,89	1,13	
139	HPLC	6,48	-0,120	-0,43	-0,54	
143	HPLC	6,20	-0,400	-1,42	-1,81	
144	HPLC	6,70	0,100	0,36	0,45	
145	enzymat., autom.	6,52	-0,080	-0,28	-0,36	
148	enzymat., autom.	6,60	0,000	0,00	0,00	
152	HPLC	6,65	0,050	0,18	0,23	

6.13.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,01	0,410	1,46	1,00	
202	FTIR	6,59	-0,010	-0,04	-0,02	
203	FTIR	6,81	0,210	0,75	0,51	
204	FTIR	6,75	0,150	0,53	0,37	
205	FTIR	7,10	0,500	1,78	1,23	
206	FTIR	7,47	0,870	3,10	2,13	
207	FTIR	6,60	0,000	0,00	0,00	
208	FTIR	6,80	0,200	0,71	0,49	
209	FTIR	6,41	-0,190	-0,68	-0,47	
210	FTIR	6,69	0,090	0,32	0,22	
211	FTIR	5,90	-0,700	-2,49	-1,72	
212	FTIR	6,55	-0,050	-0,18	-0,12	
213	FTIR	6,69	0,090	0,32	0,22	
215	FTIR	7,10	0,500	1,78	1,23	
216	FTIR	8,06	1,460	5,20	3,58	
217	FTIR	6,01	-0,590	-2,10	-1,45	
218	FTIR	7,57	0,970	3,45	2,38	
219	FTIR	6,38	-0,220	-0,78	-0,54	
220	FTIR	7,30	0,700	2,49	1,72	
221	FTIR	6,17	-0,430	-1,53	-1,05	
222	FTIR	7,16	0,560	1,99	1,37	
223	FTIR	6,02	-0,580	-2,06	-1,42	
224	FTIR	6,40	-0,200	-0,71	-0,49	
225	FTIR	7,10	0,500	1,78	1,23	
226	FTIR	6,33	-0,270	-0,96	-0,66	
227	FTIR	7,02	0,420	1,49	1,03	
228	FTIR	5,97	-0,630	-2,24	-1,54	
229	FTIR	6,99	0,390	1,39	0,96	
230	FTIR	6,65	0,050	0,18	0,12	
231	FTIR	5,45	-1,150	-4,09	-2,82	
232	FTIR	6,30	-0,300	-1,07	-0,74	
234	FTIR	6,61	0,010	0,04	0,02	
236	FTIR	7,04	0,440	1,57	1,08	
238	FTIR	6,99	0,390	1,39	0,96	
239	FTIR	8,60	2,000	7,12	4,90	
242	FTIR	6,49	-0,110	-0,39	-0,27	
243	FTIR	6,70	0,100	0,36	0,25	
244	FTIR	5,90	-0,700	-2,49	-1,72	
245	FTIR	7,18	0,580	2,06	1,42	
246	FTIR	6,20	-0,400	-1,42	-0,98	
247	FTIR	6,98	0,380	1,35	0,93	
248	FTIR	6,20	-0,400	-1,42	-0,98	
249	FTIR	6,86	0,260	0,93	0,64	
251	FTIR	7,10	0,500	1,78	1,23	
252	FTIR	7,16	0,560	1,99	1,37	
253	FTIR	6,01	-0,590	-2,10	-1,45	
254	FTIR	6,62	0,020	0,07	0,05	
256	FTIR	6,90	0,300	1,07	0,74	
257	FTIR	7,50	0,900	3,20	2,21	
258	FTIR	5,00	-1,600	-5,69	-3,92	
259	FTIR	6,68	0,080	0,28	0,20	
260	FTIR	6,70	0,100	0,36	0,25	
261	FTIR	6,70	0,100	0,36	0,25	
262	FTIR	7,01	0,410	1,46	1,00	
263	FTIR	6,60	0,000	0,00	0,00	
264	FTIR	7,70	1,100	3,91	2,70	
265	FTIR	6,80	0,200	0,71	0,49	
266	FTIR	6,80	0,200	0,71	0,49	
267	FTIR	6,73	0,130	0,46	0,32	
268	FTIR	6,29	-0,310	-1,10	-0,76	
269	FTIR	6,90	0,300	1,07	0,74	
270	FTIR	6,38	-0,220	-0,78	-0,54	
271	FTIR	6,75	0,150	0,53	0,37	
273	FTIR	7,50	0,900	3,20	2,21	
274	FTIR	7,50	0,900	3,20	2,21	
275	FTIR	6,40	-0,200	-0,71	-0,49	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

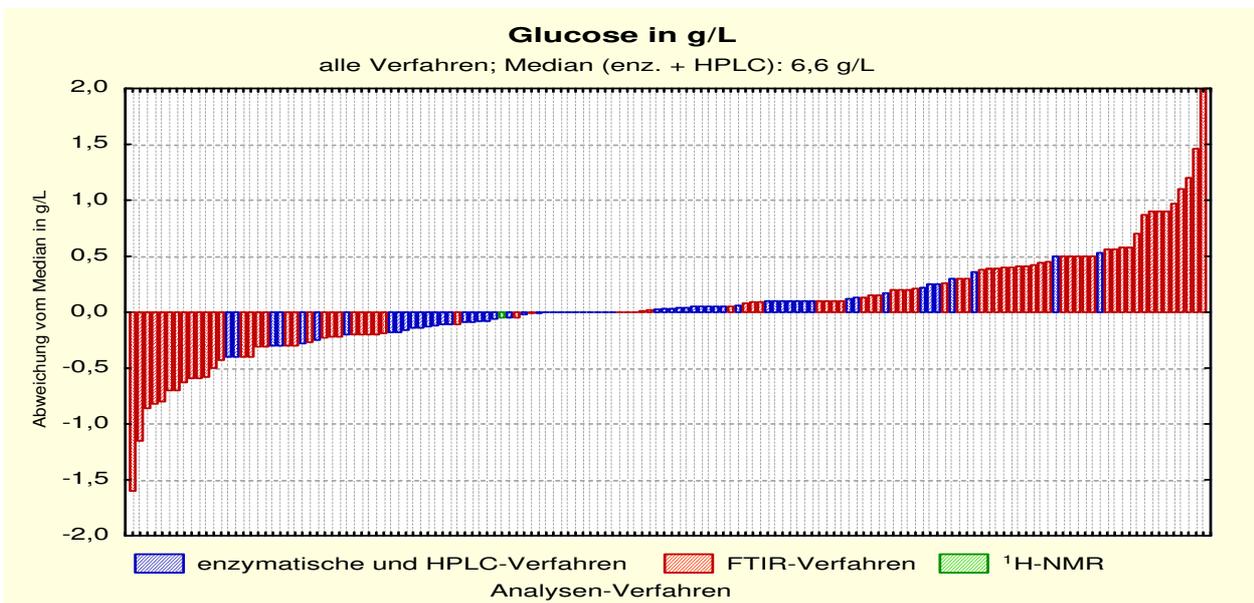
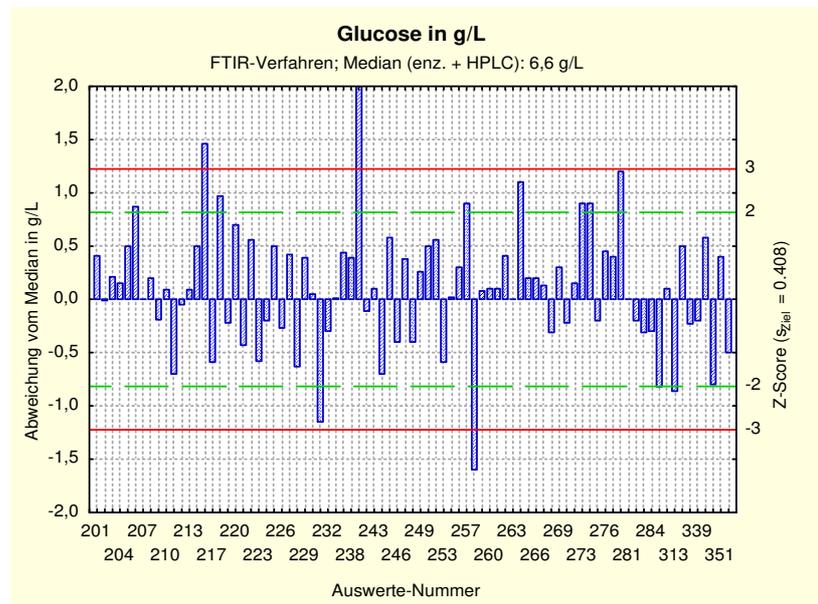
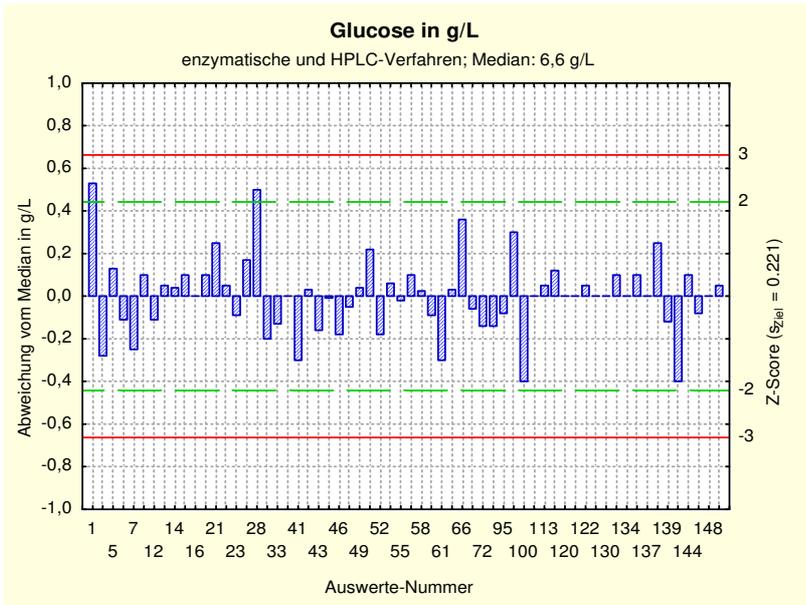
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	7,05	0,450	1,60	1,10	
277	FTIR	7,00	0,400	1,42	0,98	
279	FTIR	7,80	1,200	4,27	2,94	
281	FTIR	6,60	0,000	0,00	0,00	
282	FTIR	6,40	-0,200	-0,71	-0,49	
283	FTIR	6,29	-0,310	-1,10	-0,76	
284	FTIR	6,30	-0,300	-1,07	-0,74	
285	FTIR	5,78	-0,820	-2,92	-2,01	
286	FTIR	6,70	0,100	0,36	0,25	
313	FTIR	5,74	-0,860	-3,06	-2,11	
320	FTIR	7,10	0,500	1,78	1,23	
321	FTIR	6,37	-0,230	-0,82	-0,56	
339	FTIR	6,40	-0,200	-0,71	-0,49	
345	FTIR	7,18	0,580	2,06	1,42	
346	FTIR	5,80	-0,800	-2,85	-1,96	
351	FTIR	7,00	0,400	1,42	0,98	
366	FTIR	6,10	-0,500	-1,78	-1,23	
371	FTIR	6,50	-0,100	-0,36	-0,25	

6.13.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	62
Minimalwert	6,20
Mittelwert	6,602
Median	6,600
Maximalwert	7,13
Standardabweichung (s_L)	0,180
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,023
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,281
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,221
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,408
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,64
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,81
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,44
Quotient (u_M/s_H)	0,08
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,10
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,06

6.13.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie			
	OIV-MA-AS311-03	24	6,572	0,209
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiertes Verfahren			
	OIV-MA-AS311-02	33	6,602	0,110
enzymat. Hand	enzymatisch manuell			
	OIV-MA-AS311-02	5	6,720	0,372
	herkömmliche Verfahren	62	6,597	0,150
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,697	0,532
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	1	6,550	



6.14 Fructose [g/L]**6.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,93	0,230	0,72	0,92	
04	HPLC	7,96	0,260	0,81	1,04	
05	enzymat., autom.	7,70	0,000	0,00	0,00	
06	enzymat., autom.	7,44	-0,260	-0,81	-1,04	
07	enzymat. Hand	7,25	-0,450	-1,40	-1,79	
08	enzymat. Hand	7,70	0,000	0,00	0,00	
12	enzymat., autom.	7,30	-0,396	-1,24	-1,58	
13	HPLC	8,05	0,350	1,09	1,40	
14	HPLC	8,04	0,337	1,05	1,34	
15	enzymat., autom.	7,61	-0,090	-0,28	-0,36	
16	enzymat., autom.	7,70	0,000	0,00	0,00	
19	HPLC	8,13	0,430	1,34	1,71	
21	HPLC	8,18	0,480	1,50	1,91	
22	enzymat., autom.	7,73	0,030	0,09	0,12	
23	HPLC	7,95	0,250	0,78	1,00	
24	NMR	7,73	0,030	0,09	0,12	
27	enzymat., autom.	7,67	-0,030	-0,09	-0,12	
28	HPLC	7,70	0,000	0,00	0,00	
32	enzymat., autom.	8,10	0,400	1,25	1,59	
33	HPLC	8,07	0,370	1,15	1,48	
41	HPLC	7,78	0,080	0,25	0,32	
42	enzymat., autom.	7,50	-0,200	-0,62	-0,80	
43	enzymat., autom.	7,59	-0,110	-0,34	-0,44	
44	HPLC	7,95	0,253	0,79	1,01	
46	enzymat., autom.	7,72	0,020	0,06	0,08	
47	enzymat., autom.	7,50	-0,200	-0,62	-0,80	
49	enzymat., autom.	7,50	-0,200	-0,62	-0,80	
50	enzymat., autom.	7,57	-0,130	-0,41	-0,52	
52	HPLC	7,88	0,180	0,56	0,72	
54	enzymat., autom.	7,57	-0,130	-0,41	-0,52	
55	enzymat., autom.	7,58	-0,120	-0,37	-0,48	
57	enzymat., autom.	8,20	0,500	1,56	1,99	
58	enzymat., autom.	7,47	-0,230	-0,72	-0,92	
60	enzymat., autom.	7,49	-0,210	-0,66	-0,84	
61	HPLC	7,50	-0,200	-0,62	-0,80	
63	HPLC	7,97	0,270	0,84	1,08	
66	enzymat. Hand	8,66	0,960	3,00	3,83	
70	enzymat., autom.	7,53	-0,170	-0,53	-0,68	
72	enzymat., autom.	7,57	-0,130	-0,41	-0,52	
79	enzymat. Hand	7,00	-0,700	-2,19	-2,79	
95	enzymat., autom.	7,69	-0,010	-0,03	-0,04	
97	HPLC	8,14	0,440	1,37	1,75	
111	enzymat., autom.	7,8	0,100	0,31	0,40	
113	HPLC	7,96	0,260	0,81	1,04	
118	HPLC	8,11	0,410	1,28	1,63	
120	enzymat., autom.	7,6	-0,100	-0,31	-0,40	
121	enzymat., autom.	7,8	0,100	0,31	0,40	
122	enzymat., autom.	7,68	-0,020	-0,06	-0,08	
125	HPLC	7,8	0,100	0,31	0,40	
132	enzymat., autom.	7,4	-0,300	-0,94	-1,20	
134	HPLC	8,1	0,400	1,25	1,59	
136	enzymat., autom.	7,8	0,100	0,31	0,40	
138	enzymat., autom.	7,68	-0,020	-0,06	-0,08	
139	HPLC	7,89	0,190	0,59	0,76	
143	HPLC	8,00	0,300	0,94	1,20	
145	enzymat., autom.	7,38	-0,320	-1,00	-1,28	
148	enzymat., autom.	7,42	-0,280	-0,87	-1,12	
152	HPLC	8,145	0,445	1,39	1,77	

6.14.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,52	-0,180	-0,56	-0,55	
202	FTIR	7,93	0,230	0,72	0,70	
203	FTIR	8,22	0,520	1,62	1,58	
204	FTIR	7,57	-0,130	-0,41	-0,39	
205	FTIR	7,46	-0,240	-0,75	-0,73	
206	FTIR	8,74	1,040	3,25	3,15	
207	FTIR	7,20	-0,500	-1,56	-1,52	
208	FTIR	7,80	0,100	0,31	0,30	
209	FTIR	7,33	-0,370	-1,15	-1,12	
210	FTIR	8,04	0,340	1,06	1,03	
211	FTIR	7,40	-0,300	-0,94	-0,91	
212	FTIR	7,40	-0,300	-0,94	-0,91	
213	FTIR	7,59	-0,110	-0,34	-0,33	
215	FTIR	7,20	-0,500	-1,56	-1,52	
216	FTIR	7,73	0,030	0,09	0,09	
217	FTIR	7,19	-0,510	-1,59	-1,55	
218	FTIR	12,33	4,630	14,45	14,03	(*)
219	FTIR	7,75	0,050	0,16	0,15	
220	FTIR	7,90	0,200	0,62	0,61	
221	FTIR	7,74	0,040	0,12	0,12	
222	FTIR	8,68	0,980	3,06	2,97	
223	FTIR	7,33	-0,370	-1,15	-1,12	
224	FTIR	7,70	0,000	0,00	0,00	
225	FTIR	8,20	0,500	1,56	1,52	
226	FTIR	7,85	0,150	0,47	0,45	
227	FTIR	7,92	0,220	0,69	0,67	
228	FTIR	7,87	0,170	0,53	0,52	
229	FTIR	7,15	-0,550	-1,72	-1,67	
230	FTIR	7,10	-0,600	-1,87	-1,82	
231	FTIR	9,15	1,450	4,53	4,39	
232	FTIR	7,80	0,100	0,31	0,30	
234	FTIR	7,07	-0,630	-1,97	-1,91	
236	FTIR	7,60	-0,100	-0,31	-0,30	
238	FTIR	7,20	-0,500	-1,56	-1,52	
239	FTIR	6,90	-0,800	-2,50	-2,42	
242	FTIR	7,36	-0,340	-1,06	-1,03	
243	FTIR	7,50	-0,200	-0,62	-0,61	
244	FTIR	8,00	0,300	0,94	0,91	
245	FTIR	7,45	-0,250	-0,78	-0,76	
246	FTIR	8,10	0,400	1,25	1,21	
247	FTIR	8,74	1,040	3,25	3,15	
248	FTIR	7,80	0,100	0,31	0,30	
249	FTIR	8,35	0,650	2,03	1,97	
251	FTIR	8,30	0,600	1,87	1,82	
252	FTIR	7,73	0,030	0,09	0,09	
253	FTIR	7,63	-0,070	-0,22	-0,21	
254	FTIR	7,91	0,210	0,66	0,64	
256	FTIR	7,50	-0,200	-0,62	-0,61	
257	FTIR	7,00	-0,700	-2,19	-2,12	
258	FTIR	6,80	-0,900	-2,81	-2,73	
259	FTIR	7,75	0,050	0,16	0,15	
260	FTIR	7,62	-0,080	-0,25	-0,24	
261	FTIR	7,73	0,030	0,09	0,09	
262	FTIR	7,17	-0,530	-1,65	-1,61	
263	FTIR	7,80	0,100	0,31	0,30	
264	FTIR	6,90	-0,800	-2,50	-2,42	
265	FTIR	7,50	-0,200	-0,62	-0,61	
266	FTIR	8,40	0,700	2,19	2,12	
267	FTIR	7,71	0,010	0,03	0,03	
268	FTIR	7,27	-0,430	-1,34	-1,30	
269	FTIR	7,70	0,000	0,00	0,00	
270	FTIR	7,41	-0,290	-0,91	-0,88	
271	FTIR	7,75	0,050	0,16	0,15	
273	FTIR	6,70	-1,000	-3,12	-3,03	
274	FTIR	6,86	-0,840	-2,62	-2,55	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	8,30	0,600	1,87	1,82	
276	FTIR	8,24	0,540	1,69	1,64	
277	FTIR	8,20	0,500	1,56	1,52	
279	FTIR	7,80	0,100	0,31	0,30	
281	FTIR	7,75	0,050	0,16	0,15	
282	FTIR	7,30	-0,400	-1,25	-1,21	
283	FTIR	8,21	0,510	1,59	1,55	
284	FTIR	7,35	-0,350	-1,09	-1,06	
285	FTIR	5,90	-1,800	-5,62	-5,45	(**)
286	FTIR	6,88	-0,820	-2,56	-2,48	
313	FTIR	7,22	-0,480	-1,50	-1,45	
320	FTIR	7,70	0,000	0,00	0,00	
321	FTIR	7,48	-0,220	-0,69	-0,67	
339	FTIR	8,20	0,500	1,56	1,52	
345	FTIR	7,45	-0,250	-0,78	-0,76	
346	FTIR	7,00	-0,700	-2,19	-2,12	
351	FTIR	8,20	0,500	1,56	1,52	
366	FTIR	8,60	0,900	2,81	2,73	
371	FTIR	7,60	-0,100	-0,31	-0,30	

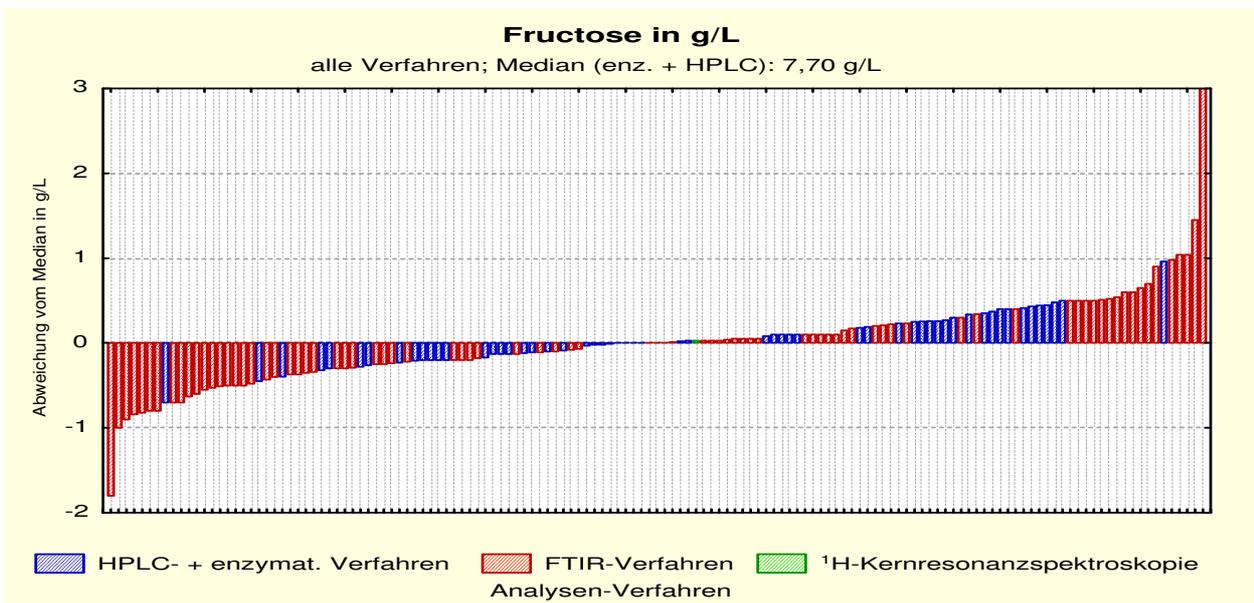
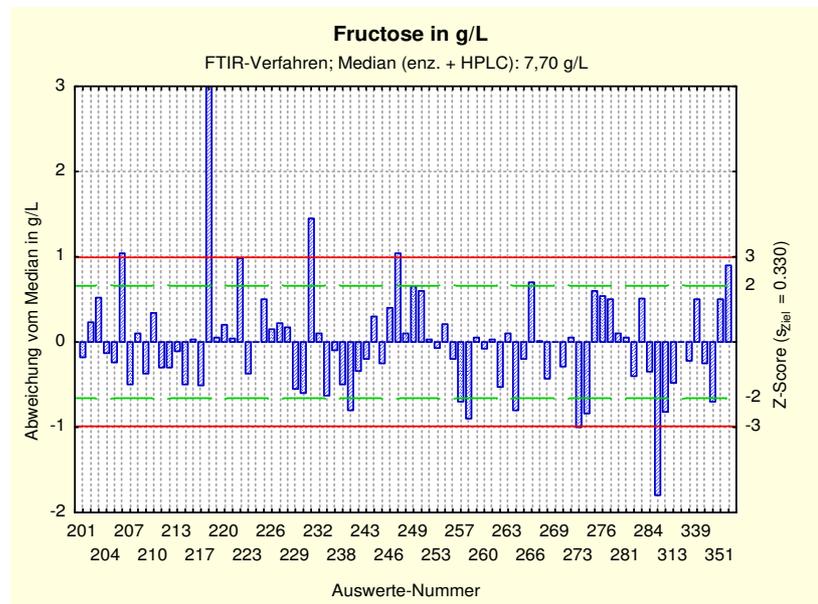
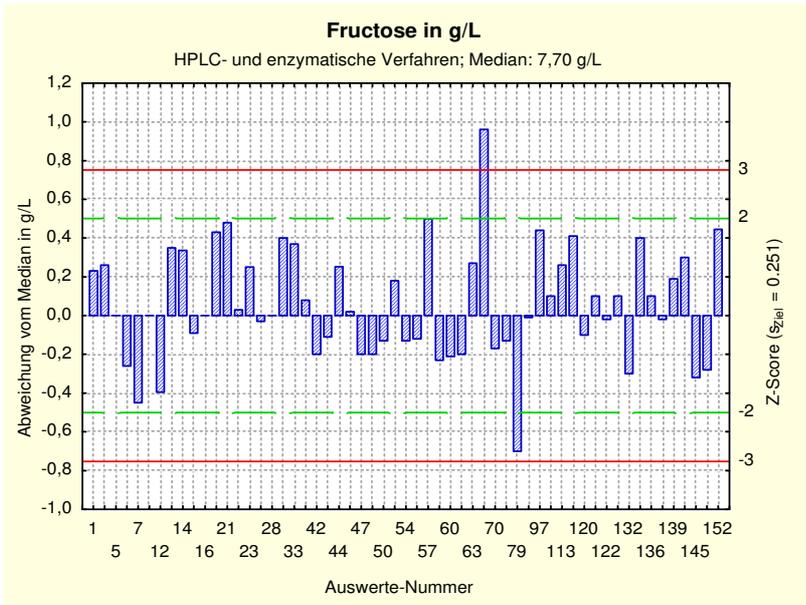
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

6.14.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	57
Minimalwert	7,00
Mittelwert	7,757
Median	7,700
Maximalwert	8,66
Standardabweichung (s_L)	0,293
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,039
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,320
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,251
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,330
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,92
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,17
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,88
Quotient (u_M/s_H)	0,12
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,15
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,12

6.14.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	21	7,981	0,152
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	31	7,605	0,158
enzymat. Hand	enzymatisch n. Boehringer, OIV-MA-AS311-02	5	7,708	0,732
	alle herkömmlichen Verfahren	57	7,755	0,292
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	7,656	0,511
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	7,730	



6.15 Glycerin [g/L]**6.15.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,81	0,41	1,32	
04	HPLC	7,24	-0,16	-0,52	
05	enzymat. autom.	7,35	-0,05	-0,16	
06	enzymat. autom.	7,29	-0,11	-0,36	
07	enzymat. Hand	7,05	-0,35	-1,13	
08	enzymat. Hand	7,11	-0,29	-0,94	
12	enzymat. autom.	8,70	1,30	4,21	
13	HPLC	7,50	0,10	0,32	
14	HPLC	7,56	0,16	0,53	
21	HPLC	7,34	-0,06	-0,19	
22	HPLC	7,59	0,19	0,61	
23	HPLC	7,40	0,00	0,00	
24	NMR	7,47	0,07	0,23	
27	HPLC	7,52	0,12	0,38	
28	HPLC	7,90	0,50	1,61	
33	HPLC	7,40	0,00	0,00	
41	HPLC	7,28	-0,12	-0,39	
44	HPLC	7,46	0,06	0,18	
47	enzymat. autom.	7,35	-0,05	-0,16	
52	HPLC	7,28	-0,13	-0,40	
60	enzymat. autom.	7,32	-0,08	-0,26	
61	HPLC	6,61	-0,79	-2,55	
63	HPLC	7,42	0,02	0,06	
70	enzymat. Hand	7,50	0,10	0,32	
79	enzymat. Hand	6,89	-0,51	-1,65	
100	HPLC	7,40	0,00	0,00	

6.15.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,52	0,12	0,39	0,34	
202	FTIR	6,73	-0,67	-2,16	-1,93	
203	FTIR	7,31	-0,09	-0,29	-0,26	
204	FTIR	7,80	0,40	1,29	1,15	
206	FTIR	7,39	-0,01	-0,03	-0,03	
207	FTIR	7,60	0,20	0,65	0,57	
208	FTIR	7,60	0,20	0,65	0,57	
209	FTIR	7,66	0,26	0,84	0,75	
210	FTIR	8,11	0,71	2,29	2,04	
211	FTIR	7,30	-0,10	-0,32	-0,29	
213	FTIR	6,99	-0,41	-1,32	-1,18	
215	FTIR	7,20	-0,20	-0,65	-0,57	
216	FTIR	7,60	0,20	0,65	0,57	
217	FTIR	8,10	0,70	2,26	2,01	
218	FTIR	6,38	-1,02	-3,29	-2,93	
219	FTIR	7,10	-0,30	-0,97	-0,86	
221	FTIR	6,95	-0,45	-1,45	-1,29	
222	FTIR	7,81	0,41	1,32	1,18	
223	FTIR	7,59	0,19	0,61	0,55	
224	FTIR	7,80	0,40	1,29	1,15	
225	FTIR	7,00	-0,40	-1,29	-1,15	
226	FTIR	7,21	-0,19	-0,61	-0,55	
227	FTIR	6,79	-0,61	-1,97	-1,75	
228	FTIR	7,57	0,17	0,55	0,49	
229	FTIR	7,60	0,20	0,65	0,57	
230	FTIR	7,03	-0,37	-1,19	-1,06	
231	FTIR	8,46	1,06	3,42	3,05	
232	FTIR	7,50	0,10	0,32	0,29	
234	FTIR	6,35	-1,05	-3,39	-3,02	
236	FTIR	7,32	-0,08	-0,26	-0,23	
238	FTIR	6,94	-0,46	-1,49	-1,32	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

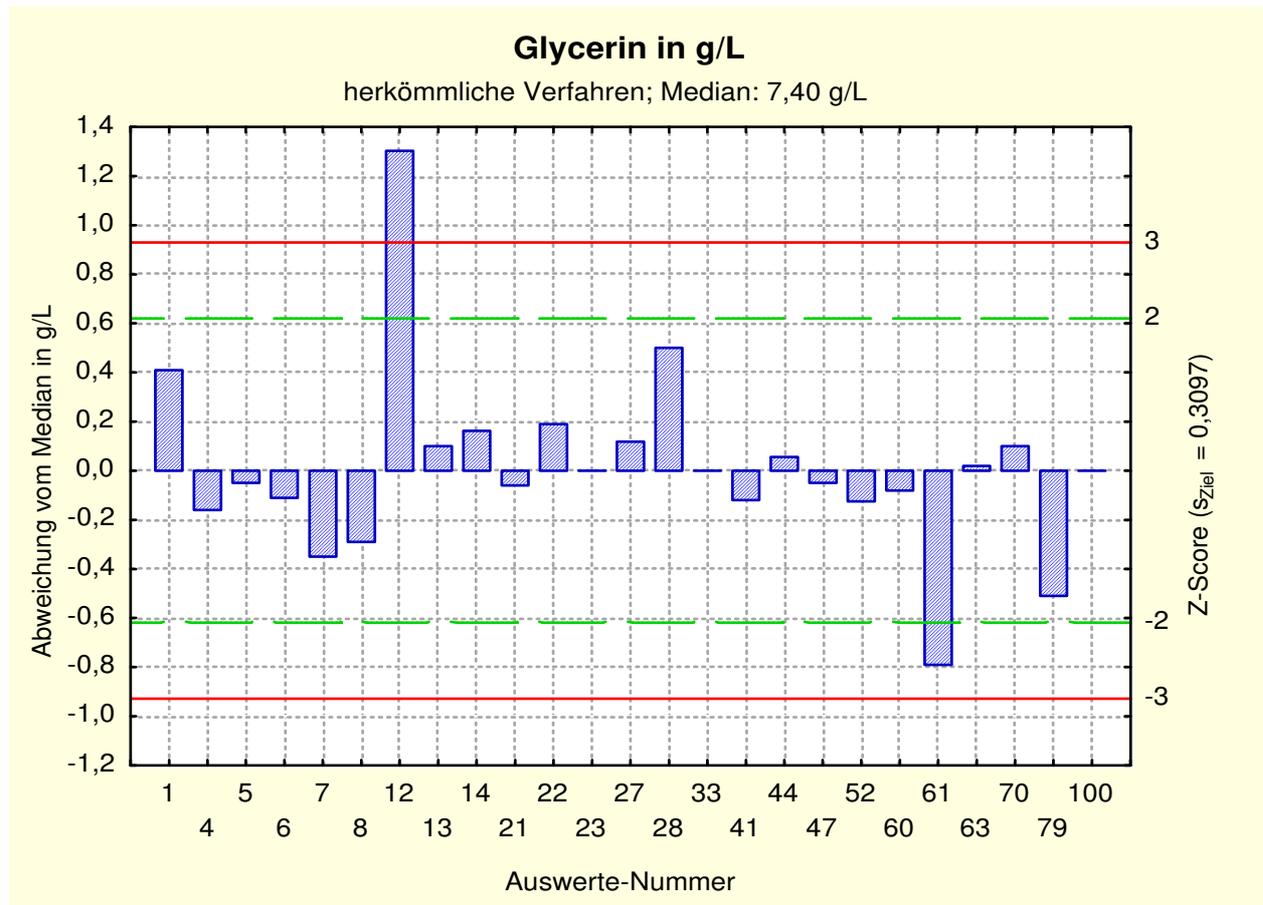
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
239	FTIR	8,60	1,20	3,87	3,45	
242	FTIR	7,50	0,10	0,32	0,29	
243	FTIR	7,20	-0,20	-0,65	-0,57	
244	FTIR	7,00	-0,40	-1,29	-1,15	
246	FTIR	7,30	-0,10	-0,32	-0,29	
247	FTIR	6,69	-0,71	-2,29	-2,04	
248	FTIR	7,65	0,25	0,81	0,72	
251	FTIR	8,10	0,70	2,26	2,01	
252	FTIR	7,76	0,36	1,16	1,03	
254	FTIR	6,80	-0,60	-1,94	-1,72	
256	FTIR	7,70	0,30	0,97	0,86	
257	FTIR	7,40	0,00	0,00	0,00	
258	FTIR	7,16	-0,24	-0,77	-0,69	
259	FTIR	7,33	-0,07	-0,23	-0,20	
260	FTIR	8,01	0,61	1,97	1,75	
261	FTIR	7,96	0,56	1,81	1,61	
262	FTIR	7,10	-0,30	-0,97	-0,86	
263	FTIR	8,40	1,00	3,23	2,87	
264	FTIR	8,30	0,90	2,91	2,59	
265	FTIR	7,30	-0,10	-0,32	-0,29	
267	FTIR	6,98	-0,42	-1,36	-1,21	
268	FTIR	7,40	0,00	0,00	0,00	
269	FTIR	7,30	-0,10	-0,32	-0,29	
270	FTIR	7,19	-0,21	-0,68	-0,60	
274	FTIR	6,51	-0,89	-2,87	-2,56	
275	FTIR	7,00	-0,40	-1,29	-1,15	
276	FTIR	7,05	-0,35	-1,13	-1,01	
277	FTIR	7,30	-0,10	-0,32	-0,29	
279	FTIR	7,00	-0,40	-1,29	-1,15	
281	FTIR	7,08	-0,32	-1,03	-0,92	
282	FTIR	7,20	-0,20	-0,65	-0,57	
283	FTIR	7,01	-0,39	-1,26	-1,12	
284	FTIR	7,95	0,55	1,78	1,58	
285	FTIR	8,93	1,53	4,94	4,40	
321	FTIR	7,59	0,19	0,61	0,55	
339	FTIR	6,90	-0,50	-1,61	-1,44	
346	FTIR	8,20	0,80	2,58	2,30	
351	FTIR	6,80	-0,60	-1,94	-1,72	
371	FTIR	7,50	0,10	0,32	0,29	

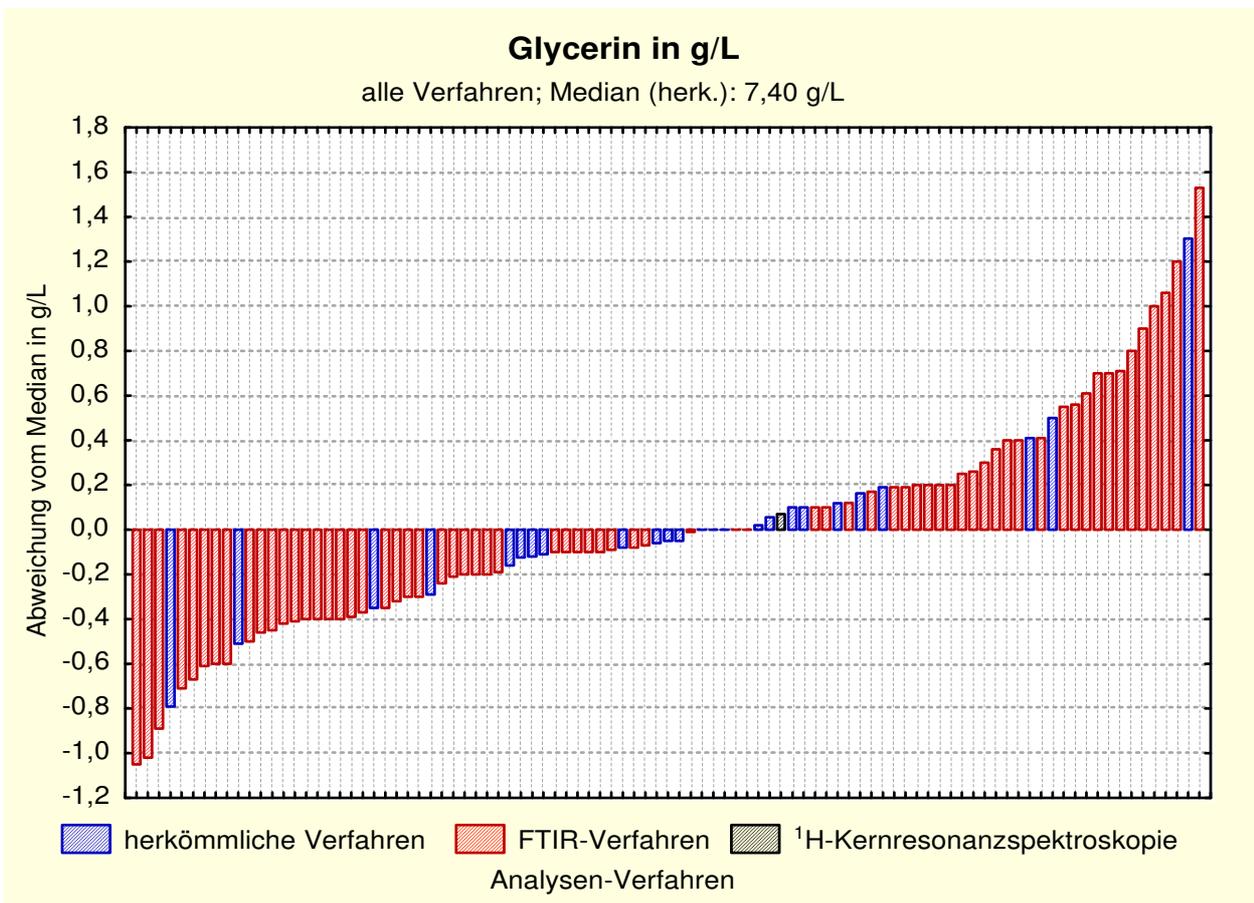
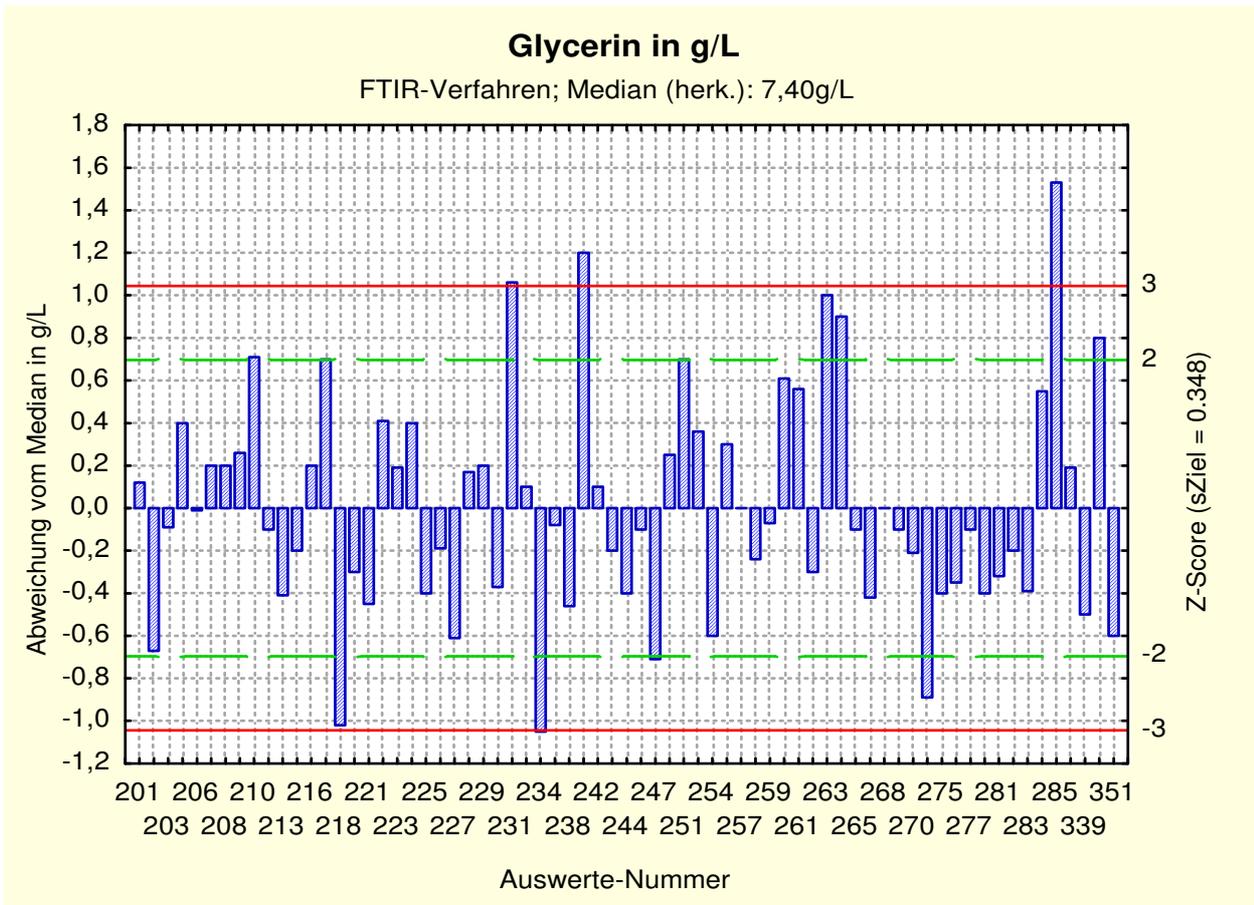
6.15.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	25
Minimalwert	6,6
Mittelwert	7,41
Median	7,40
Maximalwert	8,7
Standardabweichung (s_L)	0,376
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,075
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,310
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,21
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	1,08
Quotient (u_M/s_H)	0,24
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,22

6.15.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	15	7,414	0,152
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	7,361	0,090
enzymat. Hand	enzymatisch n. Boehringer	5	7,260	0,401
	alle herkömmlichen Verfahren	25	7,386	0,219
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	7,383	0,498
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	7,470	





6.16 pH-Wert**6.16.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	elektrom.	3,62	0,030	0,63	
04	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
05	elektrom.	3,66	0,070	1,47	
06	elektrom.	3,61	0,020	0,42	
07	elektrom.	3,59	0,000	0,00	
12	elektrom.	3,62	0,030	0,63	
13	elektrom.	3,63	0,040	0,84	
14	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
15	elektrom.	3,62	0,030	0,63	
16	elektrom.	3,53	-0,060	-1,26	
19	elektrom.	3,64	0,050	1,05	
21	elektrom.	3,50	-0,090	-1,89	
22	elektrom.	3,57	-0,020	-0,42	
23	elektrom.	3,57	-0,020	-0,42	
24	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
25	elektrom.	3,49	-0,100	-2,10	
26	elektrom.	3,59	0,000	0,00	
27	elektrom.	3,59	0,000	0,00	
28	elektrom.	3,64	0,050	1,05	
29	elektrom.	3,62	0,030	0,63	
30	elektrom.	3,65	0,060	1,26	
32	elektrom.	3,57	-0,020	-0,42	
33	elektrom.	3,63	0,040	0,84	
34	elektrom.	3,50	-0,090	-1,89	
39	elektrom.	3,57	-0,020	-0,42	
40	elektrom.	3,65	0,060	1,26	
41	elektrom.	3,60	0,010	0,21	
42	elektrom.	3,62	0,030	0,63	
43	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
44	elektrom.	3,55	-0,040	-0,84	
45	elektrom.	3,52	-0,070	-1,47	
46	elektrom.	3,59	0,000	0,00	
47	elektrom.	3,60	0,010	0,21	
49	elektrom.	3,55	-0,040	-0,84	
50	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
51	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
52	elektrom.	3,60	0,005	0,11	
57	elektrom.	3,54	-0,050	-1,05	
58	elektrom.	3,63	0,040	0,84	
59	elektrom.	3,57	-0,020	-0,42	
60	elektrom.	3,65	0,060	1,26	
61	elektrom.	3,66	0,070	1,47	
62	elektrom.	3,60	0,010	0,21	
63	elektrom.	3,46	-0,130	-2,73	
64	elektrom.	3,60	0,010	0,21	
66	elektrom.	3,52	-0,070	-1,47	
70	elektrom.	3,63	0,040	0,84	
72	elektrom.	3,77	0,180	3,78	
78	elektrom.	3,67	0,080	1,68	
79	elektrom.	3,59	0,000	0,00	
83	elektrom.	3,58	-0,010	-0,21	
111	elektrom.	3,52	-0,070	-1,47	
124	elektrom.	3,55	-0,040	-0,84	

6.16.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	53	3,591	0,0489
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	3,583	0,0681
	alle Verfahren	136	3,586	0,0603

6.16.3 FTIR-Laboregebnisse

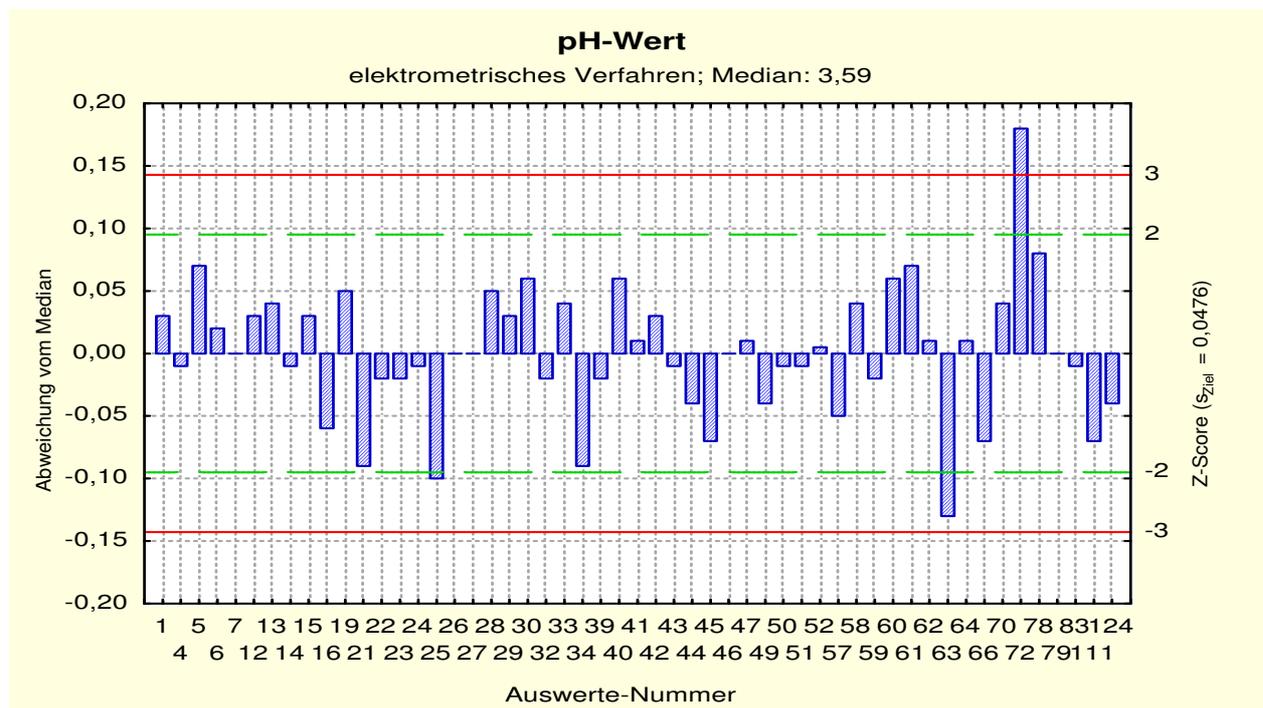
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,54	-0,050	-1,01	
202	FTIR	3,63	0,040	0,81	
203	FTIR	3,59	0,000	0,00	
204	FTIR	3,57	-0,020	-0,41	
205	FTIR	3,60	0,010	0,20	
206	FTIR	3,63	0,040	0,81	
207	FTIR	3,57	-0,020	-0,41	
208	FTIR	3,52	-0,070	-1,42	
209	FTIR	3,62	0,030	0,61	
210	FTIR	3,60	0,010	0,20	
211	FTIR	3,65	0,060	1,22	
213	FTIR	3,50	-0,090	-1,83	
215	FTIR	3,58	-0,010	-0,20	
216	FTIR	3,55	-0,040	-0,81	
217	FTIR	3,69	0,100	2,03	
218	FTIR	3,58	-0,010	-0,20	
219	FTIR	3,53	-0,060	-1,22	
220	FTIR	3,40	-0,190	-3,85	
221	FTIR	3,48	-0,110	-2,23	
222	FTIR	3,51	-0,080	-1,62	
223	FTIR	3,60	0,010	0,20	
224	FTIR	3,60	0,010	0,20	
225	FTIR	3,49	-0,100	-2,03	
226	FTIR	3,56	-0,030	-0,61	
227	FTIR	3,60	0,010	0,20	
228	FTIR	3,67	0,080	1,62	
229	FTIR	3,60	0,010	0,20	
230	FTIR	3,60	0,010	0,20	
231	FTIR	3,51	-0,080	-1,62	
232	FTIR	3,60	0,010	0,20	
234	FTIR	3,63	0,040	0,81	
236	FTIR	3,61	0,020	0,41	
238	FTIR	3,55	-0,040	-0,81	
239	FTIR	3,68	0,090	1,83	
242	FTIR	3,59	0,000	0,00	
243	FTIR	3,59	0,000	0,00	
244	FTIR	3,41	-0,180	-3,65	
245	FTIR	3,61	0,020	0,41	
246	FTIR	3,69	0,100	2,03	
247	FTIR	3,49	-0,100	-2,03	
248	FTIR	3,58	-0,010	-0,20	
249	FTIR	3,56	-0,030	-0,61	
251	FTIR	3,56	-0,030	-0,61	
252	FTIR	3,67	0,080	1,62	
253	FTIR	3,70	0,110	2,23	
254	FTIR	3,57	-0,020	-0,41	
256	FTIR	3,59	0,000	0,00	
257	FTIR	3,61	0,020	0,41	
258	FTIR	3,60	0,010	0,20	
259	FTIR	3,60	0,010	0,20	
260	FTIR	3,49	-0,100	-2,03	
261	FTIR	3,53	-0,060	-1,22	
262	FTIR	3,70	0,110	2,23	
263	FTIR	3,52	-0,070	-1,42	
264	FTIR	3,68	0,090	1,83	
265	FTIR	3,68	0,090	1,83	
266	FTIR	3,64	0,050	1,01	
267	FTIR	3,62	0,030	0,61	
268	FTIR	3,55	-0,040	-0,81	
269	FTIR	3,58	-0,010	-0,20	
270	FTIR	3,44	-0,150	-3,04	
271	FTIR	3,52	-0,065	-1,32	
272	FTIR	3,59	0,000	0,00	
273	FTIR	3,69	0,100	2,03	
274	FTIR	3,51	-0,080	-1,62	
275	FTIR	3,45	-0,140	-2,84	

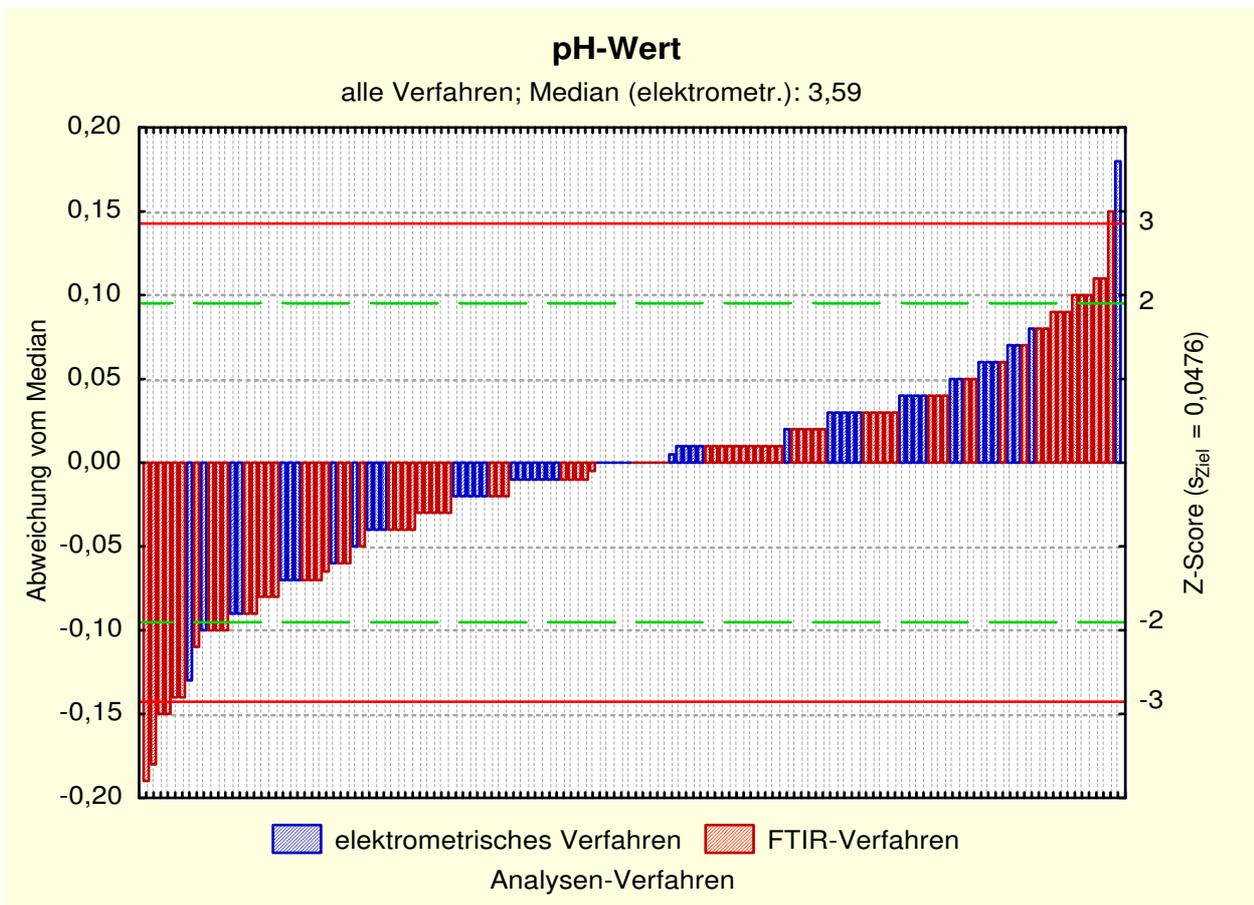
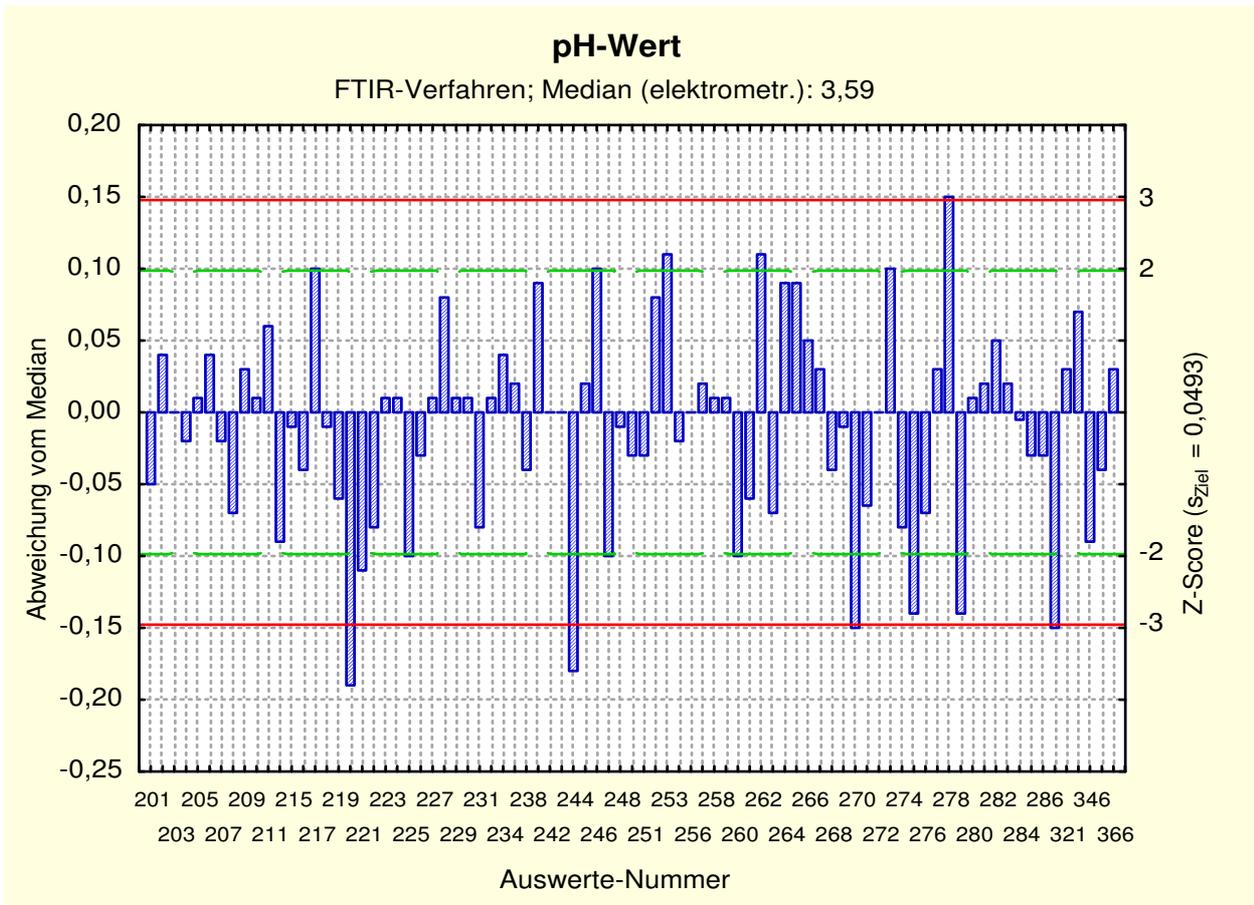
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,52	-0,070	-1,42	
277	FTIR	3,62	0,030	0,61	
278	FTIR	3,74	0,150	3,04	
279	FTIR	3,45	-0,140	-2,84	
280	FTIR	3,60	0,010	0,20	
281	FTIR	3,61	0,020	0,41	
282	FTIR	3,64	0,050	1,01	
283	FTIR	3,61	0,020	0,41	
284	FTIR	3,59	-0,005	-0,10	
285	FTIR	3,56	-0,030	-0,61	
286	FTIR	3,56	-0,030	-0,61	
320	FTIR	3,44	-0,150	-3,04	
321	FTIR	3,62	0,030	0,61	
339	FTIR	3,66	0,070	1,42	
346	FTIR	3,50	-0,090	-1,83	
351	FTIR	3,55	-0,040	-0,81	
366	FTIR	3,62	0,030	0,61	

6.16.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	53
Minimalwert	3,46
Mittelwert	3,591
Median	3,590
Maximalwert	3,77
Standardabweichung (s_L)	0,0533
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0073
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,12
Quotient ($s_L/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,08
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,15
Quotient ($u_M/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,15





6.17 Weinsäure [g/L]**6.17.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,05	-0,010	-0,10	
02	IC	1,91	-0,150	-1,44	
05	photometr.	1,76	-0,300	-2,87	
06	HPLC	2,28	0,220	2,10	
07	HPLC	1,87	-0,190	-1,82	
08	HPLC	1,89	-0,170	-1,63	
09	IC	1,89	-0,170	-1,63	
12	photometr., autom.	1,91	-0,147	-1,41	
16	photometr., autom.	2,40	0,340	3,25	
19	IC	2,09	0,030	0,29	
22	HPLC	2,28	0,220	2,10	
23	HPLC	2,50	0,440	4,21	
24	NMR	2,07	0,010	0,10	
27	photometr., autom.	1,76	-0,300	-2,87	
28	HPLC	2,11	0,045	0,43	
32	photometr., autom.	2,10	0,040	0,38	
33	photometr.	1,95	-0,110	-1,05	
40	photometr., autom.	2,16	0,100	0,96	
41	HPLC	2,02	-0,040	-0,38	
43	photometr.	1,95	-0,110	-1,05	
47	photometr., autom.	2,05	-0,010	-0,10	
49	photometr.	2,13	0,070	0,67	
50	photometr., autom.	2,14	0,080	0,77	
52	HPLC	2,27	0,214	2,05	
57	photometr., autom.	2,20	0,140	1,34	
58	photometr., autom.	2,23	0,168	1,61	
59	photometr.	2,04	-0,020	-0,19	
60	photometr., autom.	2,02	-0,040	-0,38	
61	HPLC	2,24	0,180	1,72	
63	photometr.	1,80	-0,260	-2,49	
70	photometr.	2,14	0,080	0,77	
79	photometr.	1,88	-0,180	-1,72	
90	HPLC	2,21	0,150	1,44	
100	HPLC	1,90	-0,160	-1,53	

6.17.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,88	-0,180	-1,72	-0,79	
202	FTIR	1,65	-0,410	-3,92	-1,81	
203	FTIR	1,68	-0,380	-3,64	-1,67	
204	FTIR	1,95	-0,110	-1,05	-0,48	
205	FTIR	1,92	-0,140	-1,34	-0,62	
206	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
208	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
209	FTIR	1,96	-0,100	-0,96	-0,44	
210	FTIR	2,21	0,150	1,44	0,66	
211	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
213	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
215	FTIR	1,60	-0,460	-4,40	-2,03	
216	FTIR	1,68	-0,380	-3,64	-1,67	
217	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
218	FTIR	3,23	1,170	11,19	5,15	(*)
219	FTIR	1,91	-0,150	-1,44	-0,66	
220	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
221	FTIR	2,15	0,090	0,86	0,40	
222	FTIR	1,93	-0,130	-1,24	-0,57	
223	FTIR	2,06	0,000	0,00	0,00	
224	FTIR	2,17	0,110	1,05	0,48	
225	FTIR	1,80	-0,260	-2,49	-1,15	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	2,08	0,020	0,19	0,09	
227	FTIR	2,35	0,290	2,77	1,28	
228	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
229	FTIR	1,96	-0,100	-0,96	-0,44	
230	FTIR	2,03	-0,030	-0,29	-0,13	
231	FTIR	1,61	-0,450	-4,31	-1,98	
232	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
234	FTIR	1,89	-0,170	-1,63	-0,75	
236	FTIR	2,33	0,270	2,58	1,19	
238	FTIR	1,81	-0,250	-2,39	-1,10	
239	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
242	FTIR	2,01	-0,050	-0,48	-0,22	
243	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
244	FTIR	1,80	-0,260	-2,49	-1,15	
245	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
246	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
247	FTIR	1,99	-0,070	-0,67	-0,31	
248	FTIR	1,85	-0,210	-2,01	-0,93	
249	FTIR	1,85	-0,210	-2,01	-0,93	
251	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
252	FTIR	1,73	-0,330	-3,16	-1,45	
254	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
256	FTIR	1,80	-0,260	-2,49	-1,15	
257	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
258	FTIR	2,83	0,770	7,37	3,39	
259	FTIR	1,89	-0,170	-1,63	-0,75	
260	FTIR	2,30	0,240	2,30	1,06	
261	FTIR	1,99	-0,070	-0,67	-0,31	
262	FTIR	1,50	-0,560	-5,36	-2,47	
263	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
264	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
267	FTIR	1,74	-0,320	-3,06	-1,41	
268	FTIR	2,20	0,140	1,34	0,62	
269	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
270	FTIR	2,30	0,240	2,30	1,06	
271	FTIR	1,75	-0,310	-2,97	-1,37	
272	FTIR	2,01	-0,050	-0,48	-0,22	
273	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
274	FTIR	1,80	-0,260	-2,49	-1,15	
275	FTIR	2,30	0,240	2,30	1,06	
276	FTIR	1,92	-0,140	-1,34	-0,62	
277	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
278	FTIR	1,21	-0,850	-8,13	-3,74	
279	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
280	FTIR	5,20	3,140	30,04	13,83	(*)
281	FTIR	1,85	-0,210	-2,01	-0,93	
282	FTIR	1,80	-0,260	-2,49	-1,15	
283	FTIR	1,90	-0,160	-1,53	-0,70	
284	FTIR	2,04	-0,025	-0,24	-0,11	
285	FTIR	0,00	-2,060	-19,71	-9,07	(*)
286	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
320	FTIR	2,10	0,040	0,38	0,18	
321	FTIR	1,84	-0,220	-2,10	-0,97	
339	FTIR	1,40	-0,660	-6,31	-2,91	
346	FTIR	2,00	-0,060	-0,57	-0,26	
351	FTIR	2,30	0,240	2,30	1,06	

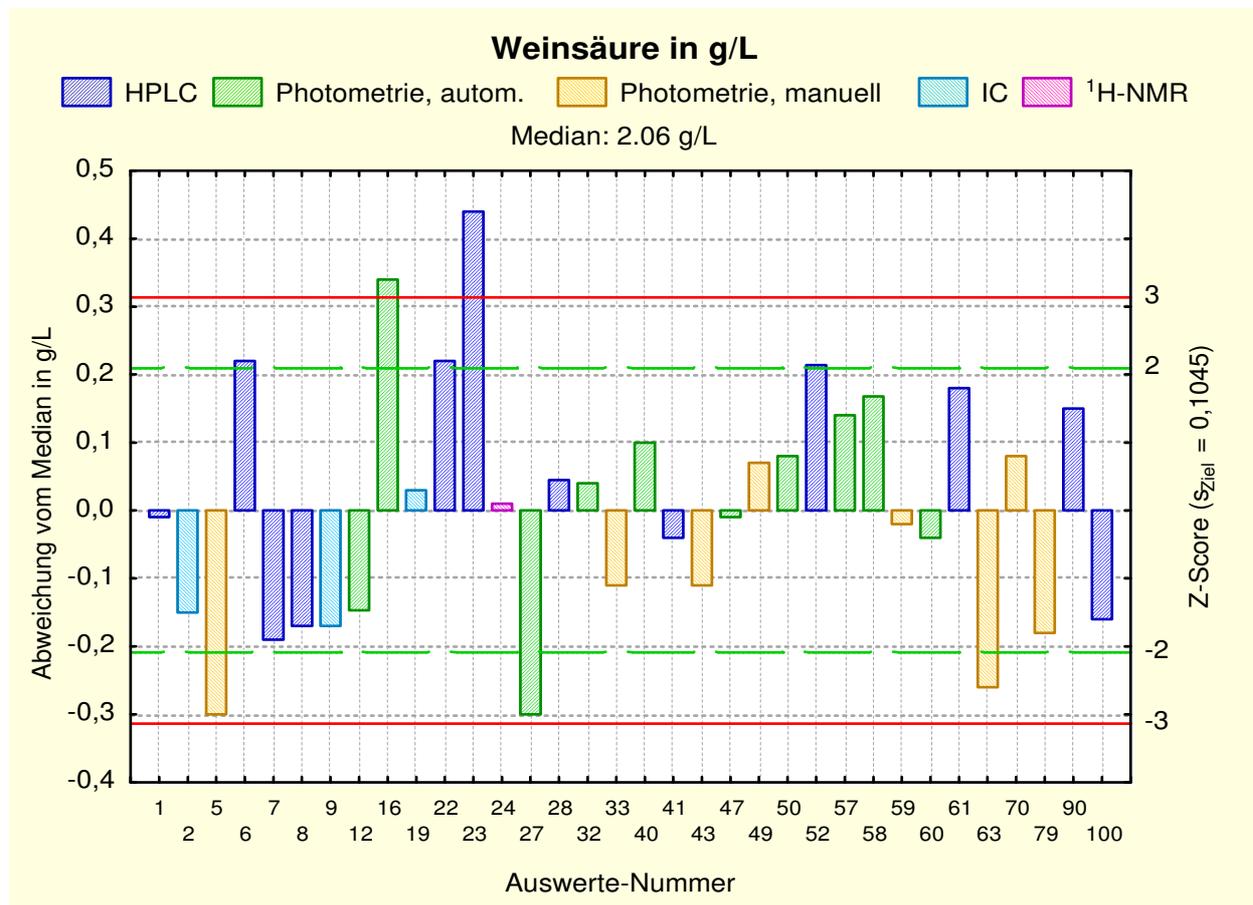
(*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

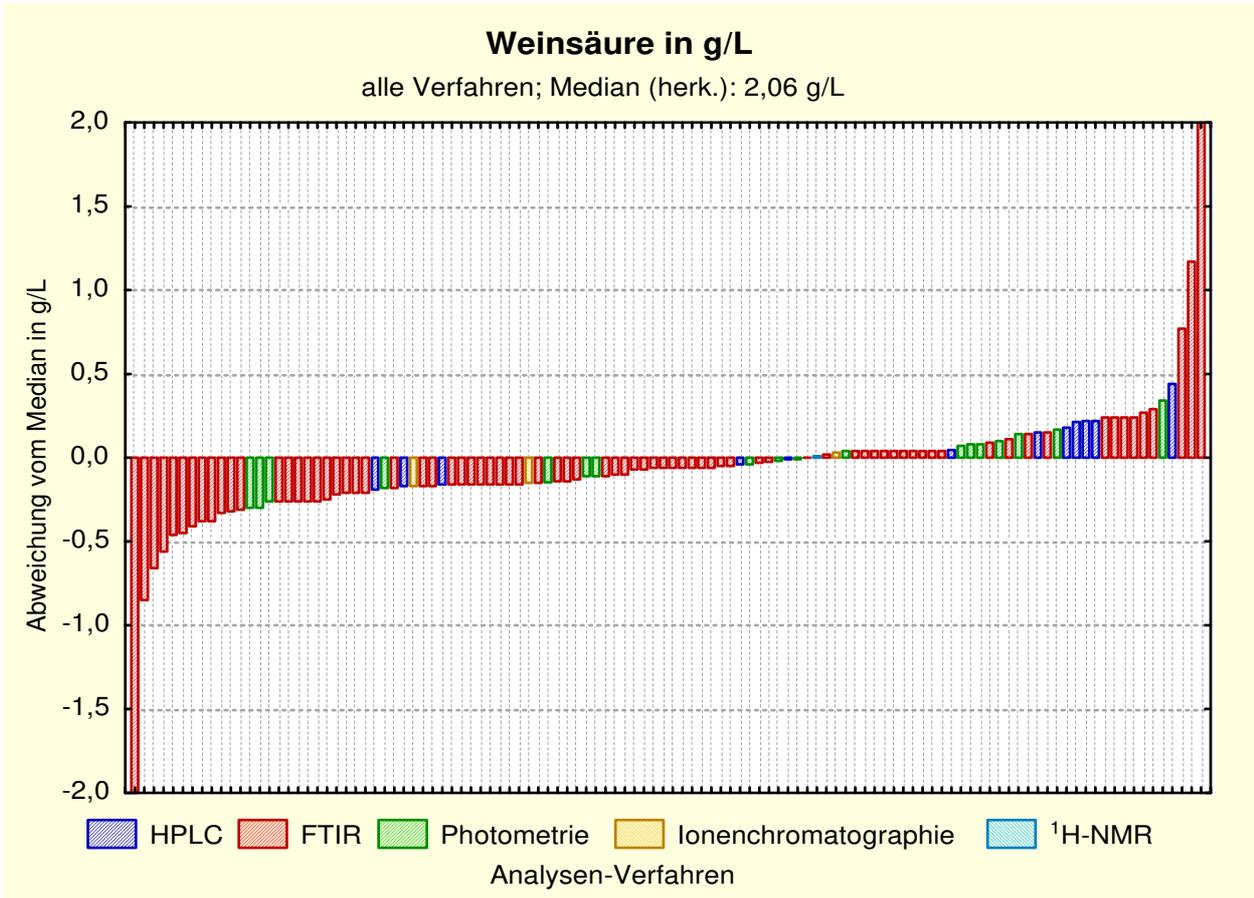
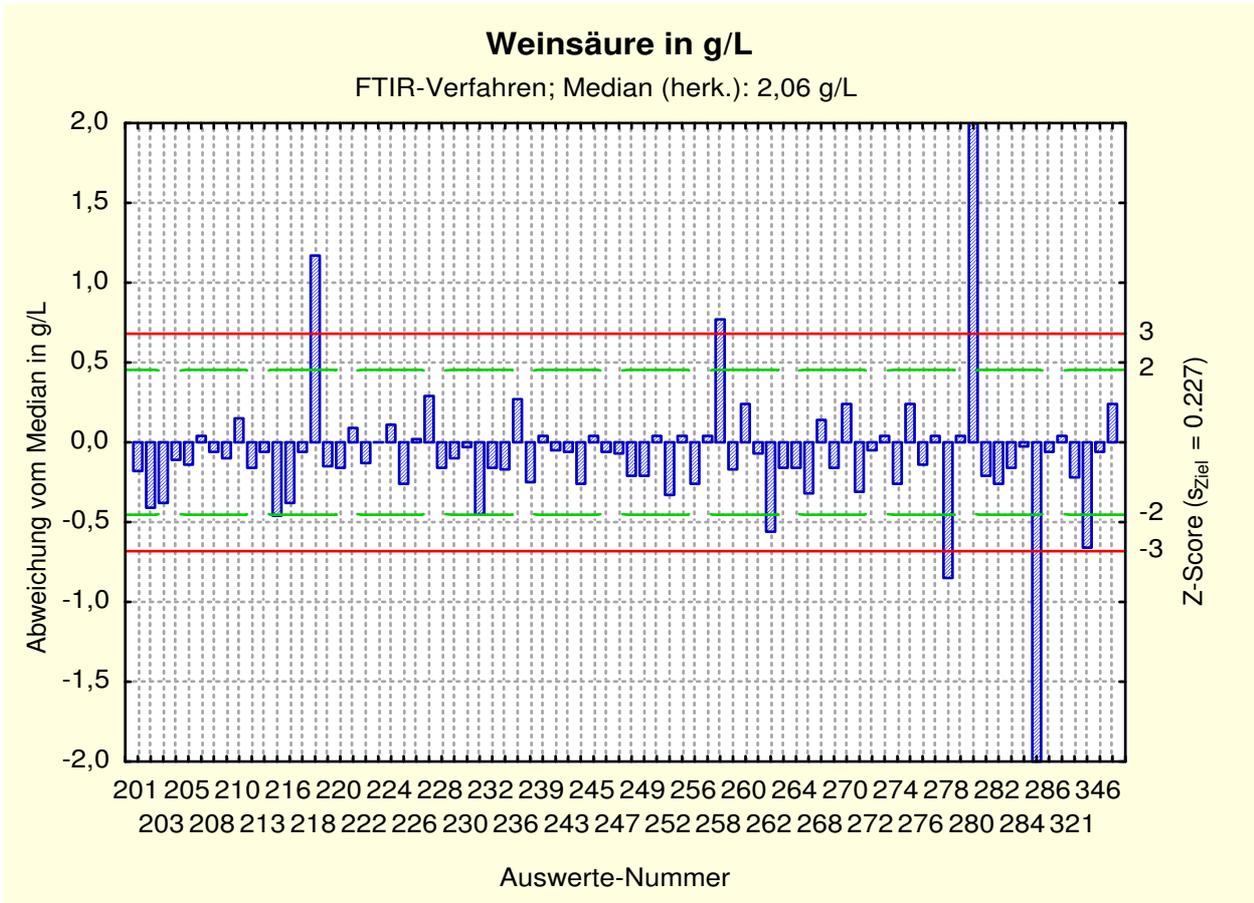
6.17.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	34
Minimalwert	1,76
Mittelwert	2,065
Median	2,060
Maximalwert	2,50
Standardabweichung (s_L)	0,179
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,031
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,105
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,71
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,79
Quotient (u_M/s_H)	0,29
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,14

6.17.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	2,132	0,209
photometr.	photometrisch nach Rebelein	8	1,956	0,160
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	10	2,102	0,171
IC	Ionenchromatographie	3	1,959	0,116
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,070	
	herkömmliche Verfahren	34	2,059	0,185
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	1,964	0,206





6.18 Flüchtige Säure [g/L]**6.18.1 Herkömmliche Laborergebnisse** (Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO ₂ unber.	0,590	0,0700	2,16	2,45	
05	Österreich, SO ₂ korr.	0,570	0,0500	1,54	1,75	
06	Gerhardt SO ₂ korr.	0,520	0,0000	0,00	0,00	
07	Halbmikro SO ₂ korr.	0,501	-0,0190	-0,59	-0,67	
12	Halbmikro SO ₂ korr.	0,664	0,1440	4,44	5,04	(**)
13	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,525	0,0050	0,15	0,18	
14	Gerhardt SO ₂ korr.	0,537	0,0170	0,52	0,60	
21	Gerhardt SO ₂ unber.	0,730	0,2100	6,47	7,35	(***)
23	Halbmikro SO ₂ unber.	0,550	0,0300	0,92	1,05	
26	OIV SO ₂ -korr.	0,540	0,0200	0,62	0,70	
29	Halbmikro SO ₂ korr.	0,438	-0,0820	-2,53	-2,87	
30	Wädenswil SO ₂ korr.	0,495	-0,0250	-0,77	-0,88	
32	Gerhardt SO ₂ korr.	0,540	0,0200	0,62	0,70	
33	Gerhardt SO ₂ korr.	0,350	-0,1700	-5,24	-5,95	(**)
34	Halbmikro SO ₂ unber.	0,550	0,0300	0,92	1,05	
39	Halbmikro SO ₂ unber.	0,672	0,1520	4,68	5,32	(***)
40	Gerhardt SO ₂ korr.	0,520	0,0000	0,00	0,00	
41	Gerhardt SO ₂ korr.	0,610	0,0900	2,77	3,15	
43	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,590	0,0700	2,16	2,45	
44	Halbmikro SO ₂ unber.	0,600	0,0800	2,46	2,80	
45	Gerhardt SO ₂ unber.	0,732	0,2120	6,53	7,42	(***)
47	Gerhardt SO ₂ korr.	0,550	0,0300	0,92	1,05	
49	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,639	0,1190	3,67	4,16	
51	Gerhardt SO ₂ korr.	0,540	0,0200	0,62	0,70	
52	Halbmikro SO ₂ korr.	0,500	-0,0200	-0,62	-0,70	
55	Gerhardt SO ₂ korr.	0,490	-0,0300	-0,92	-1,05	
58	Rentschler mod. korr.	0,498	-0,0220	-0,68	-0,77	
59	Halbmikro SO ₂ korr.	0,563	0,0430	1,32	1,50	
60	Büchi SO ₂ korr.	0,406	-0,1140	-3,51	-3,99	
62	Wädenswil SO ₂ korr.	0,497	-0,0230	-0,71	-0,81	
63	Halbmikro SO ₂ unber.	0,420	-0,1000	-3,08	-3,50	
66	Halbmikro SO ₂ unber.	0,750	0,2300	7,09	8,05	(***)
68	Wädenswil SO ₂ unber.	0,520	0,0000	0,00	0,00	
70	Halbmikro SO ₂ unber.	0,610	0,0900	2,77	3,15	
71	Wädenswil SO ₂ korr.	0,517	-0,0030	-0,09	-0,11	
72	Gerhardt SO ₂ korr.	0,430	-0,0900	-2,77	-3,15	
79	Halbmikro SO ₂ korr.	0,480	-0,0400	-1,23	-1,40	
98	Halbmikro SO ₂ unber.	0,656	0,1360	4,19	4,76	

Mit (**) gekennzeichnete, SO₂-korrigierte Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

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

6.18.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,590	0,0700	2,16	0,79	
202	FTIR	0,570	0,0500	1,54	0,56	
203	FTIR	0,570	0,0500	1,54	0,56	
204	FTIR	0,550	0,0300	0,92	0,34	
205	FTIR	0,640	0,1200	3,70	1,35	
206	FTIR	0,500	-0,0200	-0,62	-0,22	
208	FTIR	0,400	-0,1200	-3,70	-1,35	
209	FTIR	0,430	-0,0900	-2,77	-1,01	
210	FTIR	0,492	-0,0280	-0,86	-0,31	
211	FTIR	0,550	0,0300	0,92	0,34	
212	FTIR	0,440	-0,0800	-2,46	-0,90	
215	FTIR	0,520	0,0000	0,00	0,00	
216	FTIR	0,680	0,1600	4,93	1,80	
217	FTIR	0,330	-0,1900	-5,85	-2,13	
218	FTIR	0,250	-0,2700	-8,32	-3,03	
219	FTIR	0,460	-0,0600	-1,85	-0,67	
220	FTIR	0,600	0,0800	2,46	0,90	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
222	FTIR	0,510	-0,0100	-0,31	-0,11	
223	FTIR	0,550	0,0300	0,92	0,34	
225	FTIR	0,560	0,0400	1,23	0,45	
226	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
227	FTIR	0,709	0,1890	5,82	2,12	
228	FTIR	0,520	0,0000	0,00	0,00	
229	FTIR	0,620	0,1000	3,08	1,12	
230	FTIR	0,480	-0,0400	-1,23	-0,45	
231	FTIR	0,360	-0,1600	-4,93	-1,80	
232	FTIR	0,430	-0,0900	-2,77	-1,01	
234	FTIR	0,600	0,0800	2,46	0,90	
236	FTIR	0,410	-0,1100	-3,39	-1,23	
238	FTIR	0,610	0,0900	2,77	1,01	
239	FTIR	0,620	0,1000	3,08	1,12	
242	FTIR	0,590	0,0700	2,16	0,79	
243	FTIR	0,640	0,1200	3,70	1,35	
244	FTIR	0,630	0,1100	3,39	1,23	
245	FTIR	0,550	0,0300	0,92	0,34	
246	FTIR	0,420	-0,1000	-3,08	-1,12	
247	FTIR	0,570	0,0500	1,54	0,56	
248	FTIR	0,540	0,0200	0,62	0,22	
249	FTIR	0,590	0,0700	2,16	0,79	
251	FTIR	0,580	0,0600	1,85	0,67	
252	FTIR	0,240	-0,2800	-8,63	-3,14	
253	FTIR	0,500	-0,0200	-0,62	-0,22	
254	FTIR	0,530	0,0100	0,31	0,11	
256	FTIR	0,530	0,0100	0,31	0,11	
257	FTIR	0,620	0,1000	3,08	1,12	
259	FTIR	0,580	0,0600	1,85	0,67	
260	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
261	FTIR	0,820	0,3000	9,24	3,37	
262	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
263	FTIR	0,410	-0,1100	-3,39	-1,23	
264	FTIR	0,210	-0,3100	-9,55	-3,48	
265	FTIR	0,530	0,0100	0,31	0,11	
266	FTIR	0,500	-0,0200	-0,62	-0,22	
267	FTIR	0,460	-0,0600	-1,85	-0,67	
268	FTIR	0,460	-0,0600	-1,85	-0,67	
269	FTIR	0,560	0,0400	1,23	0,45	
270	FTIR	0,480	-0,0400	-1,23	-0,45	
271	FTIR	0,545	0,0250	0,77	0,28	
272	FTIR	0,610	0,0900	2,77	1,01	
273	FTIR	0,510	-0,0100	-0,31	-0,11	
274	FTIR	0,390	-0,1300	-4,01	-1,46	
275	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
276	FTIR	0,530	0,0100	0,31	0,11	
277	FTIR	0,690	0,1700	5,24	1,91	
278	FTIR	0,630	0,1100	3,39	1,23	
279	FTIR	0,600	0,0800	2,46	0,90	
280	FTIR	0,408	-0,1120	-3,45	-1,26	
281	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	
282	FTIR	0,510	-0,0100	-0,31	-0,11	
286	FTIR	0,460	-0,0600	-1,85	-0,67	
320	FTIR	0,610	0,0900	2,77	1,01	
321	FTIR	0,470	-0,0500	-1,54	-0,56	
339	FTIR	0,530	0,0100	0,31	0,11	
346	FTIR	0,740	0,2200	6,78	2,47	
351	FTIR	0,640	0,1200	3,70	1,35	
366	FTIR	0,470	-0,0500	-1,54	-0,56	
371	FTIR	0,450	-0,0700	-2,16	-0,79	

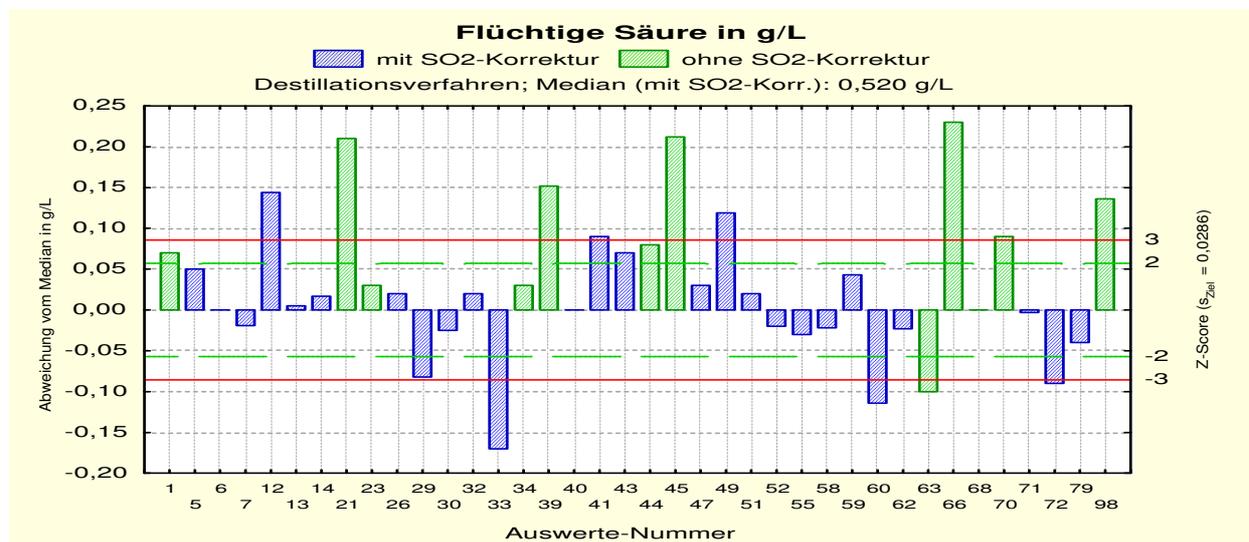
6.18.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO₂-Korrektur

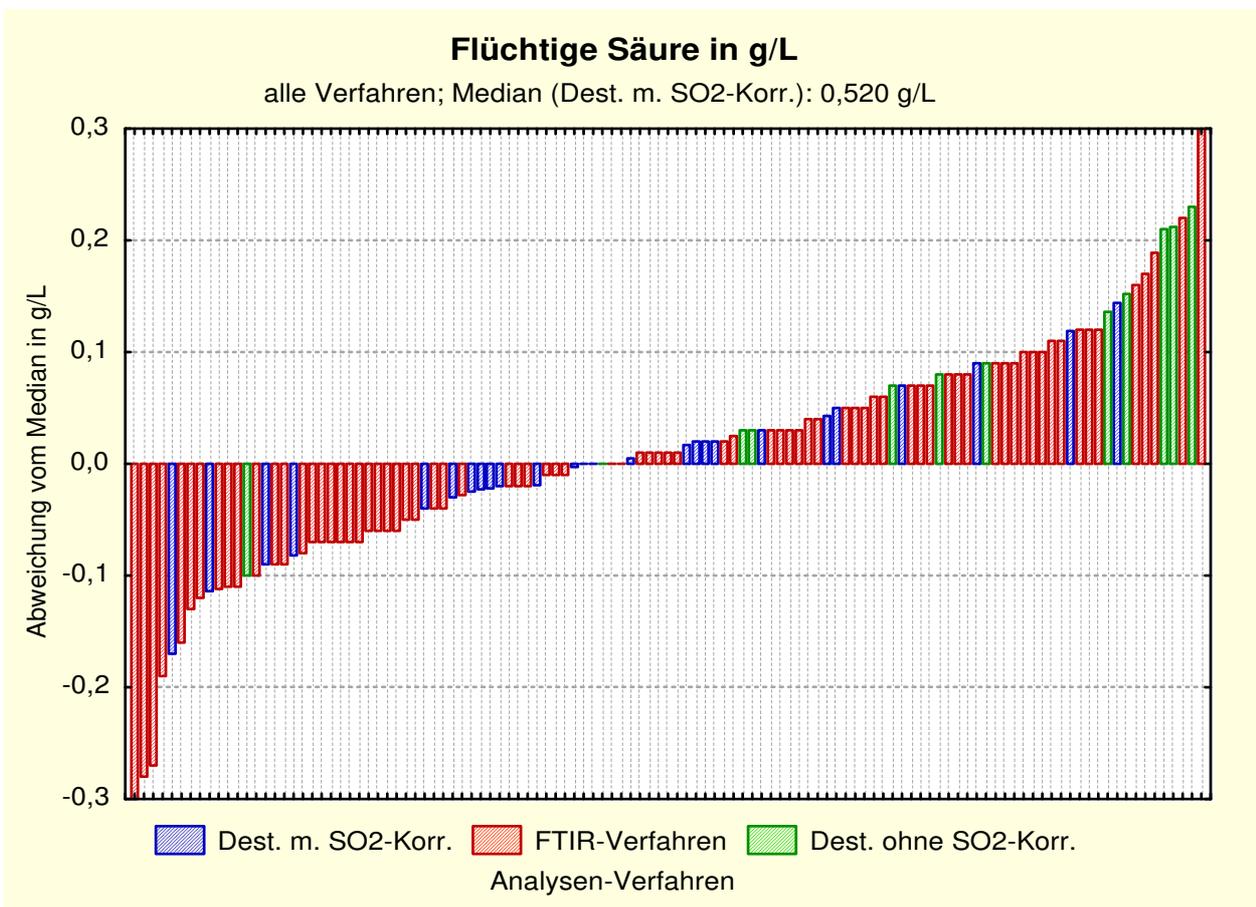
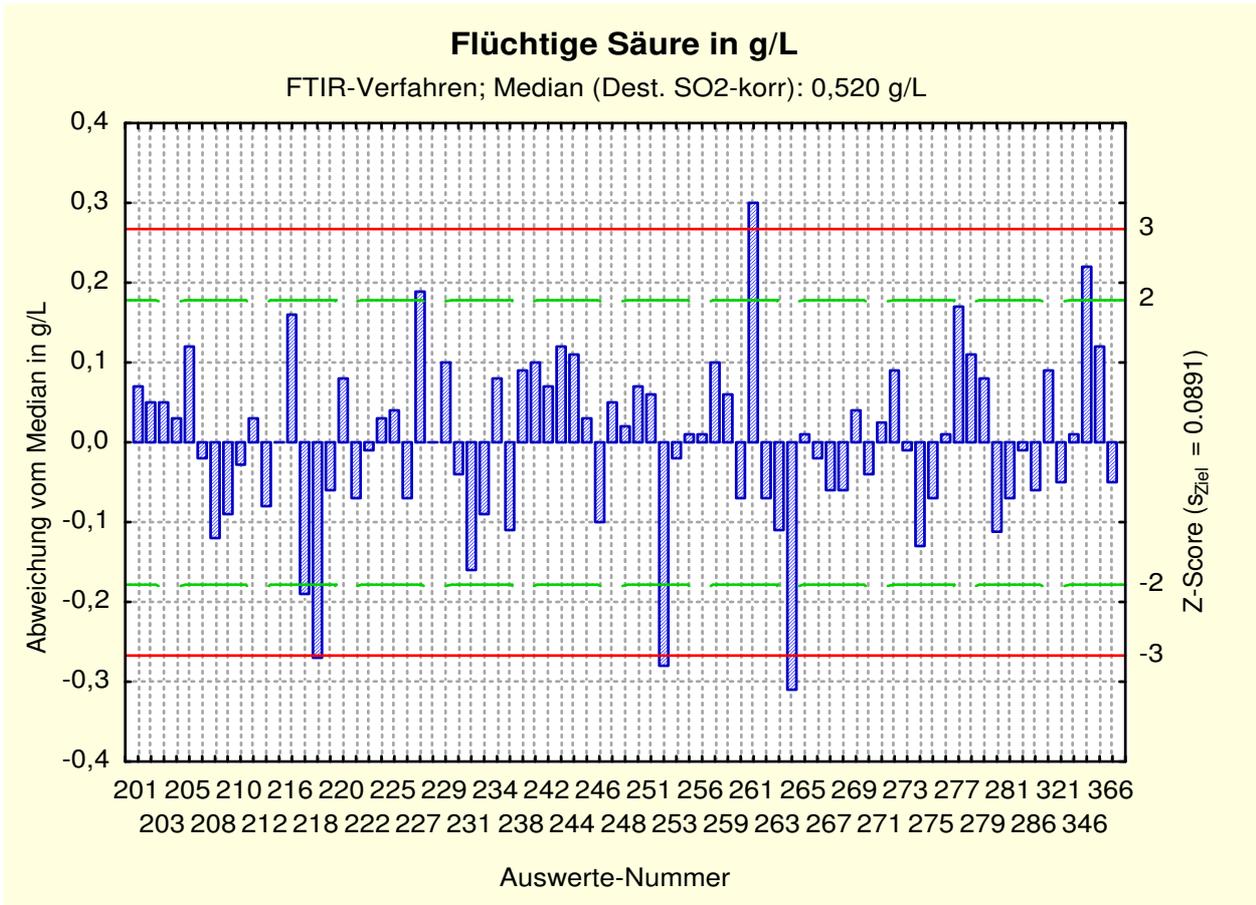
Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	24
Minimalwert	0,350	0,406
Mittelwert	0,5196	0,5207
Median	0,5200	0,5200
Maximalwert	0,664	0,639
Standardabweichung (s _L)	0,068	0,054
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,032	0,032
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,10	1,66
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	2,39	1,88
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,73	0,60
Quotient (u _M /s _H)	0,41	0,34
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,47	0,38
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,15	0,12

6.18.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	9	0,6040	0,0881
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	6	0,5212	0,0826
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5200	
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,5019	0,0116
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	2	0,7310	0,0016
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	3	0,5847	0,0648
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	10	0,5163	0,0630
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	1	0,5400	
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO ₂ -			
SO ₂ -korr	Einfluss korrigiert	1	0,4980	
Österreich	genaue Beschreibung siehe Fußnote	1	0,5700	
Büchi SO ₂ korr.	Destillationsapparat Büchi, SO ₂ -Einfluss korr.	1	0,4060	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	26	0,5202	0,0601
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,5240	0,0953

Methodenbuch für Weinanalysen in Österreich; 10ml entcarbonisierte Probe destillieren, 200 ml Destillat, 1. Titration mit Phenolphthalein und 0,1N NaOH bis zur Rosafärbung; 2. Titration Zugabe von 0,5 ml N NaOH, Nach 5 min Zugabe von 0,5 ml 2 N H₂SO₄ + 10 ml KJ Stärkelösung; Titration mit Jodsäurelösung auf hellblau.





6.19 Acetat (als Essigsäure) [g/L]**6.19.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse** (Bewertungsbasis HPLC + Enzymatik)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,448	-0,024	-0,80	
06	enzymat. autom.	0,473	0,001	0,03	
07	HPLC	0,550	0,078	2,61	
15	enzymat. autom.	0,520	0,048	1,61	
16	enzymat. autom.	0,460	-0,012	-0,40	
19	IC	0,790	0,318	10,64	(*)
22	HPLC	0,472	0,000	0,00	
24	NMR	0,470	-0,002	-0,07	
27	enzymat. autom.	0,500	0,028	0,94	
28	HPLC	0,530	0,058	1,94	
32	enzymat. autom.	0,560	0,088	2,94	
40	enzymat. autom.	0,510	0,038	1,27	
41	HPLC	0,560	0,088	2,94	
42	enzymat. autom.	0,470	-0,002	-0,07	
43	enzymat. autom.	0,470	-0,002	-0,07	
47	enzymat. autom.	0,460	-0,012	-0,40	
49	enzymat. autom.	0,440	-0,032	-1,07	
50	enzymat. autom.	0,490	0,018	0,60	
52	enzymat. Hand	0,420	-0,052	-1,74	
57	enzymat. autom.	0,450	-0,022	-0,74	
58	enzymat. autom.	0,493	0,021	0,70	
60	enzymat. autom.	0,330	-0,142	-4,75	
61	enzymat. autom.	0,500	0,028	0,94	
70	enzymat. autom.	0,500	0,028	0,94	
72	enzymat. autom.	0,430	-0,042	-1,40	
79	enzymat. Hand	0,435	-0,037	-1,24	
90	HPLC	0,451	-0,021	-0,70	
95	enzymat. autom.	0,430	-0,042	-1,40	
105	enzymat. autom.	0,620	0,148	4,95	
213	FTIR	0,500	0,028	0,94	
224	FTIR	0,460	-0,012	-0,40	
243	FTIR	0,640	0,168	5,62	(**)
258	FTIR	0,610	0,138	4,62	
262	FTIR	0,440	-0,032	-1,07	
283	FTIR	0,528	0,056	1,87	
284	FTIR	0,592	0,120	4,00	
285	FTIR	0,310	-0,162	-5,42	(**)

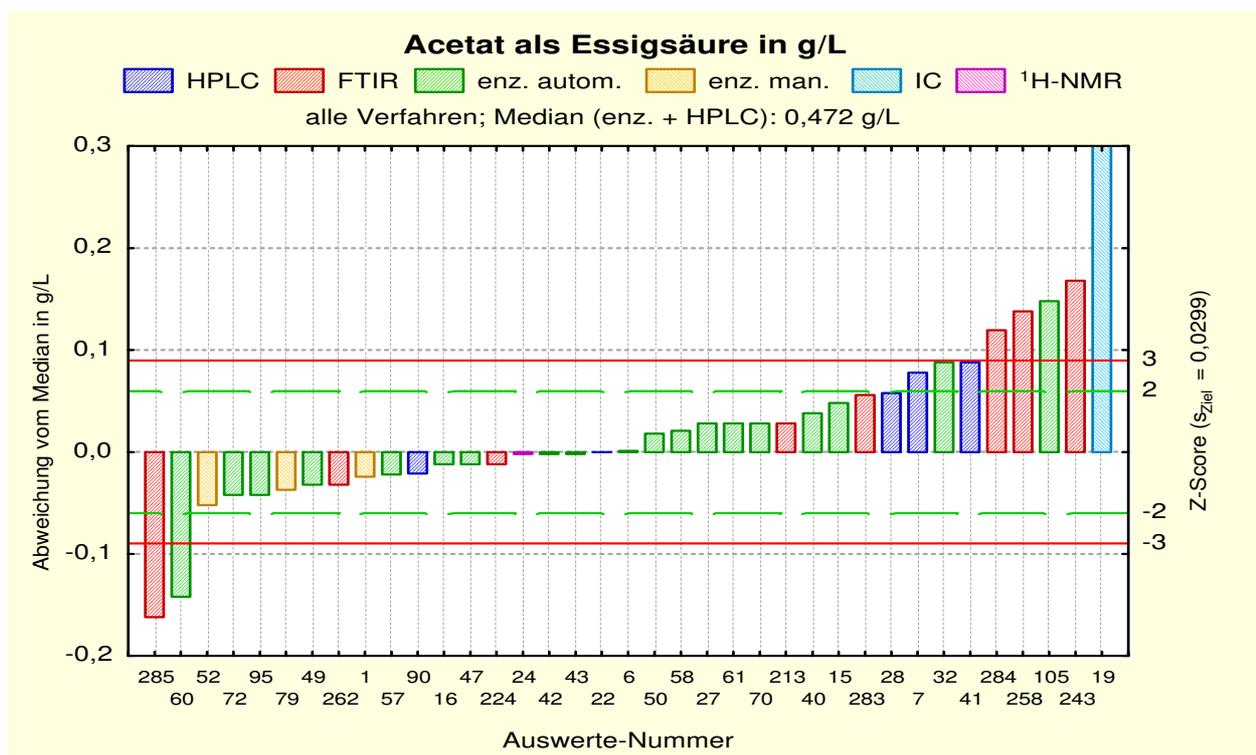
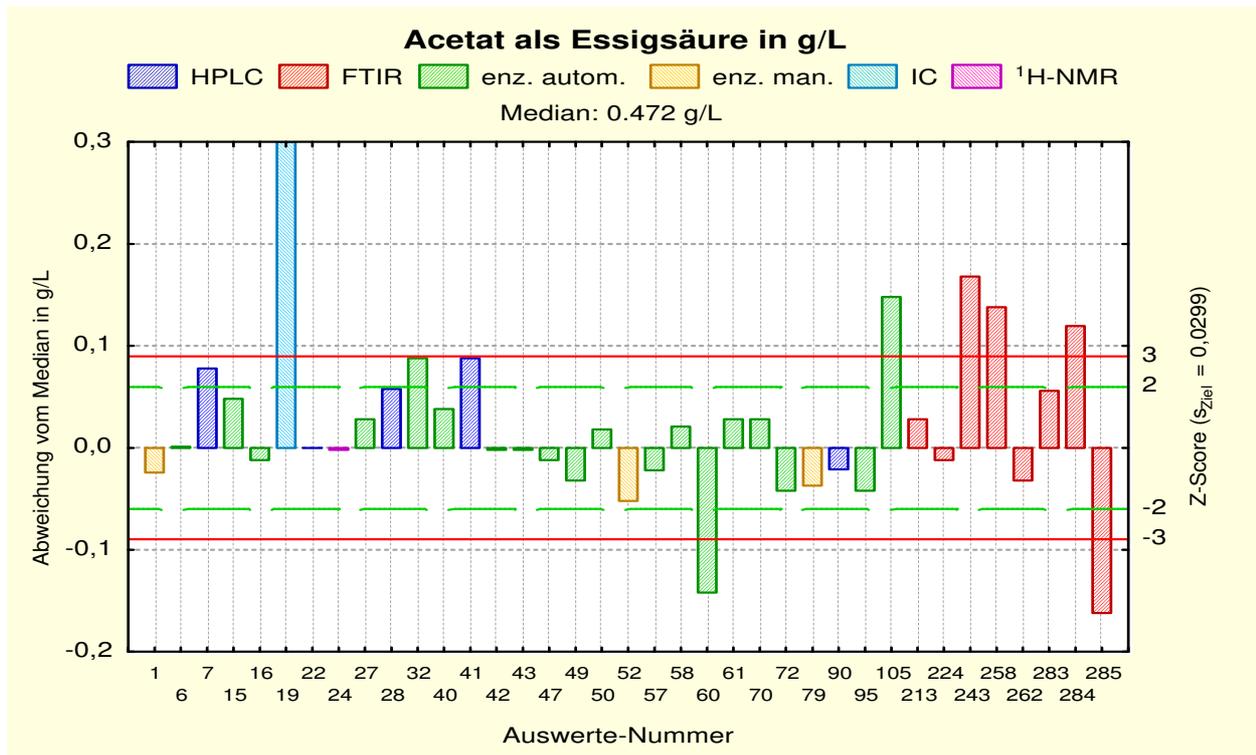
(*) Der Wert weicht um mehr als 50 % vom maßgeblichen Median ab und bleibt unberücksichtigt.

6.19.2 Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	27
Minimalwert	0,330
Mittelwert	0,480
Median	0,472
Maximalwert	0,620
Standardabweichung (s_L)	0,056
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,030
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,88
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,36
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	

6.19.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	0,5151	0,0507
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	19	0,4786	0,0412
Enzymat. Hand	Enzymatisch, manuell	3	0,4343	0,0159
HPLC + enzymatische Verfahren		27	0,4804	0,0494
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	8	0,5146	0,1115
IC	Ionenchromatographie	1	0,7900	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,4700	



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

6.20.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,597	-0,008	-0,22	-0,24	
06	HPLC	0,540	-0,065	-1,76	-1,95	
07	HPLC	0,722	0,117	3,17	3,52	
08	HPLC	0,710	0,105	2,84	3,16	
19	IC	0,410	-0,195	-5,28	-5,86	(**)
22	HPLC	0,918	0,313	8,48	9,41	(*)
23	HPLC	0,630	0,025	0,68	0,75	
24	NMR	0,530	-0,075	-2,03	-2,25	
28	HPLC	0,605	0,000	0,00	0,00	
52	HPLC	0,630	0,025	0,68	0,75	
61	HPLC	0,650	0,045	1,22	1,35	
72	enzymat. autom.	0,570	-0,035	-0,95	-1,05	
90	HPLC	0,580	-0,025	-0,68	-0,75	
100	HPLC	0,500	-0,105	-2,84	-3,16	
102	IC	0,661	0,056	1,52	1,68	

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

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

6.20.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,597	-0,008	-0,22	-0,24	
05	enz.(L-), autom.	0,520	-0,085	-2,30	-2,56	
06	enz.(L-), autom.	0,592	-0,013	-0,35	-0,39	
09	enz.(L-), autom.	0,640	0,035	0,95	1,05	
10	enz.(L-) Hand	0,640	0,035	0,95	1,05	
12	enz.(L-), autom.	0,495	-0,110	-2,98	-3,31	
16	enz.(L-), autom.	0,500	-0,105	-2,84	-3,16	
22	enz.(L-), autom.	0,640	0,035	0,95	1,05	
27	enz.(L-), autom.	0,680	0,075	2,03	2,25	
32	enz.(L-), autom.	0,700	0,095	2,57	2,86	
40	enz.(L-), autom.	0,730	0,125	3,39	3,76	
42	enz.(L-), autom.	0,570	-0,035	-0,95	-1,05	
47	enz.(L-), autom.	0,620	0,015	0,41	0,45	
49	enz.(L-), autom.	0,710	0,105	2,84	3,16	
50	enz.(L-), autom.	0,650	0,045	1,22	1,35	
57	enz.(L-), autom.	0,700	0,095	2,57	2,86	
58	enz.(L-), autom.	0,595	-0,010	-0,27	-0,30	
59	enz.(L-) Hand	0,478	-0,127	-3,44	-3,82	
60	enz.(L-) Hand	0,564	-0,041	-1,11	-1,23	
61	enz.(L-), autom.	0,630	0,025	0,68	0,75	
66	enz.(L-) Hand	0,600	-0,005	-0,14	-0,15	
70	enz.(L-), autom.	0,610	0,005	0,14	0,15	
72	enz.(L-), autom.	0,550	-0,055	-1,49	-1,65	
79	enz.(L-) Hand	0,565	-0,040	-1,08	-1,20	
90	enz.(L-), autom.	0,640	0,035	0,95	1,05	
95	enz.(L-), autom.	0,570	-0,035	-0,95	-1,05	

6.20.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,470	-0,135	-3,66	-0,62	
202	FTIR	0,710	0,105	2,84	0,48	
203	FTIR	0,450	-0,155	-4,20	-0,71	
204	FTIR	0,310	-0,295	-7,99	-1,35	
205	FTIR	0,320	-0,285	-7,72	-1,31	
206	FTIR	0,670	0,065	1,76	0,30	
208	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
209	FTIR	0,490	-0,115	-3,12	-0,53	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
210	FTIR	0,800	0,195	5,28	0,89	
211	FTIR	0,600	-0,005	-0,14	-0,02	
213	FTIR	0,770	0,165	4,47	0,76	
215	FTIR	0,900	0,295	7,99	1,35	
216	FTIR	0,560	-0,045	-1,22	-0,21	
217	FTIR	0,350	-0,255	-6,91	-1,17	
218	FTIR	2,060	1,455	39,42	6,67	(*)
219	FTIR	0,630	0,025	0,68	0,11	
220	FTIR	0,300	-0,305	-8,26	-1,40	
221	FTIR	0,180	-0,425	-11,51	-1,95	
222	FTIR	0,970	0,365	9,89	1,67	
223	FTIR	0,810	0,205	5,55	0,94	
224	FTIR	0,580	-0,025	-0,68	-0,11	
225	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
226	FTIR	0,390	-0,215	-5,82	-0,99	
227	FTIR	0,620	0,015	0,41	0,07	
228	FTIR	0,710	0,105	2,84	0,48	
229	FTIR	0,510	-0,095	-2,57	-0,44	
230	FTIR	0,200	-0,405	-10,97	-1,86	
231	FTIR	0,960	0,355	9,62	1,63	
232	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
234	FTIR	0,450	-0,155	-4,20	-0,71	
236	FTIR	0,720	0,115	3,12	0,53	
238	FTIR	0,490	-0,115	-3,12	-0,53	
239	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
242	FTIR	0,440	-0,165	-4,47	-0,76	
243	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
244	FTIR	0,230	-0,375	-10,16	-1,72	
246	FTIR	0,300	-0,305	-8,26	-1,40	
247	FTIR	0,490	-0,115	-3,12	-0,53	
248	FTIR	0,600	-0,005	-0,14	-0,02	
249	FTIR	0,860	0,255	6,91	1,17	
251	FTIR	0,700	0,095	2,57	0,44	
252	FTIR	0,250	-0,355	-9,62	-1,63	
254	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
256	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
257	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
258	FTIR	0,320	-0,285	-7,72	-1,31	
259	FTIR	0,610	0,005	0,14	0,02	
260	FTIR	0,440	-0,165	-4,47	-0,76	
261	FTIR	0,600	-0,005	-0,14	-0,02	
262	FTIR	0,200	-0,405	-10,97	-1,86	
263	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
264	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
266	FTIR	0,200	-0,405	-10,97	-1,86	
267	FTIR	1,100	0,495	13,41	2,27	
268	FTIR	0,390	-0,215	-5,82	-0,99	
269	FTIR	0,700	0,095	2,57	0,44	
270	FTIR	0,690	0,085	2,30	0,39	
271	FTIR	0,600	-0,005	-0,14	-0,02	
272	FTIR	1,010	0,405	10,97	1,86	
273	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
274	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
275	FTIR	1,000	0,395	10,70	1,81	
276	FTIR	0,380	-0,225	-6,10	-1,03	
277	FTIR	0,600	-0,005	-0,14	-0,02	
278	FTIR	1,000	0,395	10,70	1,81	
279	FTIR	0,100	-0,505	-13,68	-2,32	
280	FTIR	0,800	0,195	5,28	0,89	
281	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
282	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
283	FTIR	0,610	0,005	0,14	0,02	
284	FTIR	0,050	-0,555	-15,04	-2,55	
285	FTIR	<= 0	-0,605	-16,39	-2,78	
286	FTIR	0,100	-0,505	-13,68	-2,32	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
320	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
321	FTIR	0,510	-0,095	-2,57	-0,44	
339	FTIR	0,400	-0,205	-5,55	-0,94	
346	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
351	FTIR	0,500	-0,105	-2,84	-0,48	
366	FTIR	0,100	-0,505	-13,68	-2,32	

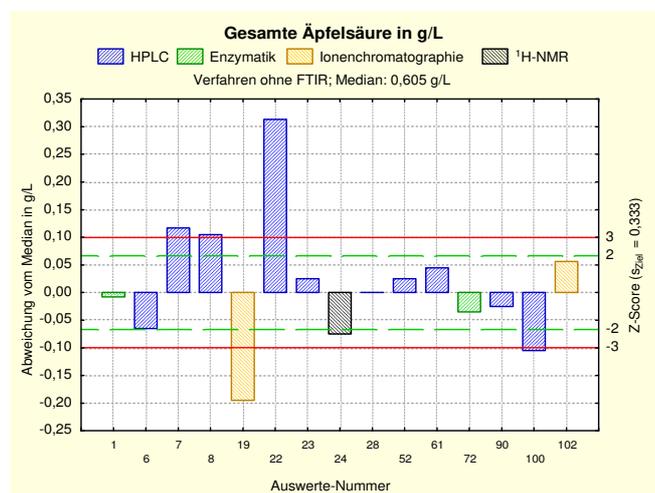
Der Gehalt an Äpfelsäure liegt an der **unteren Grenze des Anwendungsbereiches** der Methode. Die Z-Score der FTIR-Laboreergebnisse werden daher nur zur Information in grauer Schrift ausgewiesen.

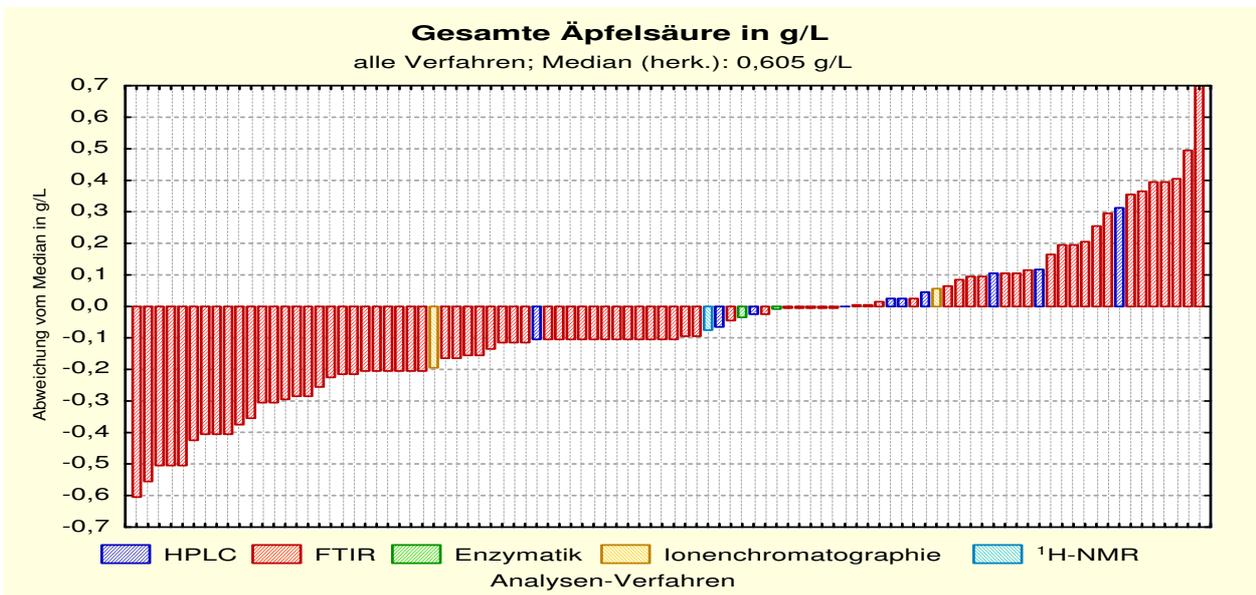
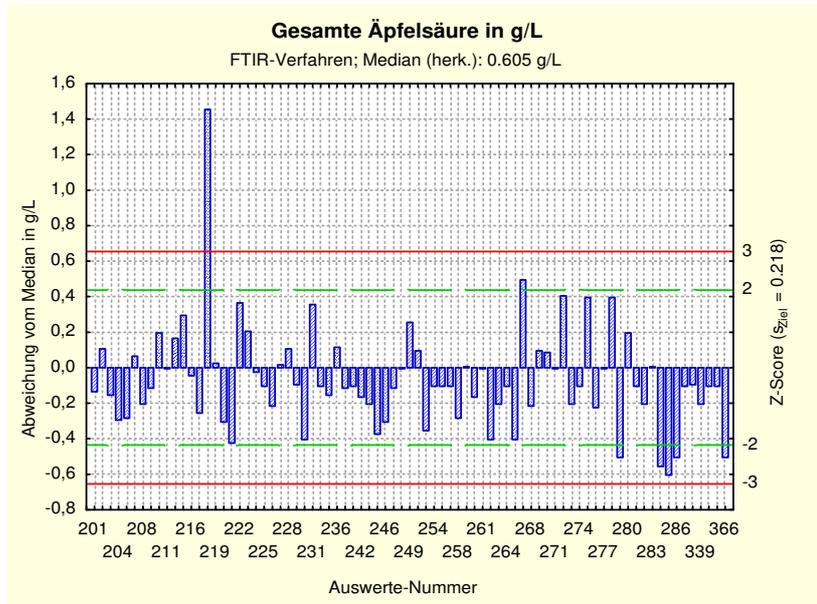
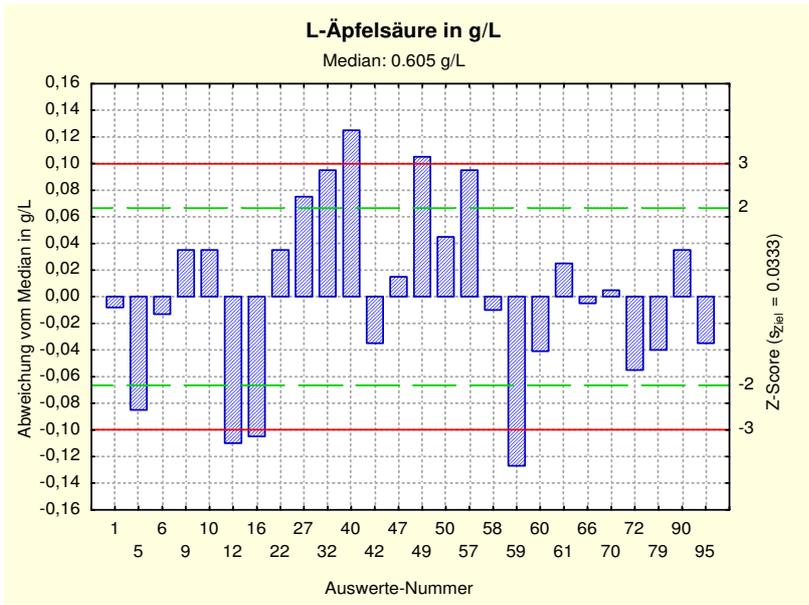
6.20.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	14	13	26
Minimalwert	0,41	0,50	0,48
Mittelwert	0,595	0,610	0,607
Median	0,601	0,605	0,605
Maximalwert	0,72	0,72	0,73
Standardabweichung (s _L)	0,083	0,067	0,067
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,022	0,019	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,037	0,037	0,037
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,033	0,033	0,033
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218	0,218	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,27	1,81	1,83
Quotient (s _L /s _{exp})	2,52	2,01	2,03
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,38	0,31	
Quotient (u _M /s _H)	0,61	0,50	0,36
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,67	0,56	0,40
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,10	0,09	

6.20.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	0,635	0,097
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	0,570	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	0,597	
IC	Ionenchromatographie	2	0,535	0,201
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,530	
	herkömmliche Verfahren	15	0,610	0,092
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	0,515	0,229
enz.(L-), autom.	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	20	0,618	0,077
enz.(L-) Hand	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	6	0,576	0,052
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	26	0,607	0,071





6.21 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]**6.21.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,54	0,261	2,29	
05	enzymat. autom.	2,11	-0,170	-1,49	
06	enzymat. autom.	2,28	0,000	0,00	
07	HPLC	2,31	0,030	0,26	
09	enzymat. autom.	2,29	0,010	0,09	
10	enzymat. Hand	2,50	0,220	1,93	
12	enzymat. autom.	1,77	-0,513	-4,50	
19	IC	2,45	0,170	1,49	
22	enzymat. autom.	2,31	0,030	0,26	
23	HPLC	2,18	-0,100	-0,88	
24	NMR	2,12	-0,160	-1,40	
28	HPLC	2,43	0,150	1,32	
41	HPLC	2,15	-0,130	-1,14	
52	HPLC	2,28	0,000	0,00	
61	HPLC	2,84	0,560	4,92	
66	enzymat. Hand	2,36	0,080	0,70	
72	enzymat. autom.	2,09	-0,190	-1,67	
90	HPLC	2,26	-0,020	-0,18	
95	enzymat. autom.	2,24	-0,040	-0,35	
100	HPLC	2,20	-0,080	-0,70	

6.21.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,04	0,237	2,54	2,42	
05	enz.(L-) autom.	1,75	-0,050	-0,54	-0,51	
06	enz.(L-) autom.	1,79	-0,007	-0,08	-0,07	
09	enz.(L-) autom.	1,78	-0,020	-0,21	-0,20	
10	enz.(L-) Hand	1,99	0,190	2,04	1,94	
12	enz.(L-) autom.	1,41	-0,394	-4,23	-4,03	
16	enz.(L-) autom.	1,80	0,000	0,00	0,00	
22	enz.(L-) autom.	1,84	0,040	0,43	0,41	
27	enz.(L-) autom.	1,95	0,150	1,61	1,53	
32	enz.(L-) autom.	1,80	0,000	0,00	0,00	
40	enz.(L-) autom.	1,80	0,000	0,00	0,00	
47	enz.(L-) autom.	1,89	0,090	0,97	0,92	
49	enz.(L-) autom.	2,06	0,260	2,79	2,66	
50	enz.(L-) autom.	1,79	-0,010	-0,11	-0,10	
58	enz.(L-) autom.	1,86	0,063	0,68	0,64	
59	enz.(L-) Hand	1,66	-0,142	-1,52	-1,45	
60	enz.(L-) autom.	1,76	-0,040	-0,43	-0,41	
61	enz.(L-) autom.	1,82	0,020	0,21	0,20	
66	enz.(L-) Hand	1,84	0,039	0,42	0,40	
70	enz.(L-) autom.	1,88	0,080	0,86	0,82	
72	enz.(L-) autom.	1,62	-0,180	-1,93	-1,84	
79	enz.(L-) Hand	1,76	-0,040	-0,43	-0,41	
90	enz.(L-) autom.	1,96	0,160	1,72	1,63	
95	enz.(L-) autom.	1,80	0,000	0,00	0,00	

6.21.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,36	0,080	0,70	0,38	
202	FTIR	2,19	-0,090	-0,79	-0,43	
203	FTIR	1,57	-0,710	-6,23	-3,40	
204	FTIR	1,96	-0,320	-2,81	-1,53	
205	FTIR	2,74	0,460	4,04	2,20	
206	FTIR	2,72	0,440	3,86	2,11	
208	FTIR	2,20	-0,080	-0,70	-0,38	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
209	FTIR	2,06	-0,220	-1,93	-1,05	
210	FTIR	2,21	-0,070	-0,61	-0,33	
211	FTIR	2,30	0,020	0,18	0,10	
213	FTIR	1,97	-0,310	-2,72	-1,48	
215	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
216	FTIR	1,61	-0,670	-5,88	-3,21	
217	FTIR	1,67	-0,610	-5,35	-2,92	
218	FTIR	2,40	0,120	1,05	0,57	
219	FTIR	2,30	0,020	0,18	0,10	
220	FTIR	2,60	0,320	2,81	1,53	
221	FTIR	2,06	-0,220	-1,93	-1,05	
222	FTIR	2,16	-0,120	-1,05	-0,57	
223	FTIR	2,19	-0,090	-0,79	-0,43	
224	FTIR	2,15	-0,130	-1,14	-0,62	
225	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
226	FTIR	1,95	-0,330	-2,90	-1,58	
227	FTIR	2,16	-0,120	-1,05	-0,57	
228	FTIR	1,98	-0,300	-2,63	-1,44	
229	FTIR	1,86	-0,420	-3,69	-2,01	
230	FTIR	2,35	0,070	0,61	0,33	
231	FTIR	1,99	-0,290	-2,55	-1,39	
232	FTIR	2,30	0,020	0,18	0,10	
234	FTIR	1,99	-0,290	-2,55	-1,39	
236	FTIR	2,48	0,200	1,76	0,96	
238	FTIR	1,98	-0,300	-2,63	-1,44	
239	FTIR	1,80	-0,480	-4,21	-2,30	
242	FTIR	2,14	-0,140	-1,23	-0,67	
243	FTIR	1,60	-0,680	-5,97	-3,25	
244	FTIR	2,58	0,300	2,63	1,44	
245	FTIR	1,90	-0,380	-3,34	-1,82	
246	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
247	FTIR	2,01	-0,270	-2,37	-1,29	
248	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
249	FTIR	2,19	-0,090	-0,79	-0,43	
251	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
252	FTIR	1,69	-0,590	-5,18	-2,82	
254	FTIR	2,00	-0,280	-2,46	-1,34	
256	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
257	FTIR	1,90	-0,380	-3,34	-1,82	
258	FTIR	1,79	-0,490	-4,30	-2,34	
259	FTIR	2,06	-0,220	-1,93	-1,05	
260	FTIR	1,64	-0,640	-5,62	-3,06	
261	FTIR	1,95	-0,330	-2,90	-1,58	
262	FTIR	1,68	-0,600	-5,27	-2,87	
263	FTIR	2,40	0,120	1,05	0,57	
264	FTIR	1,80	-0,480	-4,21	-2,30	
266	FTIR	2,30	0,020	0,18	0,10	
267	FTIR	2,59	0,310	2,72	1,48	
268	FTIR	2,03	-0,250	-2,19	-1,20	
269	FTIR	1,90	-0,380	-3,34	-1,82	
270	FTIR	1,80	-0,480	-4,21	-2,30	
271	FTIR	2,20	-0,080	-0,70	-0,38	
272	FTIR	1,96	-0,320	-2,81	-1,53	
273	FTIR	1,60	-0,680	-5,97	-3,25	
274	FTIR	1,75	-0,530	-4,65	-2,54	
275	FTIR	1,90	-0,380	-3,34	-1,82	
276	FTIR	2,16	-0,120	-1,05	-0,57	
277	FTIR	2,30	0,020	0,18	0,10	
278	FTIR	1,18	-1,100	-9,66	-5,26	(**)
279	FTIR	1,70	-0,580	-5,09	-2,78	
281	FTIR	1,75	-0,530	-4,65	-2,54	
282	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
283	FTIR	1,95	-0,330	-2,90	-1,58	
284	FTIR	2,11	-0,170	-1,49	-0,81	
285	FTIR	2,36	0,080	0,70	0,38	
286	FTIR	1,90	-0,380	-3,34	-1,82	
320	FTIR	2,50	0,220	1,93	1,05	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

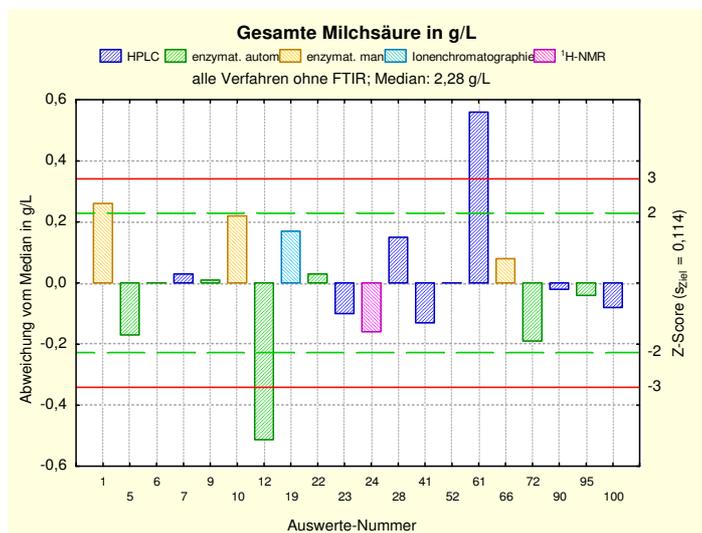
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
321	FTIR	2,39	0,110	0,97	0,53	
339	FTIR	2,10	-0,180	-1,58	-0,86	
346	FTIR	1,70	-0,580	-5,09	-2,78	
351	FTIR	2,20	-0,080	-0,70	-0,38	
366	FTIR	1,80	-0,480	-4,21	-2,30	

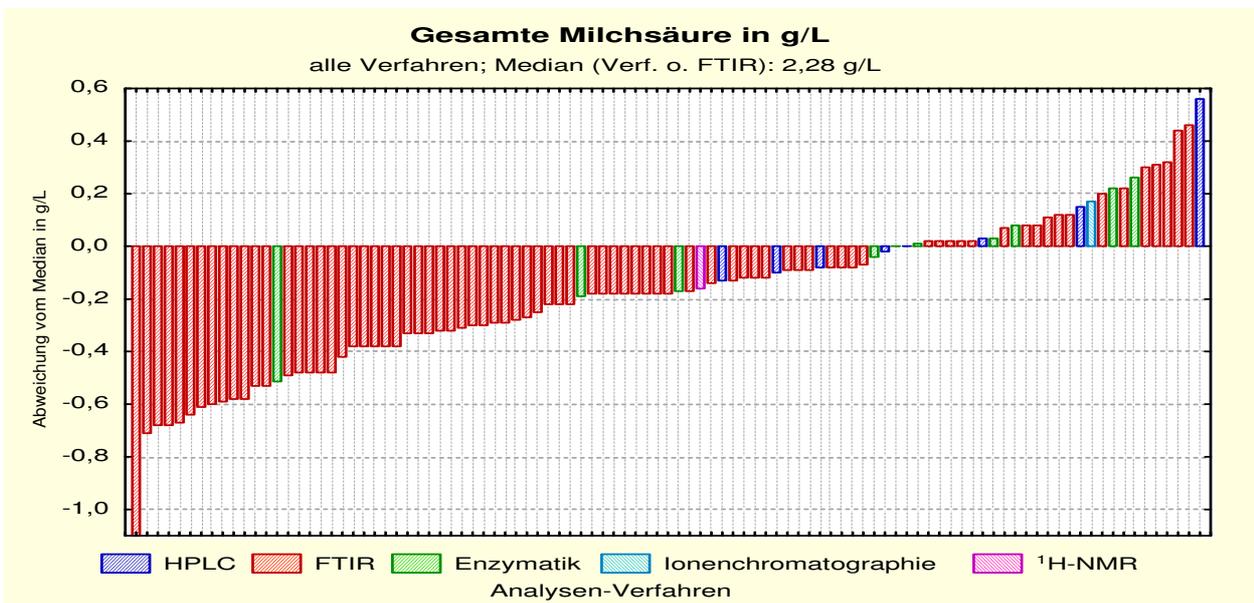
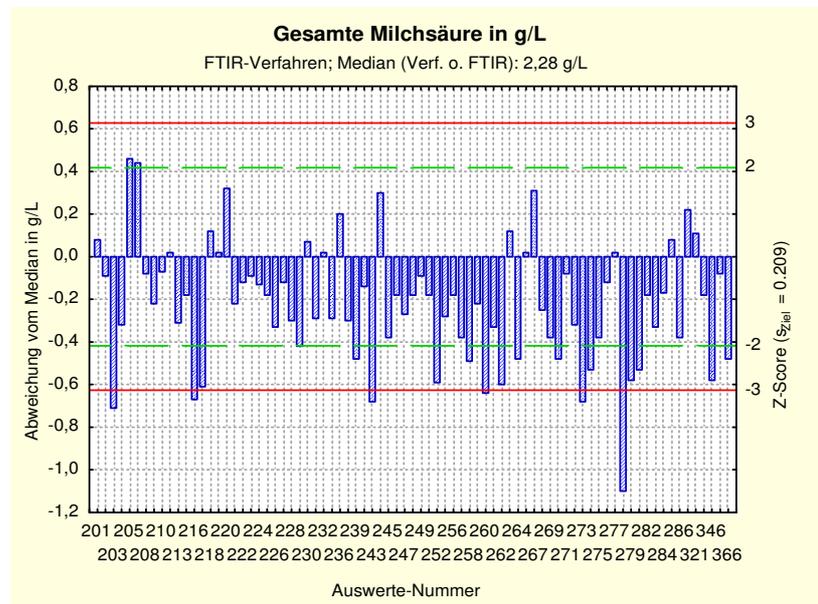
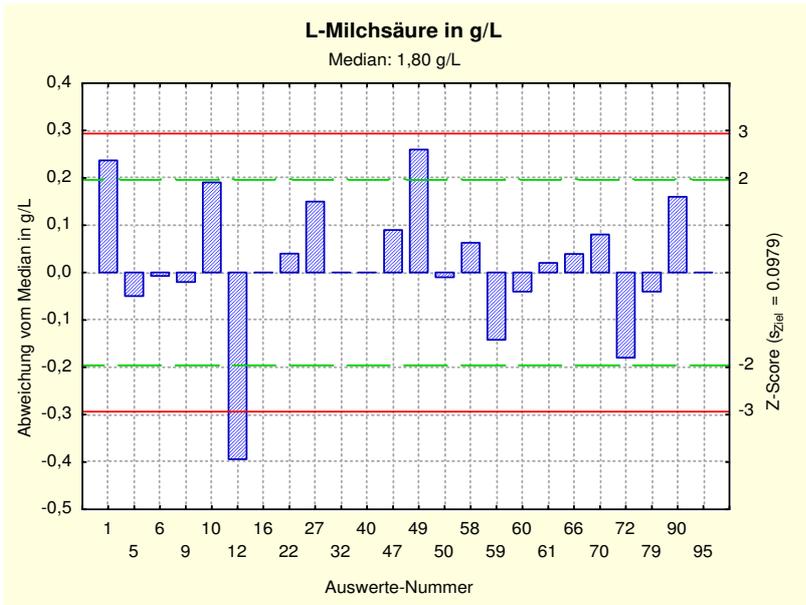
6.21.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L für :	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	HPLC + enz. alle Werte	alle Verfahren Z _{Max} = 4,5	alle Daten
Gültige Werte	18	18	24
Minimalwert	1,77	2,09	1,41
Mittelwert	2,285	2,283	1,819
Median	2,280	2,280	1,800
Maximalwert	2,84	2,54	2,06
Standardabweichung (s _L)	0,220	0,133	0,138
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,052	0,031	0,028
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,114	0,114	0,093
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,098
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,209	0,209	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,93	1,17	1,48
Quotient (s _L /s _{exp})			1,41
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,05	0,64	
Quotient (u _M /s _H)	0,46	0,28	0,30
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,29
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,25	0,15	

6.21.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	2,288	0,137
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	7	2,183	0,150
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	2,470	0,102
IC	Ionenchromatographie	1	2,450	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,120	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	20	2,283	0,171
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	2,053	0,282
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	1,821	0,090
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	1,857	0,179
	alle Verfahren L-Milchsäure	24	1,826	0,113





6.22 Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
13	QZ 3,17; rote Früchte, feine Taninstruktur, samtig und harmonisch
14	fruchtbetonte Nase, Trockenfrüchte, dahinter leichte Brettnote, geschmacklich zuerst sehr kräftig, später verbleibt der Wein sehr stumpf am Gaumen mit einer sehr nachhaltigen grünen Note
15	Gaumen sauber und saftig, milde Tannine, mittlere Dichte und Länge, dunkle Beerenfrüchte, sauber und ordentlich
16	Nase: fruchtig, würzig, Sauerkirsche, brandig; Mund: gute Säure- Zucker-Balance, gute Gerbstoffstruktur
17	in Ordnung
18	sensorisch einwandfrei, Barrique-Ausbau
19	entspricht der angegebenen Qualitätsklasse. In der Nase Barrique-Noten und rote Früchte. Harmonisches Zucker-Säure Verhältnis, etwas dünner Körper, im Abgang leicht adstringierend.
21	Farbe: rubinrot, bräunliche Reflexe; Geruch: reife, rote Früchte, Röstaromen, Holz; Geschmack: vollmundig, harmonisch, deutliche Holzfass/Barriquenoten, leicht adstringierend; 3,0 Punkte
24	Farbe: rot bis dunkelrot, typisch und blank; Bukett: dezentes Frucht-Aroma, leichte Holz-Note, fehlerfrei; Geschmack: trocken, leichte Frucht -Note, dezent gerbstoffbetont, fehlerfrei; Punk
25	Der Wein ist ok. Es ist kein Fehler im Geruch + Geschmack zu erkennen 2,5Punkte nach LWK
26	Durchschnittsnote: 2,5; WEIN IST NICHT HALBTROCKEN
28	schöne ausreichende Farbe, leichter Braunstich, pfeffrige Nase, dunkle Kirsche, Schokolade, harmonischer, dezent restsüßer Rotwein, ausreichende Taninstruktur, kraftvoll, nachhaltig im Abgang, gut entwickelt
29	Der Wein ist sensorisch in Ordnung. Er ist noch ein wenig zu frisch und kantig, was sich bei etwas länger geöffneter Probe verbessert. Der Zuckergehalt liegt knapp über den für halbtrocken vorgegeben
30	fehlerfrei, weich, neutrale Art, wenig Säure, saftig, kräftig rote Farbe
33	Probe durchschnittlich - Q-Zahl 2,5
34	gereift, brotig, leicht flüchtige Säure, Schokolade, Tanningabe, griffiges Tanningerüst, Kräuter, schlanke Struktur, technisch einwandfrei Standard
36	Aussehen: klar, rot. Geruch: Dezente Frucht, unauffällig. Geschmack: Deutliche Restsüße, dezente Tannine.
38	Nase: leichte Ester-Note, Geschmack: Zucker / Säure Verhältnis harmonisch, bei deutlichem Tanningeschmack; Punkte: 3,0
39	Kräftig , halbtrocken, rote Fruchtaromen, harmonisch ,leichte Holzaromen
40	Keine Beanstandung !!
44	In der Nase Lösungsmittel-Note; beerig-fruchtiger Geschmack; etwas metallisch. Qualitätszahl: 1,83
45	2015 Rhh QW halbtrocken Der Wein hat eine leichte Taninstruktur, mittlere Dichte, Holznote ist wahrnehmbar. Ein spitzer Abgang. In der Nase wirkt er eher etwas Luftig leichte Oxidationsnote. Gesamt
48	dezente Fruchtnoten, verhalten würziges Aroma, guter Körper und Gerbstoffbalance, mind. 3,5 Punkte (je nach Bezeichnung)
49	sensorisch unauffällig
50	Der Rotwein entspricht einer einfachen Basisqualität. Die Anforderungen für die Qualitätsweinprüfung sind erfüllt.
51	Geruch: fruchtig Geschmack: Säure kommt schmeckt etwas vor, Zucker grenzwertig für halbtrocken
52	leichte Oxidationsnote, Brombeere, zimtig.
53	Hoher Anteil an Cabernet Rebsorten, südländischer Weintyp. Leichte Brettanomyces-Note in Geruch und Geschmack. Bräunungsreflexe in der Farbe. Alterungsnoten vorhanden in Geruch und Geschmack.
54	Beurteilung noch Qualitätsweinprüfung: Geruch 2,5 Geschmack 3,0 Harmonie 3,0 Gesamt 2,83
55	Leichte Esternote, wenig Frucht. Hart im Abgang, grün.
56	ohne Beanstandung
57	schon leicht oxidierte Farbe, Geruch sauber, erinnert an Brombeer und reife Kirsche, Geschmack reife Tannine im Abgang; harmonisch anregend, Sortentypisch Spätburgunder
58	Sauber im Geruch, jedoch etwas flach (wenig Struktur); im Abgang belegend.
59	Wein weist Aromen von schwarzer Johannisbeere mit Kirschnoten auf. Weiterhin ist leichte Wacholderbeere erkennbar mit sanften Cassistönen. Im Geschmack ist er ebenfalls durch dunkle Früchte geprägt,
60	leicht oxidative Note im Geruch; etwas flüchtige Säure, stumpf, unharmonisch
61	2,5 Punkte
62	Fehlerfrei, ohne Beanstandung. 2,5 Punkte

Fortsetzung: Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
64	Dunkles Kirschtrot, mittlere Länge. Sauerkirscharomatik, vom Typ am ehesten Dornfelder an der Obergrenze halbtrocken. Säure für Rotwein kräftig, wird jedoch durch Restzucker abgefedert. Technisch anständig
111	3,0 Punkte
116	normale Qualität; ohne Fehler
117	Wein ist nicht halbtrocken
118	Geruch: 2,5 Punkte ; Geschmack: 2,5 Punkte; Harmonie: 2,0 Punkte; Qualitätszahl: 2,33 Punkte
120	Bewertung QWP: 2,0-2,5-2,5 = 2,33; etwas reif für 2015 Jahrgang
121	Aussehen: klar, kräftiges rubinrot mit dezenten braunen Reflexen; Geruch: verhalten, Reifenoten, dezente Aromen von Pflaume und Brombeere; Geschmack: harmonisch, weich, wenig Körper, für Jahrgang sehr reif
123	Der Wein ist aus dem halbtrockenen Bereich knapp raus (Säure + 10) Der Wein ist sauber und könnte eine Maischeerhitzung gehabt haben (fruchtiger Geruch). Punktezah für die Sensorik: 3,0
124	In Geruch und Geschmack sauber
125	Geruch: dezente Barriquenote, dezente Fruchtnote 2,5 Punkte; Geschmack: dezente Barriquenote, dezente Fruchtnote 3,0 Punkte; Harmonie 2,5 Punkte; Gesamtnote 2,7
126	Wein ist fruchtig, mit kräftiger Farbe, feine Säure
128	keine Beanstandung
129	Der Wein ist relativ leicht, etwas dünn, aber mit angenehmer Tanninstruktur. Der Restzucker liegt außerhalb der gesetzlichen Grenzen. Der Wein kann allerdings wegen der Toleranz von 1 g/l noch als halbtrocken vermarktet werden
130	o.k.
131	Der Wein wirkt sensorisch sehr mild, ist aber harmonisch. Die Bezeichnung halbtrocken ist nur durch den Toleranzwert von 1 g/L möglich.
132	Farbe: rubinrot, glänzend, leichte Braunreflexe; Geruch: Kirsche, Holznote, etwas phenolisch; Geschmack: fruchtiger Typ, Kirsche; einfach; unreife Phenole, schmeckbare Tannine, unharmonische Säure, leicht brandig; 2,4 Pkte
133	fruchtig, Aromen von dunklen Beeren, dezente Holznote, klar, reintönig, keine Fehler, leichter Rotwein
134	Struktur, Holz, eintönig, kräftig, rubinrot, leicht belegend im Abgang durch Tannine
135	Tannin- und Gerbstoffreich, grün, leichte Adstringenz, gute Lagerfähigkeit. Eventuell mit Holztaninen oder Chips gearbeitet. Qualitätsweinprüfung: 2,83-3 Punkte
136	angenehme Säure, BS, rund; leicht bräunlich, als 2015er schon reif
138	Der Rotwein ist geruchlich und geschmacklich in Ordnung.
139	Reintönig, sortentypisch, sensorisch unauffällig.
140	Der Wein hat wenig Fülle. Die Nase ist etwas animalisch. Quali-Punktzahl 2,67
141	Farbe: dunkles kirschtrot; Geruch: leicht dumpf, muffig und pilzig; Geschmack: für Rotwein untypische süß saure Richtung; Der Wein liegt knapp über der Grenze von halbtrocken, aber im Grenzbereich der Analysenmethode
142	Harmonischer, ausgewogener Rotwein
143	Wein hat schöne rote Farbe; im Geruch klar und fruchtig; geschmacklich leichter einfacher Rotwein. Entspricht §2 Anlage 2 d. LVO v. 1807.95
144	ohne Beanstandungen; Qualitätszahl 3,67
145	bräunlich helles Rot; das reife, gealterte Bukett ist durch biologische Tätigkeit in der Reinheit gestört; Bukett: 1,0 P; Geschmack: 2,0 P; Harmonie: 1,5 P; Durchschnitt = 1,5 Punkte
146	Farbe: typisch, blank; Geruch und Geschmack: reintönig, fruchtig, aromatisch; fehlerfrei
147	sensorisch bitter, breit; Punktzahl 1,83; Wein ist nicht halbtrocken.
148	reintönig sauber, Sensorisch ohne Fehler entspricht den analytischen Anforderungen zu : Rotwein halbtrocken
149	Geruch: 2,3
150	Farbe: rubinrot 2,5 Geruch: sauber, klar 2,5 Geschmack: harmonisch, ausgewogen 2,5 Gesamtpunkte: 2,5
151	Bouquet Brombeere Kirsch, Säure/Zucker ausgewogen, Geschmack leicht grünes Tanin, kleines Cuvée
152	keine wesentliche Beanstandung
153	Sehr gerbig und reif; Südeuropäischem Rotweinstil?; Wenig Frucht, sehr caramellig und marmeladig, Maischeerhitzung; Verhalten Süße; Sensorisch fehlerfrei, etwas plump.
154	keine Beanstandung; Analysewerte entsprechen "halbtrocken".
275	kräftige Säure, genügend Substanz, Sponti-Typ

7 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
ABC-Labor GmbH, Dr. Ralf Lutterbach u. Dr. Cornelia Schröder	54486	Mülheim
Ahr-Winzer eG, Betriebslabor	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Amt für Lebensmittelsicherheit und Tiergesundheit	CH 7001	Chur
Analytisches Labor Anselmann	67483	Edesheim
Analytisches Labor Link, Niederlassung Rheinhessen	67551	Worms-Pfeddersheim
Arauner Paul GmbH & Co KG	97306	Kitzingen/Main
Austria Juice Germany GmbH	55411	Bingen
Baden-Badener Winzergenossenschaft eG	76534	Baden-Baden
Badischer Winzerkeller EG	79206	Breisach
Bay. Landesanstalt für Weinbau und Obstbau Abt. Oenologie und Analytik -	97209	Veitshöchheim
Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit	97082	Würzburg
Bezirksskellerei Markgräflerland eG	79588	Efringen-Kirchen
Binderer St. Ursula GmbH	55387	Bingen
Bottwartaler Winzer eG	71723	Großbottwar
Braun Weinlabor e.K., Inh. Günter Braun	67435	Neustadt/W.
Bruker Optics GmbH	CH 8117	Fällanden
Bundesamt für Weinbau	A-7000	Eisenstadt
Bundesamt für Weinbau	A-7000	Eisenstadt
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Freiburg	79114	Freiburg
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Karlsruhe	76187	Karlsruhe
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Stuttgart	70736	Stuttgart
Deutsches Weintor eG	76831	Ilbesheim
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum - Rheinhessen-Nahe-Hunsrück	55276	Oppenheim
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum - Rheinpfalz	67435	Neustadt/W.
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum Mosel	54470	Bernkastel-Kues
Dr. Karl-Heinz Franzen und Hans-Jürgen Franzen	56814	Bremm
Fellbacher Weingärtner eG	70734	Fellbach
Felsengartenkellerei Besigheim eG	74394	Besigheim
Gebietswinzergenossenschaft Palmberg eG	67229	Laumersheim
Genossenschaftskellerei Heilbronn-Erlenbach-Weinsberg eG	74076	Heilbronn
Hochschule Geisenheim University	65366	Geisenheim
Institut f. Agrar- u. Umweltanalytik Lacher und Bannach GbR	6632	Freyburg / Unstrut
Institut für Hygiene und Umwelt Abteilung Lebensmittel II	20539	Hamburg
Institut Heidger KG	54518	Osann-Monzel
Jordan Analytik	97246	Eibelstadt
Josef Drathen GmbH & Co KG	56856	Zell
Julius Kühn Institut	76833	Siebelingen
Keller Oenolab	55278	Dexheim
Kiviks Musteri AB	Se-382 91	Nybro
Klingler Weinlabor	71336	Waiblingen
Kloster Limburg Weinhandel GmbH, Weinlabor Mittelhaardt	67098	Bad Dürkheim
KLUG Fachgroßhandel f. Kellereibedarf GmbH	55450	Langenlonsheim
Kost GmbH & Co. KG	55459	Aspishem
Lacher Laboratorium	79238	Ehrenkirchen
Landesamt für Verbraucherschutz Sachsen-Anhalt	06128	Halle/Saale
Landesbetrieb Hessisches Landeslabor	65203	Wiesbaden
Landesuntersuchungsamt Inst. f. Lebensmittelchemie und Arzneimittelprü-	55129	Mainz
Lehr- und Forschungszentrum für Wein- und Obstbau	A-3400	Klosterneuburg
Niedersächsisches Landesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsi-		
Lebensmittelinstitut Braunschweig	38124	Braunschweig
Peter Mertes KG	54470	Bernkastel-Kues
PK-Weinlabor	67273	Weisenheim/Berg
Porten Weinlabor, Inh. Mechthild Steck	56814	Bruttig-Fankel
Raiffeisen Lagerhaus Absdorf - Ziersdorf eGen Weinbaucenter Langenlois	A-3550	Langenlois
Reh-Kendermann GmbH Betriebslabor Bingen	55411	Bingen
Rheinberg-Kellerei GmbH	55411	Bingen
Rimuss- und Weinkellerei Rahm AG Tierarztpraxis Tomaszek	CH 8215	Hallau / Karlstein
Rotkäppchen-Mumm Sektkellereien GmbH	65343	Eltville
Rüdesheimer Weinkellerei GmbH	65385	Rüdesheim
Sektkellerei Am Turm Deidesheim-Speyer GmbH	67346	Speyer
Sektkellerei Henkell & Söhnlein	65187	Wiesbaden
Sektkellerei Schloss Wachenheim AG Labor	67157	Wachenheim
Sektkellerei Schloss Wachenheim, Betriebslabor	54294	Trier
SGS INSTITUT FRESENIUS GmbH	79108	Freiburg

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
Staatliche Lehr- und Versuchsanstalt	74189	Weinsberg
Staatliches Weinbauinstitut	79100	Freiburg
Tröndlin Önologie GmbH	79418	Schliengen
Wagner Vinocare GmbH	67278	Bockenheim
Wein- u. Bodenlabor Dr. Nilles	97332	Volkach
Wein- u. Bodenlabor G. E. Rebholz	55237	Flonheim
Wein-Laboratorium F. W. Langguth Erben	56831	Traben-Trarbach
Weinanalytik Dr. Michalsky / CoVINet GmbH i.G.	55283	Nierstein
Weinchemisches Labor Schöller	55294	Bodenheim
Weinchemisches Labor Schumacher	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Weinchemisches Labor Winkler	76829	Landau
Weingut Graf	76835	Weyher/Pfalz
Weinkellerei Adam Müller GmbH & Co KG	69181	Leimen
Weinkellerei Adam Trautwein	55237	Lonsheim
Weinkellerei Andreas Oster	56812	Cochem
Weinkellerei Emil Wissing GmbH	76887	Bad Bergzabern
Weinkellerei Hechtsheim GmbH	55129	Mainz
Weinkellerei Julius Kimmle GmbH & Co KG	76889	Kapellen-Drusweiler
Weinkellerei Ortwin Welter GmbH & Co KG	55270	Engelstadt
Weinkellerei Peter Herres KG	54292	Trier
Weinkellerei Peter Mertes KG	54470	Bernkastel-Kues
Weinkellerei Schmitt Söhne GmbH	54340	Longuich
Weinkellerei Zenzen GmbH & Co KG	56759	Kaisersesch
Weinlabor Beate Lex, Inh. Rudolf Lex	54340	Klüsserath
Weinlabor Bohn	56856	Zell
Weinlabor Bollig	54349	Trittenheim
Weinlabor Brenner	76887	Bad Bergzabern
Weinlabor Briegel e.K.	67146	Deidesheim
Weinlabor Carl Klein GmbH	97318	Kitzingen
Weinlabor Eckert	67574	Osthofen
Weinlabor Emmel	67483	Edesheim
Weinlabor Geissel	67169	Kallstadt
Weinlabor J. Neumann	67278	Bockenheim
Weinlabor Jakob Vogel, Inh. Werner Vogel	65366	Geisenheim
Weinlabor Jochen Faber	54492	Erden
Weinlabor Keßler	76829	Landau
Weinlabor Kiefer	67487	Maikammer
Weinlabor Klös	67578	Gimbsheim
Weinlabor Krauß	55291	Saulheim
Weinlabor Link, Zweigstelle Weisenheim	67256	Weisenheim a.S.
Weinlabor Michaeli	54453	Nittel
Weinlabor Mündel-Börtzler	67487	Maikammer
Weinlabor Peitz	55595	Wallhausen
Weinlabor Porn	54518	Osann-Monzel
Weinlabor Rößler	55599	Eckelsheim
Weinlabor Schmitt	55450	Langenlonsheim
Weinlabor U. Lieser	56841	Traben-Trarbach
Weinlabor Weinbautechniker	54536	Kröv
Weinlabor Wolfgang Schreml	55452	Guldental
Weinlaboratorien Dr. E.M.Kleinknecht	55543	Bad Kreuznach
Weinlaboratorien Dr. E.M.Kleinknecht	55232	Alzey
Wine-Analytics	54346	Mehring
Winzergemeinschaft Franken eG	97318	Kitzingen
Winzergenossenschaft Bickensohl	79235	Vogtsburg
Winzergenossenschaft Moselland eG	54470	Bernkastel-Kues
Winzergenossenschaft Moselland eG, Betriebslabor Rhodt	76835	Rhodt
Winzerkeller Hex vom Dasenstein	77876	Kappelrodeck
Winzerkeller Wiesloch eG	69168	Wiesloch
Winzerverein Hagnau	88709	Hagnau
WIV Wein International AG	55450	Langenlonsheim
WSB-Labor Ruzycski GbR	55278	Hahnheim
Württembergische Weingärtner-Zentralgenossenschaft e.G.	71696	Möglingen
Zentrallabor Witowski	55232	Alzey
Zentrallabor Witowski, Zweigst. Bechtheim	67595	Bechtheim
Zimmermann-Graeff & Müller GmbH & Co KG	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH & Co KG, Werk Bad Berzabern	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH & Co KG, - Zweigstelle Werk 2 -	56856	Zell/Mosel