



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung Wein 2022

Teil 1

Durchführung und Ergebnisse der Untersuchungen, Laborergebnisse zum Roséwein (FT22P01)

Die Laborvergleichsuntersuchung wurde für den Roséwein von der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz in Kooperation mit dem Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung durchgeführt.

Zum Gedenken an Herrn Dr. Reinhard Ristow († 31.08.2021)

Herr Dr. Reinhard Ristow wurde am 24. November 1935 in Bonn geboren. Nach dem Studium der Chemie und Lebensmittelchemie in Bonn und Hamburg promovierte er 1967 an dem Lehrstuhl für Lebensmittelchemie der Universität Hamburg. Nach einer Zwischenstation als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für tierärztliche Nahrungsmittelkunde der Universität Gießen widmete er sich ab 1972 beim Chemischen Untersuchungsamt Koblenz, dessen Leitung er 1977 übernahm, wieder ganz dem Verbraucherschutz. Am 1. September 1983 wurde Reinhard Ristow bis zu seinem Eintritt in den Ruhestand im November 2000 Leiter des Chemischen Untersuchungsamtes Speyers, dem heutigen Institut für Lebensmittelchemie Speyer im Landesuntersuchungsamt.



Der Name Ristow ist untrennbar mit der Durchführung von Wein-Ringversuchen verbunden, die er seit 1993 regelmäßig als externe Qualitätskontrolle für alle Wein untersuchenden Laboratorien durchführte. Bis zuletzt war er sehr engagiert und aktiv bei seiner „Lebensaufgabe“. Auf der Mitgliederversammlung der Deutschen Weinanalytiker e.V. am 25. Juni 2021 wurde seine wissenschaftliche Tätigkeit für den Verband mit der Verleihung der Ehrenmitgliedschaft gewürdigt.

Reinhard Ristow initiierte 1985 den ersten Ringversuch mit den Laboratorien der Interessengemeinschaft (IG) Weinchemie Rheinland-Pfalz e.V. (ab 1991 Deutsche Weinanalytiker e.V.) und den Chemischen Untersuchungsämtern in Rheinland-Pfalz.

Ab 1990 begleitete er die wissenschaftlichen Aspekte bei der Produktion einer Standardlösung für die Weinanalytik. Seit 1993 hält der Verband Standardlösungen zur Qualitätskontrolle der Analytik bereit, die unter der Leitung von Reinhard Ristow hergestellt und regelmäßig überprüft wurden. 2002 wurde Reinhard Ristow durch den damaligen Vorsitzenden Jochen Neumann zum wissenschaftlichen Berater in den Verband der Deutschen Weinanalytiker berufen.

Reinhard Ristow engagierte sich seit der Gründung im Jahr 2003 im Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Qualitätsweinanalytik. Ab diesem Zeitpunkt wurden von ihm auch die FTIR-Laborvergleichsuntersuchungen durchgeführt, an die sich mit einem Wein auch die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz angliederte.

Reinhard Ristow wurde 85 Jahre alt. Er hinterlässt eine sehr große Lücke.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	8
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Auswahl des Untersuchungsmaterials	8
2.1.2	Angaben zu den Prüfgütern	8
2.1.3	Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen	9
2.1.4	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT22P01	10
2.1.5	Verteilung des Untersuchungsgutes	11
2.2	Informationen zu Probenbehandlung und Untersuchungsumfang	11
2.3	Übermittlung und Behandlung der Ergebnisse	13
3	Grundlagen für die Auswertung einer Laborvergleichsuntersuchung	15
3.1	Median – wahrer Wert	15
3.2	Standardabweichung	16
3.3	Zielstandardabweichung	16
3.3.1	Zielstandardabweichung aus der Vergleichstandardabweichung	16
3.3.2	Zielstandardabweichung nach Horwitz	17
3.3.3	Empfehlung der Arbeitsgruppe „Wein und Spirituosen“ des ALS	17
3.3.4	Auswahl der Zielstandardabweichung	17
3.3.4.1	Zielstandardabweichung - herkömmliche Verfahren	17
3.3.4.2	Zielstandardabweichung – FTIR-Verfahren	18
3.4	Bewertung der Laborergebnisse mittels Z-Score	19
3.5	Bewertung der Laborergebnisse – berücksichtigte Untersuchungsverfahren	19
3.6	Untere Grenze des Anwendungsbereiches	20
3.7	Bewertung des Gesamtergebnisses einer Laborvergleichsuntersuchung	20
3.7.1	Horrat-Wert	20
3.7.2	Standardfehler – Zuverlässigkeit des Bezugswertes – Vertrauensbereich	21
3.8	Auswertungen mit robusten statistischen Verfahren	22
3.9	Spezielle Regelungen für einzelne Parameter	23
3.9.1	Vorhandener Alkohol	23
3.9.2	Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	23
3.9.3	Vergärbare Zucker	23
3.9.4	Flüchtige Säure	24
3.9.5	Acetat (als Essigsäure)	25
3.9.6	Gesamte Äpfelsäure	25
3.9.7	Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure	26
4	Ergebnisse der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden	27
4.1	Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden	27
4.2	Gesamtergebnis für das Roséweinprüfgut (FT22P01) – herkömmliche Methoden	28
5	Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen	32
5.1	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	32
5.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT22P01	34
5.3	Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter	36

6	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern – Prüfgut Roséwein (FT22P01)	38
6.1	Berechnete Parameter	38
6.2	Darstellung der analytischen Ergebnisse	38
6.2.1	Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse	39
6.2.2	Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse	39
6.2.3	Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren	39
6.2.4	Aufbau der Graphiken	40
6.3	Relative Dichte 20 °C/20 °C	41
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	41
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	42
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse	44
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	44
6.4	Gesamtalkohol [g/L]	46
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	46
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse	47
6.4.3	Deskriptive Ergebnisse	48
6.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	48
6.5	Vorhandener Alkohol [g/L]	50
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	50
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	52
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse	53
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	53
6.6	Gesamtextrakt [g/L]	55
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	55
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	56
6.6.3	Deskriptive Ergebnisse	57
6.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	58
6.7	Zuckerfreier Extrakt [g/L]	59
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	59
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	61
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse	62
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	62
6.8	Vergärbare Zucker [g/L]	64
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	64
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse	65
6.8.3	Deskriptive Ergebnisse	67
6.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	67
6.9	Glucose [g/L]	69
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	69
6.9.2	FTIR-Laborergebnisse	70
6.9.3	Deskriptive Ergebnisse	71
6.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	71
6.10	Fructose [g/L]	73
6.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	73
6.10.2	FTIR-Laborergebnisse	74

6.10.3	Deskriptive Ergebnisse	75
6.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	75
6.11	Glycerin [g/L]	77
6.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	77
6.11.2	FTIR-Laborergebnisse	77
6.11.3	Deskriptive Ergebnisse	78
6.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	79
6.12	pH-Wert	80
6.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	80
6.12.2	FTIR-Laborergebnisse	81
6.12.3	Deskriptive Ergebnisse	82
6.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	82
6.13	Gesamtsäure [g/L]	84
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse	84
6.13.1	FTIR-Laborergebnisse	85
6.13.2	Deskriptive Ergebnisse	87
6.13.3	Angaben zu den Analyseverfahren	87
6.14	Weinsäure [g/L]	89
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse	89
6.14.2	FTIR-Laborergebnisse	89
6.14.3	Deskriptive Ergebnisse	91
6.14.4	Angaben zu den Analyseverfahren	91
6.15	Flüchtige Säure [g/L]	93
6.15.1	Herkömmliche Laborergebnisse	93
6.15.2	FTIR-Laborergebnisse	93
6.15.3	Deskriptive Ergebnisse	95
6.15.4	Angaben zu den Analyseverfahren	95
6.16	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	97
6.16.1	Herkömmliche Laborergebnisse	97
6.16.2	Weitere herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	97
6.16.3	Deskriptive Ergebnisse	98
6.16.4	Angaben zu den Analyseverfahren	98
6.17	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	99
6.17.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	99
6.17.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	99
6.17.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	100
6.17.4	Deskriptive Ergebnisse	101
6.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	101
6.18	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	104
6.18.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	104
6.18.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	104
6.18.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	105
6.18.4	Deskriptive Ergebnisse	106
6.18.5	Angaben zu den Analyseverfahren	106
6.19	Reduktone [mg/L]	109
6.19.1	Laborergebnisse	109

6.19.2	Deskriptive Ergebnisse	110
6.19.3	Angaben zu den Analyseverfahren	110
6.20	Freie Schweflige Säure [mg/L]	112
6.20.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	112
6.20.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	113
6.20.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	114
6.20.4	Deskriptive Ergebnisse	115
6.20.5	Angaben zu den Analyseverfahren	115
6.21	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	118
6.21.1	Laborergebnisse	118
6.21.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	121
6.21.4	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	121
6.21.5	Deskriptive Ergebnisse	122
6.21.6	Angaben zu den Analyseverfahren	122
6.22	Sensorische Befunde	124
7	Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer	126

1 Einleitung

Eine Laborvergleichsuntersuchung dient der Sicherung der Qualität von Analyseergebnissen. Sie ermöglicht es den teilnehmenden Laboren, ihre eigenen Analysendaten mit den Analyseergebnissen anderer Labore zu vergleichen. Die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz veranstaltet jährlich eine Laborvergleichsuntersuchung. Diese vermittelt der Landwirtschaftskammer einen Überblick über die Qualität der rechtlich für die amtliche Qualitätsweinprüfung vorgeschriebenen Analytik. Die Laborvergleichsuntersuchung wird in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik" durchgeführt.

Die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz erfüllt mit dem Angebot der Laborvergleichsuntersuchung eine Aufgabe, die ihr in der Verwaltungsvorschrift des Ministeriums für Wirtschaft, Verkehr, Landwirtschaft und Weinbau vom 10. Dezember 2018 zur Durchführung der Qualitätsweinprüfungen zugewiesen wurde. Laboratorien mit einer Zulassung zum Einsatz des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR-Verfahren) in der amtlichen Qualitätsweinanalyse ist auferlegt, an speziellen Laborvergleichsuntersuchungen mit dieser Methode teilzunehmen. Die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung umfasst über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus die üblicherweise mit diesem Verfahren bestimmten Parameter.

Die Landwirtschaftskammer hat mit Schreiben vom März 2022 die bei ihr zugelassenen Labore zur Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung eingeladen, die in dieser lediglich Untersuchungen im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden durchführen. Soweit Labore eine Zulassung zum Einsatz des FTIR-Verfahrens in der amtlichen Qualitätsweinanalyse haben oder aufgrund vorangegangener Laborvergleichsuntersuchungen bekannt war, dass diese an den umfassenderen Untersuchungen unter Einsatz des FTIR-Verfahrens teilnehmen, erfolgte die Einladung zu derselben Zeit durch die Koordinatorin der Laborvergleichsuntersuchung.

Die Möglichkeit zur Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung besteht über das Land Rheinland-Pfalz hinaus für alle, die Qualitätsweinanalysen für die amtliche Qualitätsweinprüfung durchführen oder das FTIR-Verfahren in der Weinanalytik einsetzen.

Zur Laborvergleichsuntersuchung stand ein Untersuchungsmaterial (Prüfgut) allen Teilnehmern zur Verfügung, während die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen vier weitere Prüfgüter erhielten. Die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen sollen über die FTIR-Untersuchungen hinaus im Rahmen ihrer Möglichkeiten an mindestens zwei Prüfgütern die üblicherweise mit dem FTIR-Verfahren erfassten Parameter zusätzlich mit anderen Methoden bestimmen.

Die Durchführung und die Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung werden in einem mehrteiligen Bericht beschrieben. Der vorliegende Teil 1 umfasst die allgemeinen organisatorischen Angaben zur Durchführung, die Grundlagen für die Auswertung, behandelt einzelne prüfgutübergreifende Beobachtungen und dokumentiert die Ergebnisse für das Prüfgut Roséwein (FT22P01) im Detail.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Die Durchführung und die Auswertung der Laborvergleichsuntersuchung 2022 erfolgte nach „The International Harmonized Protocol for the Proficiency Testing of Analytical Chemistry Laboratories: Pure & Applied Chemistry 78, 145-196 (2006)“ unter Berücksichtigung der wesentlichen Elemente von ISO 17043:2010 und ISO 13528:2015.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Auswahl des Untersuchungsmaterials

Als Untersuchungsmaterial (Prüfgüter) sollen Weine unterschiedlicher Herkunft, Herstellung und Zusammensetzung verwendet werden. Der gleichzeitige Einsatz mehrerer Prüfgüter ermöglicht die Berücksichtigung verschiedener Auswahlkriterien und macht den Einfluss probenspezifischer Matrixeffekte bzw. Mängel einer eventuellen Slope-Interzept-Korrektur auf die FTIR-Untersuchungen besser erkennbar. Das Untersuchungsmaterial soll – zumindest im mehrjährigen Turnus – den üblichen Konzentrationsbereich der Hauptkomponenten wie Alkohol-, Zucker- und Säuregehalt abdecken. Die Verwendung von Proben unterschiedlicher Weinarten dient hierbei insbesondere der Abdeckung der aufgrund der Weinart unterschiedlichen Gehalte an Äpfelsäure und Milchsäure. Weiterhin soll im Hinblick auf den Einfluss unterschiedlicher Herkunft, Rebsorten und Herstellungsverfahren mindestens ein Wein ausländischer Herkunft sein.

Nach der oben genannten Verwaltungsvorschrift müssen bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassene Laboratorien für die Parameter, zu deren Untersuchung sie zugelassen sind, in einem Turnus von drei Jahren die Teilnahme an einer Laborvergleichsuntersuchung nachweisen. Um den genannten Kriterien für die Auswahl des Untersuchungsgutes und den Vorgaben der Verwaltungsvorschrift auch für Teilnehmer im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse zu genügen, wird als allen Teilnehmern zur Verfügung gestelltes Prüfgut im Turnus von drei Jahren jeweils ein Weißwein, ein Rotwein oder Roséwein und ein schäumendes Weinerzeugnis verwendet. Nachdem im Jahr 2020 ein Schaumwein und im Jahr 2021 ein Weißwein als Prüfgut für alle Teilnehmer eingesetzt wurden, wurde in diesem Jahr ein Roséwein ausgewählt.

2.1.2 Angaben zu den Prüfgütern

Für die Durchführung der Untersuchungen wurde das Probenmaterial (Prüfgüter) in diesem Jahr sowohl als lose Ware als auch verkaufsfertig aus gewerblicher Herstellung bezogen. Mindestens ein Wein sollte einen erhöhten Gehalt an Flüchtiger Säure aufweisen. Es wurde eine Staffelung der Restzuckergehalte angestrebt, während die Gesamtsäuregehalte nur eine geringe Spanne aufweisen. Schließlich sollte wie üblich mindestens ein Erzeugnis aus dem Ausland stammen. Die Proben für die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen wurden als FT22LnnP01 bis FT22LnnP05 kodiert. Hierbei vertreten die Buchstaben "Lnn" eine Teilnehmernummer, die bereits bei der Anmeldung vergeben wird. Sie dient der eindeutigen Identifizierung von Rohdaten der FTIR-Untersuchung. Bei der Beschreibung der Prüfgüter, der Dokumentation und Besprechung der Ergebnisse entfällt dieser Teil der Probenkodierung. Folgende Prüfgüter wurden eingesetzt:

FT22P01: Ein 2020er Zinfandel Roséwein aus Kalifornien mit der Geschmacksangabe 'lieblich' wurde von einer Weinkellerei in 0,25 L-Flaschen abgefüllt und unverändert als Prüfgut eingesetzt.

Analytische Kerndaten:

Vorhandener Alkohol: 79,5 g/L, Restzucker: 30,5 g/L, Gesamtsäure: 6,6 g/L

FT22P02: Als Grundwein wurde ein 2021er Pfälzer Riesling, trocken verwendet. Der als lose Ware erhaltene Wein wurde mit Süßreserve versetzt und geschwefelt. Die Abfüllung erfolgte in 0,33 L-Bierflaschen.

Analytische Kerndaten:

Vorhandener Alkohol: 79,2 g/L, Restzucker: 11,0 g/L, Gesamtsäure: 10,1 g/L

FT22P03: Ein 2020er Dornfelder Rotwein aus der Pfalz mit der Geschmacksangabe 'trocken', der in 0,25 L-Flaschen abgefüllt war, wurde von einer Winzergenossenschaft bezogen und unverändert als Prüfgut eingesetzt.

Analytische Kerndaten:

Vorhandener Alkohol: 100 g/L, Restzucker: 6,6 g/L, Gesamtsäure: 5,2 g/L

FT22P04: Ein Rotwein aus Frankreich mit der Geschmacksangabe 'halbtrocken', abgefüllt in 0,25 L-Amphorenflaschen, wurde von einer Weinkellerei bezogen und unverändert als Prüfgut eingesetzt.

Analytische Kerndaten:

Vorhandener Alkohol: 96,0 g/L, Restzucker: 14,6 g/L, Gesamtsäure: 4,8 g/L

FT22P05: Ein Spätburgunder Weißherbst vom Bodensee mit der Geschmacksangabe 'mild', der in 0,25 L-Flaschen abgefüllt war, wurde von einem Winzerverein bezogen und unverändert als Prüfgut eingesetzt.

Analytische Kerndaten:

Vorhandener Alkohol: 89,9 g/L, Restzucker: 15,2 g/L, Gesamtsäure: 6,1 g/L

Bei den angegebenen analytischen Kerndaten handelt es sich um die Medianwerte aus den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden. Die Voruntersuchungen ergaben bei allen Prüfgütern einen bestimmbaren Gehalt an Reduktionen, worauf in der Anlage zur Durchführung der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden hingewiesen wurde. Dieser Sachverhalt war bei einer jodometrischen Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure zu beachten.

2.1.3 Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen

Die Homogenitätsprüfung wurde von allen Prüfgütern bestanden. Die Auswertung der Homogenitätsmessungen erfolgte durch Varianzanalyse. Der Quotient aus der Wiederholstandardabweichung (s_r) und der Zielstandardabweichung (s_z) soll den Betrag 0,5 nicht überschreiten, weil anderenfalls eine Inhomogenität unentdeckt bleiben kann. Dieser Quotient lag nur bei wenigen Prüfgut-/Parameter-Kombinationen über 0,5, wobei in diesen Fällen alle weiteren Anforderungen eingehalten waren. Die Varianzanalyse zeigte auch nur für wenige Prüfgut-/Parameter-Kombinationen ein signifikantes Ergebnis ($p = < 0,050$), d. h. bei diesen Parametern ist die Streuung

zwischen den Proben gesichert größer als die Standardabweichung des Messfehlers. In diesen Fällen musste geprüft werden, ob die angezeigte Inhomogenität für die Laborvergleichsuntersuchung relevant ist. Hierzu wurde die Standardabweichung der Proben (s_{Pr}) mit der Zielstandardabweichung (s_z) verglichen. Liegt der Quotient s_{Pr}/s_z unter 0,3, so ist das Material ausreichend homogen. In vier Fällen lag dieser Quotient über 0,3. Letztlich entscheidend ist das Prüfkriterium nach Fearn und Thompson (A New Test for Sufficient Homogeneity, Analyst 126 (2001), 1414-1417). Hiernach darf die Standardabweichung der Proben (s_{Pr}) den „Maximal tolerierter Wert für s_{Pr} “ nicht überschreiten. Der „Maximal tolerierte Wert für s_{Pr} “ wurde in keinem Fall erreicht. Die Ergebnisse der Varianzanalysen waren damit beweiskräftig. Alle Prüfgüter waren für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet.

Die Details zur Homogenitätsprüfung werden bei den einzelnen Prüfgütern besprochen, für das Prüfgut FT22P01 im folgenden Abschnitt.

2.1.4 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT22P01

Aus der Gesamtlieferung von 17 Kartons mit je 24 Flaschen Roséwein wurden nach deren Nummerierung aus 12 zufällig ausgewählten Kartons jeweils zwei Flaschen entnommen, von denen jeweils eine zur Prüfung der Homogenität verwendet wurde. An diesen Proben wurden am 14.04.2022 die verschiedenen Parameter in Doppelbestimmungen unter Wiederholbedingungen bei jeweils eigener Zufallsfolge bestimmt. Die Relative Dichte 20 °C/20 °C wurde durch elektronische Densitometrie (Biegeschwinger) und der Vorhandene Alkohol mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIR) ermittelt. Die Gesamtsäure und der pH-Wert wurden potentiometrisch, Freie und Gesamte Schweflige Säure jodometrisch und die Reduktone potentiometrisch nach SO₂-Bindung mit Glyoxal bestimmt. Mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) wurden die Parameter Ethanol, Glucose, Fructose und Glycerin ermittelt.

Die Messergebnisse wurden graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen oder Proben und im Korrelationstest auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge sowie von der Probe-Nr. geprüft. Mit Ausnahme des Parameters Gesamtsäure (Korrelation zur Messreihenfolge) traten weder zur Messreihenfolge noch zur Probennummer gesicherte Korrelationen auf.

Zur abschließenden Entscheidung über eine ausreichende Homogenität des Prüfgutes wurde eine Varianzanalyse durchgeführt. Deren Ergebnisse sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Tabelle 1: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT22P01

	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.	1,008518	24	0,9201	0,5514	0,000033		0,000132	0,251	0,000061	
Vorh. Alkohol, NIR	80,59	24	0,3018	0,9718	0,136		0,535	0,254	0,2488	
Ethanol, HPLC	80,14	24	0,6018	0,7955	0,207		0,535	0,386	0,2877	
pH-Wert, pot.	3,232	24	0,7766	0,6588	0,0121		0,0476	0,254	0,0221	
Gesamtsäure, pot.	6,691	24	0,5578	0,8285	0,0596		0,107	0,557	0,0699	
Glucose, HPLC	10,88	24	1,7472	0,1758	0,0174	0,0107	0,339	0,051	0,031	0,1370
Fructose, HPLC	18,74	24	0,7473	0,6817	0,126		0,5515	0,228		0,2501
Verg. Zucker, HPLC	29,63	24	1,1182	0,4231	0,129	0,0314	0,847	0,152	0,037	0,3603
Glycerin, HPLC	5,241	24	0,3355	0,9597	0,0361		0,2311	0,156		0,0986
Reduktone, pot.	51,38	24	0,9210	0,5508	1,915		4,543	0,422		2,5441
Freie SO ₂ jod.	105,3	24	0,5985	0,7981	0,961		8,36	0,115		3,4704
Gesamte SO ₂ jod.	317,8	24	1,0488	0,4651	3,069	0,480	5,357	0,573	0,090	3,5651

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

Für die Aussagekraft 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) wesentlich. Er soll den Betrag 0,5 nicht überschreiten. Zeigt die Varianzanalyse bei Erfüllung der Bedingung $s_r/s_z < 0,5$ keine Signifikanz, folgt, dass das Untersuchungsmaterial hinsichtlich dieses Parameters als homogen zu betrachten ist. Diese Doppelbedingung ist für 10 der 12 geprüften Parameter erfüllt. Damit ist für diese Parameter eine ausreichende Homogenität zuverlässig nachgewiesen.

Bei den Parametern Gesamtsäure und Gesamte Schweflige Säure liegt der Quotient s_r/s_z über 0,5. Für die Gesamte Schweflige Säure werden die weiteren Prüfkriterien eingehalten. Der Quotient s_{Pr}/s_z liegt unter 0,3 und der „Maximal tolerierte Wert für s_{Pr} “ wurde weit unterschritten. Für die Gesamtsäure liegt die Ursache für die erhöhte Wiederholstandardabweichung bei der Messung (s. oben: Korrelation zur Messreihenfolge). Der Parameter Gesamtsäure trägt damit nicht zur Entscheidung über die Homogenität bei.

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

2.1.5 Verteilung des Untersuchungsgutes

Für die bei der Landwirtschaftskammer angemeldeten Teilnehmer wurde das benötigte Untersuchungsgut durch einen Paketdienst ab dem 25.04.2022 versandt. Die zur Abholung der Proben angemeldeten Laboratorien konnten somit ab dem 02.05.2022 das Untersuchungsgut bei der jeweils von ihnen gewählten Prüfstelle in Empfang nehmen. Insgesamt wurde einschließlich einer Reserve bei jeder Prüfstelle Material für 28 Laboratorien mit je 3 Flaschen zu je 0,25 L bereitgestellt. An weitere 12 Laboratorien, die um Zusendung gebeten hatten, wurden je Labor 3 Flaschen ebenfalls am 25.04.2022 versandt. Die 95 Teilnehmer an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung erhielten das Prüfmaterial per Paketdienst ebenfalls zu dieser Zeit. An diese Teilnehmer wurden außer dem Roséwein FT22P01 vier weitere Prüfgüter mit je 2 bis 3 Flaschen zu je 0,33 L oder 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 als Hilfsmittel zur Bearbeitung der Proben im Labor: Diese konnten im Ausnahmefall auch zur Ergebnismitteilung benutzt werden. Als Regelform zur Mitteilung der Untersuchungsergebnisse erhielten alle Teilnehmer eine auf den Umfang ihrer Teilnahme abgestimmte Excel-Datei per E-Mail zugesandt. Sie enthielt eine Nutzungsanleitung. Ihre Verwendung erleichtert Zusatzangaben, die fachlich für die Bewertung der Untersuchungsergebnisse erforderlich sind, und die Weiterverarbeitung der Daten.

Den Laboratorien, die ausschließlich im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse unter Anwendung herkömmlicher Untersuchungsverfahren an der Untersuchung des Roséweins FT22P01 teilnahmen, wurden als zu bestimmende Parameter Relative Dichte 20 °C/20 °C, Vorhandener Alkohol, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Freie und Gesamte Schweflige Säure benannt. Ferner wurde die Mitteilung der für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckergehalt berechneten Werte gefordert. Für den Fall, dass der Gehalt an Schwefliger Säure jodometrisch bestimmt wird, wurde darauf hingewiesen, dass nach dem Ergebnis der Voranalyse bei dem Roséwein als Prüfgut eine Bestimmung der Reduktone erforderlich ist. Ob eine Korrektur der Werte für Schweflige Säure um den Reduktongehalt vorgenommen wurde, war die fachliche Entscheidung des Labors. Der Reduktonwert sollte in jedem Fall mitgeteilt werden. Die Auswertung erfolgte so, wie das Labor die Ergebnisse mitgeteilt hat, auch wenn die Mitteilung fachlich nicht korrekt war. Obwohl in der amtlichen Qualitätsweinanalytik nicht mehr gefordert, wurde die Abgabe eines Untersuchungsergebnisses für den Parameter Glucose ermöglicht. Weiterhin wurde auf die Regeln zur Auswahl der Untersuchungsmethoden hingewiesen. Das Untersuchungsgut sollte als "Kalifornischer Roséwein, lieblich" betrachtet und einer sensorischen Prüfung unterzogen werden. Für Teilnehmer ohne E-Mail-Adresse wurde die Datei zur Ergebnismitteilung auf der Website der Landwirtschaftskammer zum Herunterladen bereitgestellt. Sofern diese nicht genutzt werden konnte, wurde gebeten, das Formblatt für die Amtliche Qualitätsweinprüfung als Standardform der Ergebnismitteilung zu benutzen. 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. Aus der Produktkalibrierung waren die B₀-Koeffizienten, Slope- und Interzept-Werte auf einem zur Verfügung gestellten Formblatt bzw. Registerblatt der Datei zur Ergebnismitteilung mitzuteilen.

Die zum Einsatz des FTIR-Verfahrens bei der Qualitätsweinprüfung zugelassenen Laboratorien waren gehalten, zur Messung der Parameter Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure und Vergärbare Zucker die verpflichtend für die Verwendung bei der amtlichen Qualitätsweinanalyse zugelassenen Parameterkalibrierungen nach dem Stand des Jahres 2011 zu verwenden. Diese stehen als Produktkalibrierung AP_2011 auf der Website der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zur allgemeinen Verfügung. Die in ihr enthaltenen Parameterkalibrierungen für Vorhandenen 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 frühere, 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 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 Laboratorien erforderlich, um bestmögliche Untersuchungsergebnisse zu erhalten.

Die FTIR-Untersuchung war an fünf Prüfgütern durchzuführen. Das für alle bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Teilnehmer gemeinsame Prüfgut war über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus mit anderen Methoden als der FTIR-Methode zu untersuchen. Die hierzu eingesetzten Methoden, bevorzugt Referenzmethoden, werden im Folgenden mit Ausnahme der ¹H-Kernresonanzspektroskopie (¹H-NMR) als "herkömmliche Methoden" zusammengefasst. Es sollten Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure bestimmt werden, soweit dies dem jeweiligen Labor aufgegeben und möglich war. Außerdem wurde die Möglichkeit geboten, die Ergebnisse der Bestimmungen 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 mit herkömmlichen Methoden zu untersuchenden Proben. Auf die genannten Parameter waren von den Teilnehmern an den FTIR-Untersuchungen jeweils mindestens zwei der fünf Proben zusätzlich mit diesen Methoden zu untersuchen. Die Untersuchung aller Proben war anheimgestellt. Eine ausreichende Anzahl Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden war für alle fünf Proben erforderlich, weil die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Bezugnahme auf den Median der Untersuchungsergebnisse mit den herkömmlichen Methoden bewertet werden.

2.3 Übermittlung und Behandlung der Ergebnisse

Im Wesentlichen erfolgte die Ergebnisübermittlung termingerecht. Die letzten Ergebnisse gingen pandemiebedingt am 27.06.2022 ein.

Bei der Landwirtschaftskammer hatten sich 35 der bei ihr zugelassenen Laboratorien zur Teilnahme angemeldet. Von 34 Laboratorien sind Untersuchungsergebnisse eingegangen. 30 Teilnehmer haben dazu die zugesandte Excel-Datei genutzt. Zwei Teilnehmer teilten die Ergebnisse auf Papier mit, unter Benutzung des Standardformulars für die amtliche Qualitätsweinprüfung. Ein Labor schickte eine pdf-Datei und ein Labor eine ods-Datei. In allen Fällen bedingt dies einen erhöhten Aufwand bei der Bearbeitung der Daten.

Alle 95 für FTIR angemeldeten Teilnehmer reichten Untersuchungsergebnisse ein. Sieben Teilnehmer beschränkten ihre Ergebnismitteilung verabredungsgemäß auf die Ergebnisse mit anderen Untersuchungsmethoden als der FTIR. Neun Teilnehmer haben nur FTIR-Untersuchungsergebnisse mitgeteilt. Von vier Teilnehmern wurden zusätzlich Untersuchungsergebnisse mit der ¹H-Kernresonanzspektroskopie gemeldet. Die Ergebnisse sollten grundsätzlich durch Eintrag in die zugesandte Excel-Datei mitgeteilt werden. Zwei Teilnehmer haben ihre Ergebnisse mit einem Open Office Programm in der Excel-Datei erfasst.

Falsche Methodenangaben können im Falle der Notwendigkeit einer nach Bestimmungsverfahren differenzierenden Auswertung den Bezugswert beeinflussen. In einigen Fällen fehlte die Methodenangabe ganz oder es war „sonstige“ erfasst, obwohl die verwendete Methode hätte ausgewählt werden können. Insbesondere bei den berechneten Parametern wurden viele falsche Methodenangaben gemacht. Einige Teilnehmer haben Ergebnisse doppelt gemeldet, d. h. sie haben identische Ergebnisse mit identischen Methodenangaben sowohl bei den herkömmlichen

Ergebnissen als auch bei den FTIR-Ergebnissen erfasst. Eine Bearbeitung der Daten ohne vorherige Sichtung der einzelnen Labordaten war nicht möglich. In der Regel wurden die Auffälligkeiten nach telefonischer Rücksprache korrigiert.

Untersuchungsergebnisse, die mit dem Wert Null oder einem Minuswert mitgeteilt werden, sind nicht korrekt. Solche Ergebnisse müssen in der Form '< (Zahlenwert der Nachweisgrenze)' oder '< (Zahlenwert der Bestimmungsgrenze)' mitgeteilt werden, weil in den statistischen Auswertungsprogrammen eine Null oder ein Minuswert als Zahl behandelt werden und somit für die Gesamtheit der Untersuchungsergebnisse und laborspezifisch zu fehlerhaften Auswertungsergebnissen führen. 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.

Nach der Bezeichnung erkennbar wurden von 10 Teilnehmern bei der FTIR-Untersuchung Produktkalibrierungen auf der Basis der Kalibrierung AP_2011 eingesetzt. Eine Messung mit dieser Produktkalibrierung ist aber nur sinnvoll und aussagekräftig, wenn die verwendete Fassung hinsichtlich der Slope-Interzept-Korrektur auf demselben Stand ist wie die im Labor üblicherweise eingesetzte Kalibrierung.

Wie üblich wurden die Untersuchungsergebnisse der Labore 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 für die FTIR-Untersuchungsergebnisse die Auswertenummern 201 bzw. 301. Die Erhöhung der Auswertenummer wurde auch bei den Teilnehmern vorgenommen, die keine Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden mitgeteilt haben.

Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden enthielt die Excel-Datei zur Ergebnisübermittlung zwei Registerblätter. Auf jedem Registerblatt konnte zu einem Parameter nur eine Untersuchungsmethode 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 sollte die Bereitstellung von zwei Registerblättern ermöglichen. In der vorgesehenen Weise nutzten nur einzelne Teilnehmer diese Möglichkeit. Stattdessen wurden für einzelne oder mehrere Parameter zusätzliche Ergebnisse mit weiteren Methoden an derselben Probe mitgeteilt, obwohl die Teilnehmer nur einen Untersuchungsbefund für jede mit herkömmlichen Methoden zu bestimmende Probe/Parameter-Kombination einsenden sollten. Nach Rücksprache mit dem jeweiligen Labor wurde festgelegt, welche Ergebnisse in der Auswertung berücksichtigt werden sollten. Unter den Auswertenummern 111 bis 114 wurden zusätzliche Ergebnisreihen mittels ¹H-Kernresonanzspektroskopie erfasst. Für die bei der

Landwirtschaftskammer zugelassenen Labore, die nur herkömmliche Untersuchungen durchgeführt haben, wurden die Auswerte-Nummern 121 bis 154 vergeben.

Der Bitte um Mitteilung des sensorischen Befundes an der Probe, der von allen bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien zu erheben war, entsprachen 57 der 85 Laboratorien. Die sensorischen Befunde sind ohne Bewertung im Abschnitt 6.22 wiedergegeben. Eine weitere Auswertung bleibt den einzelnen Teilnehmern überlassen, da Qualitätszahlen nur unvollständig angegeben wurden und eine standardisierte Bewertung der verbalen Beschreibungen nicht möglich ist.

3 Grundlagen für die Auswertung einer Laborvergleichsuntersuchung

Jede Analytik hat das Ziel, den wahren Gehalt an einem Stoff zu ermitteln. Erfahrungsgemäß wird aber bei wiederholter Durchführung einer Analyse, auch wenn dies mit großer Sorgfalt und fachlich korrekt geschieht, nicht immer derselbe Wert, sondern eine Schar mehr oder weniger unterschiedlicher Werte erhalten. Ein gewisses Maß an Streuung der Werte wird daher als unvermeidlich anerkannt. Folglich geht man davon aus, dass der wahre Gehalt des Stoffes im Zentrum der Werte zu finden und ein Untersuchungsergebnis umso besser ist, je näher es diesem wahren Gehalt kommt.

Auch bei einer Laborvergleichsuntersuchung wird für einen Parameter eine Schar von Werten erhalten, deren Güte bewertet werden soll. Hierzu sind zwei Beurteilungsgrößen erforderlich, ein „wahrer Wert“ und ein Maß für die als unvermeidbar akzeptierte Streuung.

3.1 Median – wahrer Wert

Als „wahrer Wert“ eines Parameters und als zentrale Bezugsgröße für die Bewertungen wird der Median aller eingesandten Einzelergebnisse verwendet. Der Median ist der mittlere Wert der nach der Größe geordneten Messergebnisse; bei einer geraden Anzahl von Werten ist er das arithmetische Mittel der beiden in der Mitte liegenden Werte.

Der Median wird dem Mittelwert vorgezogen, weil erfahrungsgemäß in einer Laborvergleichsuntersuchung einzelne Ergebnisse auftreten, die deutlich von den anderen Ergebnissen abweichen. Handelt es sich hierbei um einseitige Abweichungen, so wird in der Regel der Mittelwert deutlich verändert, während der Median kaum beeinflusst wird. Der Median charakterisiert ein Datenkollektiv auch dann sinnvoll, wenn eine mehrgipflige Verteilung, z. B. durch methodenbedingt systematisch unterschiedliche Ergebnisse, vorliegt. Bei einer Normalverteilung bzw. nach einer Elimination von einseitigen Ausreißern stimmen Median und Mittelwert nahezu überein.

Zunächst werden alle eingesandten Ergebnisse ausgewertet. Anschließend werden die Laborabweichungen überprüft und gegebenenfalls Zweitberechnungen ohne die Daten von Laboratorien durchgeführt, deren Ergebnisse

- um mehr als den fünffachen Betrag der Zielstandardabweichung vom Median abweichen oder
- um mehr als 50 % vom Medianwert abweichen.

3.2 Standardabweichung

Das übliche Maß für die Streuung von Analyseergebnissen ist die Standardabweichung. Sie ist aufgrund des Berechnungsverfahrens stets so groß, dass bei einer Normalverteilung 68,3 % der Werte, auf denen die Berechnung beruht, im Bereich des Mittelwertes \pm einer Standardabweichung und etwa 95 % dieser Werte im Bereich des Mittelwertes \pm des doppelten Betrages dieser Standardabweichung liegen.

Die Standardabweichung, hier genauer die Standardabweichung zwischen den Laboratorien, ist ein sinnvolles Maß zur Beschreibung der gegebenen Qualität der Ergebnisse einer Laborvergleichsuntersuchung. Sie wird daher für jeden Parameter zunächst unter Einbeziehung aller Analyseergebnisse berechnet.

Eine aus den Ergebnissen der beteiligten Laboratorien berechnete Standardabweichung ist jedoch von diesen abhängig und daher nicht zu einer unabhängigen Bewertung der Einzelergebnisse geeignet. Diese Bedenken treffen grundsätzlich auch zu, wenn das Streumaß für die Bewertung der Einzelergebnisse mit den robusten statistischen Verfahren ermittelt wird. Bei deren Anwendung wird der Einfluss stark abweichender Befunde zwar vermindert, diese werden aber nicht eliminiert. Zur objektiven Bewertung der Ergebnisse sollte möglichst ein Maßstab der Streuung verwendet werden, der unabhängig von der jeweiligen Laborvergleichsuntersuchung ermittelt wurde, die Zielstandardabweichung.

3.3 Zielstandardabweichung

Die in Abschnitt 2 zitierten Regeln für Laborvergleichsuntersuchungen lassen die Verwendung verschiedener geeigneter Zielstandardabweichungen zu.

3.3.1 Zielstandardabweichung aus der Vergleichstandardabweichung

Experimentell ermittelte Zielstandardabweichungen beschreiben nach allgemeinen, praktischen Erfahrungen bei verbreiteten, gut trainierten Standardverfahren und Konzentrationen, wie sie in der Qualitätsweinanalyse zu bestimmen sind, in der Regel zutreffend die bei sorgfältiger Arbeitsweise einhaltbaren Streuungen. Sie sind daher in der Regel vorrangig als Maßstab der zulässigen Streuung geeignet.

Zur Bewertung von Laborvergleichsuntersuchungen im Weinbereich kommen vor allem die in Ringversuchen ermittelten Standardabweichungen aus der Methodensammlung der Internationalen Organisation für Rebe und Wein (OIV) in Betracht. Viele der zur Untersuchung von Wein angewandten OIV-Methoden enthalten experimentell ermittelte Angaben über die Wiederholbarkeit und Vergleichbarkeit¹ der Untersuchungsergebnisse. Aus der in den Methodenbe-

¹ Die Wiederholbarkeit und Vergleichbarkeit, nach DIN ISO 5725 Wiederholgrenze und Vergleichsgrenze genannt, sind Parameter, mit denen sich die Präzision einer gegebenen Methode beschreiben lässt. Der Wert der Wiederholgrenze entspricht der maximalen absoluten Differenz zweier Analyseergebnisse, die man bei Anwendung der gegebenen Methode zur Untersuchung eines Probenmaterials unter gleichen Bedingungen (ein Mitarbeiter, gleiche Geräte, Labor oder Analysenzeitpunkt) bei vorgegebener statistischer Wahrscheinlichkeit erwarten darf. Die Vergleichsgrenze entspricht der maximalen absoluten Differenz zweier Analyseergebnisse, die man bei Anwendung der identischen Methode zur Untersuchung von identischem Probematerial unter verschiedenen Bedingungen (verschiedene Mitarbeiter, Geräte, Laboratorien oder Aufarbeitungszeiten) bei vorgegebener statistischer Wahrscheinlichkeit erwarten darf. Sofern bei den Analyseverfahren nichts anderes vermerkt wird, beträgt diese Wahrscheinlichkeit 95 %. Die Einhaltung der Wiederholbarkeit kann innerhalb jedes einzelnen Labors geprüft und nachgewiesen werden. Für die Vergleichbarkeit kann dies bevorzugt durch die Teilnahme an einer gemeinschaftlichen Untersuchung einheitlichen Probenmaterials durch eine größere Zahl von Laboratorien, einer Laborvergleichsuntersuchung, belegt werden.

schreibungen angegebenen, in Ringversuchen ermittelten Wiederholbarkeit r bzw. der Vergleichbarkeit R ergibt sich die Wiederholstandardabweichung s_r bzw. die Vergleichstandardabweichung s_R , indem Wiederholbarkeit bzw. Vergleichbarkeit durch den Faktor 2,8 dividiert werden.

3.3.2 Zielstandardabweichung nach Horwitz

Fehlen experimentelle, in Ringversuchen ermittelte Daten, so kann auf ein von Horwitz (Analytical Chemistry 54 (1982), S. 67A-76A) auf der Basis zahlreicher Auswertungen methodenprüfender Ringversuche entwickeltes Verfahren zur Berechnung der zwischen Ergebnissen verschiedener Laboratorien zu erwartenden Streuung zurückgegriffen werden. Diese Berechnung erfolgt in Abhängigkeit von der Konzentration des Analyten nach der Formel:

$$\%s_H = 2 \wedge (1 - 0,5 \log (M))$$

mit $\%s_H$ = relative (prozentuale) Standardabweichung zwischen Laboratorien
und M = Median oder Gesamtmittelwert.

M wird in relativen Konzentrationseinheiten eingesetzt, z. B. entspricht 1 g/L einer relativen Konzentration von 0,001 kg/L.

Thompson und Lowthian (Analyst 120 (1995), S. 271-272) haben gezeigt, dass die Präzision in Laborvergleichsuntersuchungen ebenfalls einer Funktion dieses Typs folgt.

Aus dieser relativen Standardabweichung wird der Wert der Zielstandardabweichung s_H berechnet nach:

$$s_H = (\%s_H / 100) * M$$

3.3.3 Empfehlung der Arbeitsgruppe „Wein und Spirituosen“ des ALS

Die Arbeitsgruppe „Wein und Spirituosen“ des Arbeitskreises Lebensmittelchemischer Sachverständiger der Länder und des Bundes (ALS) hat empfohlen, für die Bewertung der Leistungen eines Labors in einer Wein-Laborvergleichsuntersuchung grundsätzlich Zielstandardabweichungen heranzuziehen, die aus den statistischen Kennzahlen der in der Verordnung (EWG) Nr. 2676/90 genannten Referenzmethoden oder aus Ringversuchen des ehemaligen Bundesgesundheitsamtes stammen. Die berechnete Zielstandardabweichung nach Horwitz soll nur dann angewendet werden, wenn kein experimentell begründeter Wert zur Verfügung steht.

3.3.4 Auswahl der Zielstandardabweichung

3.3.4.1 Zielstandardabweichung - herkömmliche Verfahren

Für die Laborvergleichsuntersuchung werden auf der Basis der vorstehenden Überlegungen für die Bewertung der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden die Zielstandardabweichungen vorrangig aus den Referenzmethoden bzw. in den OIV-Methoden genannten Vergleichbarkeiten abgeleitet.

Soweit die Referenzmethode keine geeigneten Daten enthält oder diese sich als ungeeignet erweisen, kommen andere akzeptierte experimentelle Daten, z. B. aus Ringversuchen des ehemaligen Bundesgesundheitsamtes, in Betracht, die durch Laboratorien ermittelt wurden, die in der Anwendung der Methoden, insbesondere auf Wein, erfahren sind.

Fehlen experimentelle Daten wird zur Bewertung der Laborleistung die nach Horwitz berechnete Zielstandardabweichung eingesetzt.

3.3.4.2 Zielstandardabweichung – FTIR-Verfahren

Die Bewertung der Leistung der Laboratorien erfolgt mit dem speziell empfohlenen, in der Regel großzügigeren Leistungskriterium, der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung ($s_{U_{FTIR}}$). Für die meisten in dieser Laborvergleichsuntersuchung erfassten Parameter hat der Ausschuss statistische Kennzahlen des FTIR-Verfahrens erarbeitet und zuletzt 2011 fortentwickelt, um die seitdem empfohlene Kalibrierung des Parameters Fructose zu berücksichtigen. 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 ($s_{U_{FTIR}}$). 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 wird bei der Berechnung der Z-Scores für die FTIR-Ergebnisse berücksichtigt.

Die FTIR-Ergebnisse für die Parameter Gesamtalkohol, Zuckerfreier Extrakt, Acetat und Freie Schweflige Säure werden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Laborergebnisse der herkömmlichen Bestimmungsmethoden, da keine die eventuellen Einflüsse der Matrix berücksichtigenden Zielstandardabweichungen bekannt sind.

Die Z-Scores für den Parameter Gesamte Schweflige Säure werden entsprechend einer in der Besprechung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses am 07.03.2018 aufgrund der Ergebnisse des Methoden prüfenden Ringversuches und der Erfahrungen aus den zurückliegenden Laborvergleichsuntersuchungen ausgesprochenen Empfehlung mit der nach der Regel von Horwitz zu erwartenden Vergleichstandardabweichung als Leistungskriterium berechnet.

Soweit FTIR-Ergebnisse nur in einem Befund gemeinsam mit den Ergebnissen herkömmlicher Methoden mitgeteilt werden, erfolgt die Bewertung mit dem – in der Regel strengeren – Leistungskriterium (Zielstandardabweichung), das auf die Bewertung der Ergebnisse aller anderen Methoden angewendet wird.

Es wird darauf hingewiesen, dass die Anwendung der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung auch berücksichtigt, dass die Präzision der FTIR-Ergebnisse in der Regel geringer ist als die Präzision der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren. Deshalb wird das FTIR-Verfahren, abgesehen von den für die amtliche Qualitätsweinanalyse zugelassenen Parametern, von vielen Teilnehmern nur zu orientierenden Untersuchungen benutzt und liefert für einige Parameter nur orientierende Ergebnisse.

3.4 Bewertung der Laborergebnisse mittels Z-Score

Alle Laborergebnisse werden durch Z-Scores bewertet. Der Z-Score wird für jeden Parameter und jedes Untersuchungsergebnis eines Labors mit Hilfe der Zielstandardabweichung berechnet nach:

$$Z = (m - M) / s_z$$

mit

Z = Wert des Z-Scores

m = Untersuchungsergebnis des Labors

M = Median der Untersuchungsergebnisse

s_z = Zielstandardabweichung.

Der Z-Score gibt somit wieder, um welches Vielfache der Zielstandardabweichung sich der Laborwert von dem Median unterscheidet. Anhand des Z-Scores werden die Analyseergebnisse wie folgt beurteilt:

Z-Score	Bewertung
0 bis ≤ 2	Die Analytik entspricht den Anforderungen.
> 2 bis < 3	Die Analytik sollte überprüft werden.
≥ 3	Die Analytik entspricht nicht den Anforderungen.

In den Tabellen des Berichtes werden, jeweils mit Angabe der Quelle, sowohl Z-Scores aufgeführt, die mit der Zielstandardabweichung nach der Regel von Horwitz als auch Z-Scores, die aufgrund einer experimentell ermittelten Zielstandardabweichung berechnet wurden. Die Bewertung der Leistung der einzelnen Laboratorien in den für jedes Labor ausgestellten Teilnahmebestätigungen erfolgt mit der gemäß der Rangfolge nach Abschnitt 3.3.4 ausgewählten Zielstandardabweichung, sofern im Einzelfall nichts anderes mitgeteilt wird.

3.5 Bewertung der Laborergebnisse – berücksichtigte Untersuchungsverfahren

Grundlage der Bewertung der Laborleistung sind in der Regel die Ergebnisse aller herkömmlichen physikalisch-chemischen Untersuchungsverfahren. Ein Einfluss der Ergebnisse der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) sowie der ^1H -Kernresonanzspektroskopie wird grundsätzlich ausgeschlossen. Auch die mittels FTIR-Verfahren erhaltenen Ergebnisse werden entsprechend der Empfehlung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung stets unter Bezugnahme auf den Median der Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren ausgewertet.

Weiterhin werden aufgrund fachlicher und rechtlicher Erwägungen bei den in der nachfolgenden Tabelle 2 aufgeführten Parametern nur die Ergebnisse der jeweils genannten Methoden zur Ermittlung der zentralen Bewertungsgrößen Median (als Vertreter des "wahren" Wertes), Standardabweichung der Laborergebnisse und der „herkömmlichen“ Zielstandardabweichung verwendet.

Tabelle 2:

Parameter	Berücksichtigte Untersuchungsverfahren
Vorhandener Alkohol	Destillationsverfahren
Vergärbare Zucker	Enzymatik und HPLC
Freie Schweflige Säure	differenziert nach Reduktoneinfluss auf den Wert
Gesamte Schweflige Säure	differenziert nach Destillationsverfahren und jodometrischer Bestimmung ohne Reduktionabzug
Flüchtige Säure	Ergebnisse von Verfahren mit SO ₂ -Korrektur

3.6 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 Vergleichstandardabweichung des jeweils zum Vergleich herangezogenen Verfahrens oder die nach Horwitz berechnete, bei geeigneten und beherrschten Untersuchungsverfahren zu erwartende Vergleichstandardabweichung. Es ergeben sich dann 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 Messverfahren anzuwenden. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss bereits anlässlich der 6. Sitzung (2009) empfohlen, in diesem Grenzbereich keine Z-Scores zu berechnen. In diesem Konzentrationsbereich können bei der FTIR-Untersuchung auch negative Messwerte auftreten. Diese Empfehlung wurde anlässlich der 7. Sitzung (2010) dahingehend fortentwickelt, dass für die Ergebnisse an der unteren Grenze des Anwendungsbereiches aller Messverfahren keine Z-Scores berechnet werden. Diese gilt als erreicht, wenn das Dreifache der experimentell entwickelten Zielstandardabweichung den Betrag des Bezugswertes erreicht oder überschreitet.

3.7 Bewertung des Gesamtergebnisses einer Laborvergleichsuntersuchung

3.7.1 Horrat-Wert

Die Bewertung einzelner Analysenergebnisse über den Z-Score bedarf, um als Basis sachlich korrekter Schlussfolgerungen dienen zu können, grundsätzlich der fachlich-kritischen Betrachtung. Hierbei ist insbesondere das Gesamtergebnis je Parameter über alle Laboratorien zu beachten.

Zur Objektivierung können Regeln herangezogen werden, die zunächst zur Bewertung methodenprüfender Ringversuche entwickelt wurden. So haben K. W. Boyer, W. Horwitz und R. Albert (Analytical Chemistry 57, 454-459 (1985)) im Rahmen ihrer Arbeiten über die Ergebnisse methodenprüfender Ringversuche neben der oben dargestellten Regel zur Berechnung der Vergleichsstreuung festgestellt, dass bei nur sehr wenigen akzeptierten Ringversuchsergebnissen der doppelte Betrag der nach der Horwitz-Formel berechneten Vergleichstandardabweichung überschritten wurde. Aufgrund dieser Beobachtung wird der Quotient aus gefundener Vergleichstandardabweichung und der nach Horwitz berechneten Standardabweichung als Horrat (Horwitz ratio)-Wert bezeichnet und zur Bewertung methodenprüfender Ringversuche herangezogen. Demzufolge wird das Ergebnis eines Ringversuchs als zufriedenstellend bewertet, wenn nach Ausschluss von

nicht mehr als 2/9 (entsprechend 22,2 %) der Laboratorien (W. Horwitz, Pure & Applied Chemistry, 67, 331-343 (1995)) ein Horrat-Wert von 2 nicht überschritten wird. Thompson und Lowthian (AOAC International 80, 676-679 (1997)) haben bei ihrer Überprüfung der Horwitz-Funktion festgestellt, dass in 95 % aller ausgewerteten Fälle ein Horrat-Wert unter 1,5 zu erwarten ist. Auch Horwitz hat in einer jüngeren Publikation (W. Horwitz, P. Britton u. St. J. Chirtel, AOAC International 81, 1257-1265 (1998)) die Anwendung des Horrat-Wertes von 1,5 für die Bewertung der Ergebnisse methodenprüfender Ringversuche empfohlen.

Die Horrat-Werte gelten als weitere Kriterien für die Bewertung des Gesamtergebnisses der Laborvergleichsuntersuchung. Die Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien (s_L) geteilt durch die Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H) bzw. geteilt durch die experimentelle Zielstandardabweichung (s_{exp}) sollen unter der Voraussetzung der Verwendung einer geeigneten Zielstandardabweichung in der Regel unter 1,5 liegen und den Wert 2,0 nicht überschreiten, wenn die angewendeten Analysenverfahren beherrscht werden und im gegebenen Konzentrationsbereich für die Bestimmung der Parameter geeignet sind. In Umkehrung dieser Regel ist anzunehmen, dass die Zielstandardabweichung zu großzügig gewählt wurde, wenn der Wert des Quotienten unter 0,5 liegt. Maßgeblich ist der Quotient, der erreicht wird, nachdem extreme Einzelergebnisse ausgeschlossen wurden. Bei Existenz einer experimentellen Zielstandardabweichung hat der mit ihr gebildete Quotient grundsätzlich Vorrang. Nur wenn keine experimentelle Zielstandardabweichung vorliegt oder diese für eine gültige Bewertung der Laborergebnisse ungeeignet ist, wird der Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung nach Horwitz für die Bewertung des Gesamterfolges der Laborvergleichsuntersuchung herangezogen.

3.7.2 Standardfehler – Zuverlässigkeit des Bezugswertes – Vertrauensbereich

Neben der Betrachtung der Streuung zwischen den Ergebnissen der Laboratorien ist auch zu beachten, ob der zentrale Bezugswert, der Median, als Basis der Differenzbildung zu den Ergebnissen der einzelnen Laboratorien genügend zuverlässig ist, da die Unsicherheit dieses Bezugswertes keinen wesentlichen Einfluss auf den Z-Score haben soll. Als Anhaltspunkt hierfür kann bei der in der Regel gegebenen praktischen Übereinstimmung von Median und Mittelwert der Quotient (Q) aus dem Standardfehler des Mittelwertes (u_M) und der Zielstandardabweichung (s_Z) herangezogen werden. Es werden der Standardfehler des Mittelwertes und die Standardabweichung zwischen den Laborergebnissen (s_L) herangezogen, die nach Ausschluss extrem abweichender Laborbefunde erhalten werden. Die Berechnung erfolgt somit nach der Formel:

$$Q = u_M/s_Z \text{ mit } u_M = s_L/\sqrt{n}.$$

Liegt dessen auf eine Ziffer gerundeter Wert nicht über 0,3, ist nach den Aussagen der Norm ISO 13528 keine zu beachtende Auswirkung der Unsicherheit des Bezugswertes auf die Bewertung der Laborergebnisse durch die Z-Scores gegeben. Liegt der Quotient im Bereich zwischen 0,3 und 0,5, soll auf die eingeschränkte Sicherheit des Bezugswertes hingewiesen werden, während bei Werten des Quotienten über 0,5 die Unsicherheit des Bezugswertes für eine gültige Bewertung der Laborleistung zu groß ist. Liegen aus dem Kreis der an einer Laborvergleichsuntersuchung teilnehmenden Laboratorien zu wenige, z. B. unter 10 Untersuchungsergebnisse vor

($n < 10$), so wird dieses Kriterium häufig nicht erfüllt. Es könnten daher keine gültigen Bewertungen möglich sein.

Der Vertrauensbereich wird berechnet durch Multiplikation des Standardfehlers mit dem Student t-Faktor des entsprechenden Konfidenzintervalls (hier 95 %). Der Vertrauensbereich gibt den Bereich um den Mittelwert eines Parameters an, in dem mit 95 %iger Wahrscheinlichkeit der „wahre Wert“ liegt. Der Vertrauensbereich beschreibt die Unsicherheit des Bezugswertes. Student t-Faktoren für das Konfidenzintervall 95 % liegen bei mehr als 18 vorliegenden Ergebnissen im Bereich zwischen 2 und 2,1. Aus der Norm ISO 13528 kann damit (für $n > 18$) abgeleitet werden, dass der Vertrauensbereich nicht größer als zwei Drittel der zur Beurteilung verwendeten Zielstandardabweichung sein sollte, um eine gültige Auswertung zu erhalten.

$$\text{Vertrauensbereich (95 \%-Konfidenzintervall)} = t * s_L / \sqrt{n}$$

t = Student-Faktor aus Tabelle (95 % Wahrscheinlichkeit, zweiseitige Betrachtung)

3.8 Auswertungen mit robusten statistischen Verfahren

Neben der Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens, die in dieser Laborvergleichsuntersuchung auf der Basis der Ergebnisse anderer herkömmlicher Untersuchungsverfahren durchgeführt wird, ist ein Vergleich der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens untereinander von Interesse. In Abschnitt 5 werden die deskriptiv-statistischen Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen dargestellt, wobei für die Berechnungen die robusten Standardabweichungen der Werte zwischen den Laboratorien verwendet werden.

Bei der Dokumentation der Ergebnisse zu den einzelnen Parametern im Abschnitt 6 des Berichtes werden in einer zusätzlichen Tabelle Angaben zur Häufigkeit der Anwendung der einzelnen Analyseverfahren sowie der robuste Mittelwert und die robuste Standardabweichung der mit diesen Methoden erhaltenen Laborergebnisse dargestellt. Diese beschreibenden statistischen Kenngrößen werden verwendet, weil zu den einzelnen Analysemethoden häufig nur wenige Analyseergebnisse vorliegen und bei der üblichen, eine Normalverteilung der Werte voraussetzenden Berechnungsweise einzelne Fehlergebnisse eine große Auswirkung auf den Mittelwert und die Standardabweichung haben können. Mittelwerte können gegenüber dem wahren Wert stark verschoben und Standardabweichungen stark vergrößert werden. Diese Schwierigkeiten können durch robuste statistische Verfahren zur Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung vermieden bzw. zumindest reduziert werden. Ausgehend von dem Median aller Ergebnisse werden bei der Anwendung dieser Berechnungsverfahren extreme Werte nicht eliminiert, sondern ihr Einfluss durch eine geeignete Berechnungsweise verringert. Die Norm ISO 13528 beschreibt und empfiehlt in ihrem Anhang C Abschnitt 1 unter Algorithmus A das hier angewendete Verfahren. Die so erhaltenen deskriptiven Kennzahlen charakterisieren die Untersuchungsergebnisse mit den angewendeten Methoden zutreffender als die Ergebnisse der klassischen Berechnung ohne Ausschluss von extremen Ergebnissen (Ausreißern).

3.9 Spezielle Regelungen für einzelne Parameter

3.9.1 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.

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. Alle Angaben in der Einheit %vol wurden bei der Auswertung mit dem Faktor 7,8924 in die Einheit g/L umgerechnet.

3.9.2 Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt

Die berechneten Werte für Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt gehören zu den Standardparametern der amtlichen Qualitätsweinanalyse. Ergebniswerte waren für das Prüfgut FT22P01 durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien mitzuteilen. Daher waren für das Prüfgut FT22P01 auf allen Ergebnis-Registerblättern der Ergebnismitteilungsdatei Eingabefelder für diese Parameter vorgegeben. Dabei wird davon ausgegangen, dass auf den Registerblättern 'herk. Ergebnisse (1)' und 'herk. Ergebnisse (2)' nur Berechnungsergebnisse eingetragen werden, die ausschließlich auf herkömmlich bestimmten Werten beruhen. Für den Parameter Gesamtextrakt ist die Mitteilung der Ergebnisse nach herkömmlichen Methoden für alle fünf Prüfgüter vorgesehen, da diese die Grundlage zur Bewertung der unmittelbar aus den Infrarotspektren abgeleiteten Messergebnisse bilden.

Beim FTIR-Verfahren können neben der Ermittlung von Messwerten für die Parameter Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt mit Hilfe geeigneter Parameterkalibrierungen unmittelbar aus dem Infrarotspektrum entsprechende Werte auch aus den Ergebnissen der FTIR-Messungen für Relative Dichte, Alkohol und Vergärbare Zucker oder aus einer Kombination von herkömmlichen Messwerten und FTIR-Messwerten berechnet werden. Im letzten Fall bestehen wiederum verschiedene Kombinationsmöglichkeiten. Auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' werden in der Dropdown-Liste zur Methodenangabe verschiedene Kombinationsmöglichkeiten zur Auswahl gestellt, aber relativ häufig unzutreffend ausgewählt.

3.9.3 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 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 beeinträchtigt. Als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) wird in Konsequenz hieraus die Vergleichstandardabweichung des enzymatischen Referenzverfahrens aus der Sammlung der OIV (OIV-MA-AS311-02, LwK Nr. 4.5) verwendet.

In der Praxis werden die reduktometrischen Verfahren zur Zuckerbestimmung nach wie vor weit verbreitet eingesetzt, so bei dem Prüfgut FT22P01 bei 26 von insgesamt 95 Laborergebnissen mit herkömmlichen Methoden. 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 von der konkreten Ausgestaltung des reduktometrischen Bestimmungsverfahrens hinsichtlich der Anwendung einer Klärung – vor allem bei Rotweinen mit geringen Zuckergehalten gegeben und zu beachten.

Auch bei den FTIR-Ergebnissen dient für den Parameter Vergärbare Zucker - wie bei den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden - der Median der Laborergebnisse der Zuckerbestimmung mit den spezifischen Methoden Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie als Bezugswert. Aus den Ergebnismitteilungen der Teilnehmer ist teilweise ersichtlich, dass der zum Parameter Vergärbare Zucker mitgeteilte Wert als Summe aus Glucose und Fructose berechnet wurde. Bei der Verwendung eines unmittelbar aus dem Infrarotspektrum durch eine entsprechende Parameterkalibrierung erhaltenen Wertes ist zu berücksichtigen, dass diese Kalibrierungen (Basiskalibrierungen) zumindest überwiegend in der Zeit erstellt wurden, als die Ergebnisse reduktometrischer Zuckerbestimmungen definitionsgemäß und weinrechtlich als "Zucker" galten. Daraus folgt, dass auf dieser Grundlage ermittelte Werte – wie dies teilweise auch in der Praxis geschieht – korrekter als "Vergärbare Zucker (reduktometrisch)", zu bezeichnen sind. Auf die Übereinstimmung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse hat auch Einfluss, ob im Falle einer Slope-Interzept-Korrektur als Referenzwerte die Ergebnisse spezifischer Zuckerbestimmungsmethoden oder reduktometrischer Verfahren verwendet wurden.

3.9.4 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 (HPLC) oder enzymatisch bestimmt. Um eine fachlich exakte Trennung der Untersuchungsergebnisse für beide definitionsgemäß und stofflich verschiedenen 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 Vergleichstandardabweichung des OIV-Verfahrens von $\pm 0,029$ g/L und bei höheren Gehalten die nach Horwitz berechnete Vergleichstandardabweichung zur Berechnung der Z-Scores zu verwenden.

3.9.5 Acetat (als Essigsäure)

Zur Bestimmung dieses Parameters werden Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, manuelle und automatisierte enzymatische Verfahren sowie ^1H -Kernresonanzspektroskopie eingesetzt, wobei die automatisierte enzymatische Bestimmung mit kinetischer Gehaltsbestimmung derzeit überwiegt. Wie bei den vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen seit mehreren Jahren beobachtet, führt die automatisierte enzymatische Bestimmung gegenüber der Gruppe der übrigen Verfahren (ohne FTIR) zu höheren Werten. Es ist bekannt, dass die Ergebnisse der vorherrschenden Methode zur automatisierten Bestimmung vom pH-Wert bzw. Gesamtsäuregehalt abhängig sind. Bei gemeinsamer Auswertung aller Laborergebnisse prägen die automatisierten enzymatischen Ergebnisse den Bezugswert und die Unterschiede zwischen den Methoden die Streuung der Laborergebnisse. Es ergeben sich häufig Quotienten (s_L/s_{Ziel}), deren Wert stark erhöht oder für die Ermittlung gültiger Z-Scores zu hoch ist. Daher erfolgt in der Regel eine getrennte Auswertung der beiden Ergebnisgruppen.

3.9.6 Gesamte Äpfelsäure

Die Bestimmung der Gesamten Äpfelsäure erfolgt überwiegend mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie. Für dieses Verfahren ist keine aus einem methodenprüfenden Ringversuch abgeleitete Vergleichstandardabweichung bekannt. Daher wird für diesen Parameter die Zielstandardabweichung aus der Vergleichstandardabweichung des enzymatischen Bestimmungsverfahrens nach Methode OIV-MA-AS313-11 abgeleitet. Da in Laborvergleichsuntersuchungen regelmäßig erhöhte Werte des Quotienten (s_L/s_{Ziel}) beobachtet werden, stellt sich allerdings die fachliche Frage, ob diese Zielstandardabweichung 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 den Vorjahren zu wiederholen, dass für diesen Parameter ein geeignetes Leistungskriterium in Form einer Standardabweichung entwickelt werden sollte.

3.9.7 Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure

Zur Bestimmung der Schwefligen Säure finden im Reaktionsprinzip und ihrer Spezifität unterschiedliche Bestimmungsverfahren Anwendung. Während bei den jodometrischen Bestimmungsverfahren grundsätzlich über die Schweflige Säure hinaus, andere unter den Bedingungen des Untersuchungsverfahrens mit Jod reagierende Stoffe, die Reduktone, miterfasst werden, ist dies bei den Destillations- bzw. photometrischen Verfahren nicht der Fall. Bei 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-Scores.

Bei der Anwendung jodometrischer Verfahren zur Bestimmung der Schwefligen Säure wird berücksichtigt, dass in Weiß- und Roséweinen ohne Zusatz von Ascorbinsäure der Gehalt an Reduktonen im Bereich der Bestimmungsgrenze der jodometrischen Verfahren liegt und daher gemäß Abschnitt 3.6 keine sinnvolle Bewertung der Laborergebnisse für Reduktone durch Z-Scores möglich ist. Daher wird im Begleitschreiben zu den Proben mitgeteilt, ob im Fall der Anwendung jodometrischer Verfahren eine Bestimmung der Reduktone erforderlich ist bzw. ein Zusatz von Ascorbinsäure erfolgte. Ergänzend wird für Weiß- und Roséweine wegen der Oxydationsempfindlichkeit der Ascorbinsäure bei rascher Abbindung freier Schwefliger Säure durch Aldehyde eine Reaktionszeit von 5 Minuten, dahingegen für Rotweine wegen der verzögerten Abbindung eine Reaktionszeit von 20 Minuten für die Reduktonbestimmung empfohlen.

Für die Mitteilung der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen wurde in den Begleitunterlagen zu den Proben darauf hingewiesen, dass es die fachliche Entscheidung des Labors ist, ob eine Korrektur der Werte für Schweflige Säure um den Reduktongehalt erfolgt oder nicht. Aus der Ergebnismitteilung musste eindeutig erkennbar sein, welche Verfahrensweise gewählt wurde. Die Auswertung erfolgte immer so, wie die Ergebnisse mitgeteilt wurden, auch wenn die Mitteilung fachlich nicht korrekt war.

Zur Bewertung der Laborergebnisse für **Reduktone** und **Freie Schweflige Säure** wurde als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) stets die nach Horwitz für ein geeignetes und beherrschtes Analysenverfahren zu erwartende Vergleichstandardabweichung berechnet. Für die Bewertung der Ergebnisse für Freie Schweflige Säure nach Reduktonabzug wird die Fehlerfortpflanzung durch die Differenzbildung nicht berücksichtigt, sondern aufgrund der Erfahrungen aus den Vorjahren derselbe Wert wie bei der Bewertung der Ergebnisse einschließlich Reduktone verwendet. Als Bezugswert für die Laborergebnisse dient grundsätzlich der Median der jeweils betrachteten Ergebnisse, d. h. für Freie Schweflige Säure der Median der jodometrisch bestimmten Laborergebnisse einschließlich bzw. ausschließlich der Reduktone bzw. der gemeinsame Median der Ergebnisse von Destillations- und photometrischen Verfahren.

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, es sei denn, dass die Streuung der abzuziehenden Größe (hier Reduktone) die Streuung der Summengröße (hier Schweflige Säure einschließlich Reduktone) prägt. Nach der Erfahrung ergeben sich, insbesondere bei geringen Gehalten an Freier Schwefliger Säure nach Abzug der Reduktone sehr niedrige Werte der Zielstandardabweichung, die fälschlich den Eindruck einer mangelnden Beherrschung der Analytik entstehen lassen.

Für den Parameter **Gesamte Schweflige Säure** wird die gültige Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden durch Bezug auf den Median der Ergebnisse von Destillationsverfahren durchgeführt, da diese definitionsgemäß den wahren Gehalt an Gesamter Schwefliger Säure ergeben. Lediglich zur Information werden die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen jeweils einschließlich und ausschließlich des Beitrags der Reduktone zusätzlich durch den Vergleich mit dem Median der jeweiligen Ergebnisgruppe bewertet. Als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) wurde stets die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet, weil diese die Erwartung an die Vergleichbarkeit der Laborergebnisse prägt.

4 Ergebnisse der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden

4.1 Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden

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 nachfolgend auf das Gesamtergebnis für das Prüfgut FT22P01 eingegangen.

Einen laborübergreifenden Überblick über die Untersuchungsergebnisse gibt für jedes Prüfgut eine Zusammenstellung deskriptiv-statistischer Ergebnisse wie hier für die Probe FT22P01 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 Tabellen beschreiben somit das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung mit herkömmlichen Verfahren (Definition siehe Abschnitt 3.5) für das jeweilige Prüfgut und dienen dessen Bewertung.

Die Bewertung der einzelnen Laborleistung durch die Z-Scores nimmt sowohl für die Ergebnisse herkömmlicher als auch der FTIR-Untersuchungen Bezug auf den Median dieser Ergebnisse als 'wahren Wert'. Die Berechnung der Z-Scores 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_{FTIR} “ einen Eintrag.

Unberücksichtigt bleiben Ergebnisse, die 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 und nicht in der davorstehenden Anzahl enthalten. 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 dann zu dem jeweiligen Parameter in den Spalten „Alle Werte“ und „Gültige Werte“ unterschiedliche Zahlen. Der Anteil der wegen überhöhter Z-Scores oder mehr als 50 % Abweichung vom Median ausgeschlossenen Ergebnisse soll weniger als 22,2 % betragen.

Grundlagen für die Bewertung des Gesamtergebnisses sind für jeden Parameter bei allen Proben (s. Abschnitt 3.7):

1. Anteil ausgeschlossener Ergebnisse
2. Quotient s_L/s_Z
3. Quotient u_M/s_Z

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

Die Quotienten aus der Laborstandardabweichung und der experimentell ermittelten, Matrix Effekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung für die FTIR-Ergebnisse ($s_L/s_{U_{FTIR}}$) sind – meist deutlich – niedriger als die Quotienten für die herkömmlichen Ergebnisse, 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-Scores für die Bewertung der Laborleistung bei den FTIR-Messungen meist gegeben.

4.2 Gesamtergebnis für das Roséweinprüfgut (FT22P01) – herkömmliche Methoden

Für alle Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse wurden gültige Z-Scores ermittelt.

Die Bewertung der auf die Ergebnisse der amtlichen Qualitätsweinanalyse beschränkten Laborergebnisse erfolgte gemeinsam mit den Laborergebnissen aus der umfangreicheren FTIR-Laborvergleichsuntersuchung. Von drei nur für herkömmliche Methoden angemeldeten Laboratorien wurden für einzelne Parameter nur FTIR-Ergebnisse mitgeteilt. Diese wurden mit denselben Zielstandardabweichungen bewertet wie die Ergebnisse mit herkömmlichen Verfahren.

Bei dem Prüfgut FT22P01 traten bei der Mehrzahl der Parameter keine oder bis zu zwei auszuschließende Laborergebnisse auf. Es handelte sich sowohl um grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte als auch Laborergebnisse mit einem absoluten Betrag des Z-Score über 5. Eine höhere Anzahl als zwei auszuschließende Laborergebnisse ergab sich für die Parameter Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure, da einige Labore Gehalte „< Bestimmungsgrenze“ angegeben haben.

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für die Roséweinprobe (FT22P01)

Parameter	alle Werte	gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. S _L	Labor-Stdfehler U _m	n. Horwitz S _H	Zielstandardabweichungen		Quotienten		U _W /S _U FTIR	U _W /S _{Ziel}
								exp. herk. S _{exp}	exp. FTIR S _{U FTIR}	S _L /S _H	S _L /S _{exp}		
Relative Dichte 20 °C/20 °C	100	99	1,00843	1,008400	0,000150	0,000015	0,000132	0,000190	1,13	0,79	0,11	0,08	
Gesamtalkohol [g/L]	83	83	94,21	94,10	0,811	0,0890	2,686	0,000190	0,30	0,76	0,08		
Vorhandener Alkohol [g/L]	33	33	79,70	79,50	0,786	0,137	2,328	0,886	0,34	1,47	0,26	0,15	
Gesamtextrakt [g/L]	92	92	57,06	57,00	0,508	0,0530	1,755	0,594	0,29	0,86	0,09		
Zuckerfreier Extrakt [g/L]	88	88	26,29	26,40	1,136	0,121	1,048	1,048	1,24	1,08	0,12		
Vergärbare Zucker [g/L]	69	69	30,46	30,50	0,847	0,102	0,871	0,408	0,82	0,97	0,12		
Glucose [g/L]	60	60	11,20	11,20	0,287	0,037002	0,347	0,408	0,65	0,83	0,11	0,09	
Fructose [g/L]	59	59	19,21	19,223	0,460	0,059939	0,565	0,348	0,66	0,82	0,11		
Glycerin [g/L]	22	22	5,793	5,805	0,256	0,0545	0,252	0,348	1,01	0,73	0,22	0,16	
pH-Wert	56	56	3,273	3,283	0,0610	0,00815	0,0476	0,0493	1,28	1,24	0,17	0,17	
Gesamtsäure [g/L]	97	94	6,631	6,600	0,152	0,0157	0,107	0,145	0,54	1,42	0,15	0,11	
Weinsäure [g/L]-	33 (1)	32	1,921	1,880	0,187	0,0330	0,0967	0,227	1,93	0,82	0,34	0,15	
Flüchtige Säure [g/L], SO ₂ korrigiert	26 (2)	25	0,3784	0,3730	0,0758	0,0152	0,0286	0,0891	3,10	2,65	0,53	0,17	
Acetat als Essigsäure [g/L]													
- enz. aut.	18 (2)	17	0,2263	0,230	0,0361	0,00876	0,0162	0,0218	2,23	0,54	0,54		
- enz. man., HPLC + NMR	10 (1)	9	0,1986	0,1990	0,0224	0,00745	0,0144	0,218	1,56	0,71	0,52	0,18	
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	16	16	2,726	2,710	0,154	0,0386	0,132	0,0867	1,17	1,78	0,44		
L-Äpfelsäure [g/L]	32	32	2,698	2,700	0,147	0,0259	0,132	0,0865	1,12	1,70	0,30		
Gesamte Milchsäure [g/L]	16 (5)	15	0,2813	0,300	0,0538	0,0139	0,0203	0,0226	2,65	1,18	0,68		
L-Milchsäure [g/L]	21 (7)	20	0,1108	0,1055	0,0266	0,0059	0,0226	0,0226	3,18	1,18	0,26		
Reduktone [mg/L]	84	83	47,20	47,00	5,401	0,593	0,0837	0,0837	1,28	0,87	0,14		
Freie Schweflige Säure [mg/L]													
- Dest. + Phot.	24	23	51,91	51,00	5,337	1,113	4,515	17,84	1,18	0,87	0,25		
- jodometrisch incl. Reduktone	27	25	91,47	92,00	8,120	1,624	7,453	17,84	1,09	1,64	0,22		
- jodometrisch exci. Redukt.	55	55	46,62	46,00	6,471	0,873	4,136	17,84	1,56	0,87	0,12		
Ges. Schweflige Säure [mg/L]													
- Destillationsverfahren	51	47	255,8	257,0	8,789	1,282	17,84	17,84	0,49	1,64	0,24	0,07	
- jodometrisch incl. Reduktone	16	13	280,0	287,0	15,51	4,303	19,59	5,357	0,79	2,90	0,80		
- jodometrisch exci. Redukt.	25	22	246,7	247,5	15,33	3,269	17,28	5,357	0,89	2,86	0,61		

Erläuterungen zur Tabelle 3:

Blaue Markierungen kennzeichnen auffällige Befunde.

Rote Markierungen kennzeichnen die Überschreitung von Grenzwerten für eine gültige Z-Score-Bewertung.

Alle Werte = Gesamtzahl der betrachteten Werte; in Klammern zusätzlich die Anzahl der Werte, die um mehr als 50 % vom Median abweichen und nicht berücksichtigt wurden.

Gültige Werte = verbleibende Werte nach Ausschluss der Werte, deren Z-Score größer als absolut 5 ist.

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

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

Zielstdabw. exp. herk. (s_{exp}) = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (z. B. OIV-Methoden)

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 Labor-Standardabweichung und der Zielstandardabweichung nach Horwitz

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

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

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

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

Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten s_L/s_Z wurde bei den Ergebnissen herkömmlicher Analytik überwiegend eingehalten. Im Toleranzbereich erhöhte Werte für den Quotienten s_L/s_{Ziel} ergaben sich bei den Parametern Weinsäure, Acetat (enzymatisch manuell, HPLC), Gesamte Äpfelsäure, L-Äpfelsäure und Gesamte Schweflige Säure (Destillationsverfahren).

Der Höchstwert von 2,0 wurde beim Parameter Flüchtige Säure, bei den Ergebnissen der automatisierten enzymatischen Bestimmung von Acetat, bei der Gesamten Milchsäure und der Gesamten Schwefligen Säure (jodometrische Bestimmung) überschritten.

Die Gesamtergebnisse für **Weinsäure** fielen bei den Prüfgütern in Abhängigkeit von der Weinart unterschiedlich aus. Bei dem Roséwein-Prüfgut lag der Wert des Quotienten s_L/s_Z bei 1,93. Bei einem Wert des Quotienten u_M/s_Z von 0,34 war die Zuverlässigkeit des Bezugswertes nur leicht eingeschränkt. Deshalb werden die hier für Weinsäure erhaltenen Z-Scores als noch gültig bewertet.

Für **Acetat** wurden je Prüfgut insgesamt zwischen 33 und 36 Laborergebnisse eingesandt. Jeweils 19 bis 20 Laborergebnisse wurden automatisiert enzymatisch bestimmt. Jeweils 4 Ergebnisse wurden mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie ($^1\text{H-NMR}$), 6 mittels Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie (FTIR) und 1 bis 2 mittels manueller enzymatischer Bestimmung erhalten. Eine Bestimmung mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) wurde bei 2 bis 3 Ergebnissen für jedes Prüfgut mitgeteilt. Bei einem Prüfgut erfolgte auch eine Bestimmung mittels Ionenchromatographie.

Wie bei vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen seit mehreren Jahren beobachtet, führte die automatisierte enzymatische Bestimmung bei allen Prüfgütern außer dem Prüfgut

FT22P04 zu gegenüber den übrigen Verfahren (ohne FTIR) zwischen 10 und 20 % höheren Werten. Beim Rieslingprüfgut FT22P02 (pH-Wert: 2,92 und Gesamtsäure: 10,1 g/L) liegen die Werte im Median sogar um 60 % höher. Es ist bekannt, dass die Ergebnisse der vorherrschenden Methode zur automatisierten Bestimmung vom pH-Wert bzw. Gesamtsäuregehalt abhängig sind.

Eine getrennte Bewertung der Laborergebnisse für die automatisiert enzymatischen und die Ergebnisse der anderen Verfahren wurde für das Prüfgut FT22P01 durchgeführt.

Für die Laborergebnisse der automatisierten enzymatischen Bestimmung lag der Wert des Quotienten s_L/s_Z mit 2,23 über dem Höchstwert von 2,0. Außerdem ist die Unsicherheit des Bezugswertes bei einem Wert des Quotienten u_M/s_Z von 0,54, also über 0,5 für eine gültige Bewertung der Laborleistung zu groß. Es konnten daher keine gültigen Z-Scores ermittelt werden.

Für die Laborergebnisse mit anderen Methoden ergab sich ein Wert des Quotienten s_L/s_Z von 1,56. Wegen der geringen Anzahl auswertbarer Laborergebnisse war die Zuverlässigkeit des Bezugswertes bei einem Wert des Quotienten u_M/s_Z von 0,52 eingeschränkt. Die Z-Scores für diese Laborergebnisse werden als noch gültig bewertet.

Bei der **Gesamten Äpfelsäure** lagen je Prüfgut 12 bis 16 Laborergebnisse mit herkömmlichen Methoden vor. Diese wurden meist mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie erhalten. Bei dem Prüfgut FT22P01 lag der Quotient s_L/s_Z im erhöhten Bereich bei 1,78. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist bei einem Wert für den Quotienten u_M/s_Z von 0,44 eingeschränkt. Die Bezugswerte werden jedoch durch die Ergebnisse zum Parameter L-Äpfelsäure gestützt, sodass die Z-Scores gültig sind.

Für die Prüfgut FT22P01 lag der Quotient s_L/s_Z bei der überwiegend automatisiert enzymatisch bestimmten **L-Äpfelsäure** mit 1,70 über den Richtwert von 1,5 und ist damit leicht erhöht. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist uneingeschränkt gegeben. Die Z-Scores sind gültig.

Je Prüfgut wurden für die **Gesamte Milchsäure** zwischen 16 und 24 Laborergebnisse mitgeteilt, die mittels HPLC, enzymatisch und mit $^1\text{H-NMR}$ ermittelt wurden. Der Gehalt an Gesamter Milchsäure lag bei dem Prüfgut FT22P01 im unteren Anwendungsbereich der Bestimmungsmethoden. Die Werte der Quotienten s_L/s_Z und u_M/s_Z lagen über den Höchstwerten von 2,0 bzw. 0,5. Dementsprechend konnten keine gültigen Z-Scores ermittelt werden.

Entsprechend der Definition des konventionellen Parameterbegriffes „**Flüchtige Säure**“ wurde um die Mitteilung der Ergebnisse mit Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure gebeten. Drei Laboratorien haben auch Ergebnisse mitgeteilt, bei denen sie den Einfluss der Sorbinsäure korrigiert haben. Für diese Laboratorien wurden nur die Ergebnisse ohne Sorbinsäure-Korrektur bewertet.

Für den Kalifornischen Roséwein lag der Medianwert mit 0,373 g/L unter dem Mittelwert von 0,45 g/L der im methodenprüfenden OIV-Ringversuch eingesetzten Prüfgüter. Die Standardabweichung der Laborergebnisse überschritt nach Ausschluss eines um mehr als 50 % vom Median abweichenden Laborergebnisses die Zielstandardabweichung um den Faktor 2,65. Damit wurde der Höchstwert 2,0 des Quotienten s_L/s_Z für die Ermittlung gültiger Z-Scores überschritten. Da

zugleich bei einem Wert des Quotienten u_M/s_Z von 0,53 die Zuverlässigkeit des Bezugswertes nicht mehr gegeben war, konnten bei diesem Prüfgut keine gültigen Z-Scores ermittelt werden.

Bei der **Freien Schwefligen Säure** ist bei den durch Destillations- oder photometrische Verfahren bestimmten Laborergebnissen kein Einfluss der Reduktone gegeben. Als Vertreter des 'wahren Wertes' wurde der Median aller Bestimmungsergebnisse dieser Methoden verwendet. Der Wert des Quotienten s_L/s_Z zeigte mit 1,18 an, dass eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Laborergebnisse gegeben war. Die Z-Scores dieser Laborergebnisse sind daher uneingeschränkt gültig.

Für die Bewertung der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen wurde einheitlich der Wert der Horwitz-Zielstandardabweichung für die Ergebnisse ohne Abzug der Reduktone angewendet. Die einschließlich bzw. ausschließlich des Beitrages der Reduktone mitgeteilten Ergebnisse wurden jeweils mit dem Medianwert der jeweiligen Gruppe der Laborergebnisse verglichen. Für beide Datengruppen ergaben sich befriedigende Werte des Quotienten s_L/s_Z . Die Z-Scores sind uneingeschränkt gültig. **Unabhängig davon war bei der jodometrischen Bestimmung der Freien Schwefligen Säure ein mitgeteiltes Ergebnis ohne Abzug der Reduktone fachlich nicht korrekt.**

Im Falle der **Gesamten Schwefligen Säure** erfolgte die Bewertung der Qualität der Laborergebnisse unter Bezug auf den Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren, da diese als Referenzverfahren vorgegeben sind. Für den Parameter Gesamte Schweflige Säure konnten gültige Z-Scores berechnet werden.

Die Ergebnisse mit jodometrischen Methoden unter Einschluss bzw. Ausschluss der Reduktone wurden zusätzlich gesondert ausgewertet, jeweils unter Bezug auf den Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren.

Für beide Gruppen ergaben sich Quotienten s_L/s_Z über dem Höchstwert von 2,0 bei gleichzeitig zu großer Unsicherheit des Bezugswertes (Quotient $u_M/s_Z > 0,5$). Eine gültige Bewertung der Laborergebnisse durch Z-Scores war bei den jodometrischen Bestimmungen nicht möglich. **Auch bei der jodometrischen Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure war ein mitgeteiltes Ergebnis ohne Abzug der Reduktone fachlich nicht korrekt.**

5 Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen

5.1 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

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 ($s_{\text{Ü FTIR}}$) verwendet, die Matrixeffekte statistisch, d. h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Die Abweichungen der FTIR-

Laborergebnisse vom Median der herkömmlichen Untersuchungsergebnisse und die, wie in Abschnitt 3 beschrieben, berechneten Z-Scores sind in den Ergebnistabellen des Abschnittes 6 aufgeführt. Die Laborergebnismittelungen für die Laboratorien stellen das mittels FTIR-Verfahren erhaltene Laborergebnis im Vergleich zum Median der Ergebnisse herkömmlicher Analytik dar. Für die Bewertung der einzelnen Parameter wurden die Zielstandardabweichungen s_{FTIR} bzw. $s_{\text{exp herk.}}$ verwendet. Liegt kein ausgeprägter Matrixeffekt vor, charakterisieren die erhaltenen Z-Scores 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.

Neben dem Vergleich der FTIR-Untersuchungsergebnisse mit den Ergebnissen der herkömmlichen Methoden ist der Vergleich dieser Ergebnisse untereinander von Interesse. Als experimentelle Zielstandardabweichung (s_{FTIR}) wird hierbei die Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens verwendet. Da deren Betrag nicht von Matrixeffekten beeinflusst wird, ist sie in der Regel deutlich kleiner als die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung (s_{FTIR}), mit der überwiegend die FTIR-Laborergebnisse beim Vergleich mit den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsverfahren bewertet werden. Die Quotienten s_L/s_{FTIR} zeigen, inwieweit die mit dieser Methode erzielbare Vergleichbarkeit von FTIR-Ergebnissen erreicht wurde. Darüber hinaus ermöglicht die Standardabweichung s_{FTIR} wegen ihres gegenüber der Standardabweichung s_{FTIR} geringeren Betrages die empfindlichere Erkennung von Unterschieden zwischen den Ergebnissen mit verschiedenen FTIR-Geräten und vor allem die Abschätzung der Matrixempfindlichkeit von Kalibrierungen.

Für jedes Prüfgut werden daher in einer eigenen Tabelle die wesentlichen beschreibenden Daten einer ausschließlich die FTIR-Ergebnisse berücksichtigenden Auswertung zusammengefasst. Diese wurden vereinfacht durch Anwendung des im Abschnitt **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** vorgestellten robusten Verfahrens ermittelt. Da wirkliche Ausreißer bei den Ergebnissen der FTIR-Messungen selten, aber eine zu breite homogene Streuung 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-Scores für einzelne Laborergebnisse zu beeinträchtigen, da der Median weiter als Bezugswert gilt.

Kriterien für die erreichte Gesamtleistung der Laboratorien respektive der eingesetzten Kalibrierungen ergeben sich aus einem Vergleich der gefundenen robusten Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit der nach Horwitz berechneten, im Allgemeinen von geeigneten analytischen und beherrschten Verfahren erreichten Vergleichsstandardabweichung sowie mit den Vergleichsstandardabweichungen (s_{FTIR}), die bei Ringversuchen zur Prüfung der FTIR-Methode erhalten wurden. Hierzu werden die Quotienten s_L/s_H und s_L/s_{FTIR} verwendet. Sind die Quotienten s_L/s_H bzw. s_L/s_{FTIR} blau (Wert > 1,5) bzw. rot (Wert > 2,0) markiert, wird die

Vergleichsstandardabweichung durch die Laborstandardabweichung (s_L) für diese Parameter signifikant bzw. hoch signifikant überschritten.

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-Scores 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 wiedergegeben und sind in den Ergebnismitteilungen für die einzelnen Laboratorien ebenfalls nicht enthalten.

Systematische Abweichungen der eigenen Ergebnisse vom mittleren Ergebnis der FTIR-Untersuchungen geben unter Berücksichtigung der Ergebnisse der herkömmlichen Methoden Hinweise auf die Eignung der eigenen Kalibrierung bzw. ihrer Anpassung an das eigene Laborgerät und sollten, falls unbefriedigend, Anlass zu Verbesserungsmaßnahmen geben.

5.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT22P01

Für das Prüfgut FT22P01 zeigt der in Tabelle 4 durchgeführte Vergleich der in dieser Laborvergleichsuntersuchung ermittelten robusten Standardabweichungen der Laborergebnisse (Spalte "Labor-Stdabw. s_L ") mit den nach Horwitz berechneten Standardabweichungen (Spalte "Zielstdabw n. Horwitz s_H ") in der Spalte "Quotient s_L/s_H ", dass bei den Messungen mit den Laborkalibrierungen nur bei 7 von 12 Parametern ein vergleichbarer Wert, d. h. $s_L/s_H < 1,5$, erreicht wurde. Das Ergebnis ist noch ungünstiger bei einem Vergleich der Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit den Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw exp. FTIR, s_{FTIR} "). Wie die Daten in Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR} " zeigen, wurde nur bei dem Parameter Vorhandener Alkohol der Wert 1,5 eingehalten, während bei den übrigen Parametern der Richtwert bzw. der Höchstwert von 2,0 überschritten wurde. Daraus folgt, dass bei den FTIR-Untersuchungen die Leistungsfähigkeit des Verfahrens bei weitem nicht erreicht wurde. Als Ursache der größeren Streuung kommen unzureichende Slope-Interzept-Korrekturen und vor allem weniger geeignete Parameterkalibrierungen in Betracht. Es kann sich allerdings auch ein schlechterer Pflegezustand des Gerätes auswirken.

Bei dem vorliegenden Prüfgut war für den Parameter **Gesamte Milchsäure** keine zuverlässige Bestimmung möglich, weil der Gehalt unter der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens liegt. Der dreifache Betrag der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung überschreitet den Medianwert der herkömmlichen Ergebnisse ($s_{FTIR} = \pm 0,209$ g/L, Medianwert = 0,300 g/L). Gemäß der Empfehlung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses werden daher für die FTIR-Messergebnisse keine Z-Scores ausgewiesen. Der Parameter ist deshalb in Tabelle 4 und in den Ergebnismitteilungen nicht aufgeführt.

Tabelle 4: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roséweinprüfgerät (FT22P01)

Parameter	alle Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Zielstdabw exp. FTIR s_{FTIR}	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	89	1,00819	1,008230	0,000465		0,000146		3,18	0,34
Vorhandener Alkohol (g/L)	91	80,56	80,50	1,0715	2,3524	0,739	0,46	1,45	0,15
Gesamtextrakt (g/L)	36	56,21	56,30	1,2441	1,7362	0,415	0,72	3,00	0,50
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	90	30,44	30,50	0,9353	1,0315	0,354	0,91	2,64	0,28
Glucose (g/L)	88	11,45	11,31	0,7847	0,4441	0,288	1,77	2,72	0,29
Fructose (g/L)	88	18,86	19,00	0,7195	0,6900	0,222	1,04	3,24	0,35
Glycerin (g/L)	73	5,841	5,750	0,5415	0,2500	0,265	2,17	2,04	0,24
pH-Wert	87	3,318	3,320	0,0742		0,0188		3,95	0,42
Gesamtsäure (g/L)	93	6,540	6,530	0,2490	0,2785	0,0816	0,89	3,05	0,32
Weinsäure (g/L)	80	2,364	2,350	0,2505	0,1169	0,132	2,14	1,90	0,21
Flüchtige Säure (g/L)	81	0,3190	0,3200	0,1091	0,0215	0,0427	5,08	2,56	0,28
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	80	2,707	2,720	0,3029	0,1324	0,0975	2,29	3,11	0,35
Freie Schweflige Säure (mg/L)	28	55,01	55,00	9,830	4,814	4,81	2,04	2,04	0,39
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	29	239,9	240,0	31,46	16,83	16,83	1,87	1,87	0,37

Erläuterungen zur Tabelle 4:

Blaue Markierungen kennzeichnen auffällige Befunde.

Rote Markierungen kennzeichnen die Überschreitung von Grenzwerten.

Alle Werte = Gesamtzahl der betrachteten Werte

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 (Vergleichstandardabweichung aus der Methodenvvalidierung des FTIR-Verfahrens)

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

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

Weiterhin ist von Interesse, inwieweit die Zentralwerte (Mittelwerte bzw. Mediane) der Ergebnisse der Vergleichsverfahren (herkömmliche Verfahren) und des FTIR-Verfahrens übereinstimmen respektive voneinander abweichen. 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 FT22P01.

Hierzu sind in Tabelle 5 die Abweichungen der Mediane der FTIR-Ergebnisse von den Medianen der Ergebnisse herkömmlicher Methoden sowie die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores zusammengestellt, die nach Division der Differenz durch die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung ($s_{\text{Ü FTIR}}$) erhalten werden. Bei dem Parameter Gesamtextrakt wurde nicht die strengere Übereinstimmungsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens sondern wie bei der Bewertung der Laborergebnisse die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet.

Tabelle 5: Vergleich herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT22P01

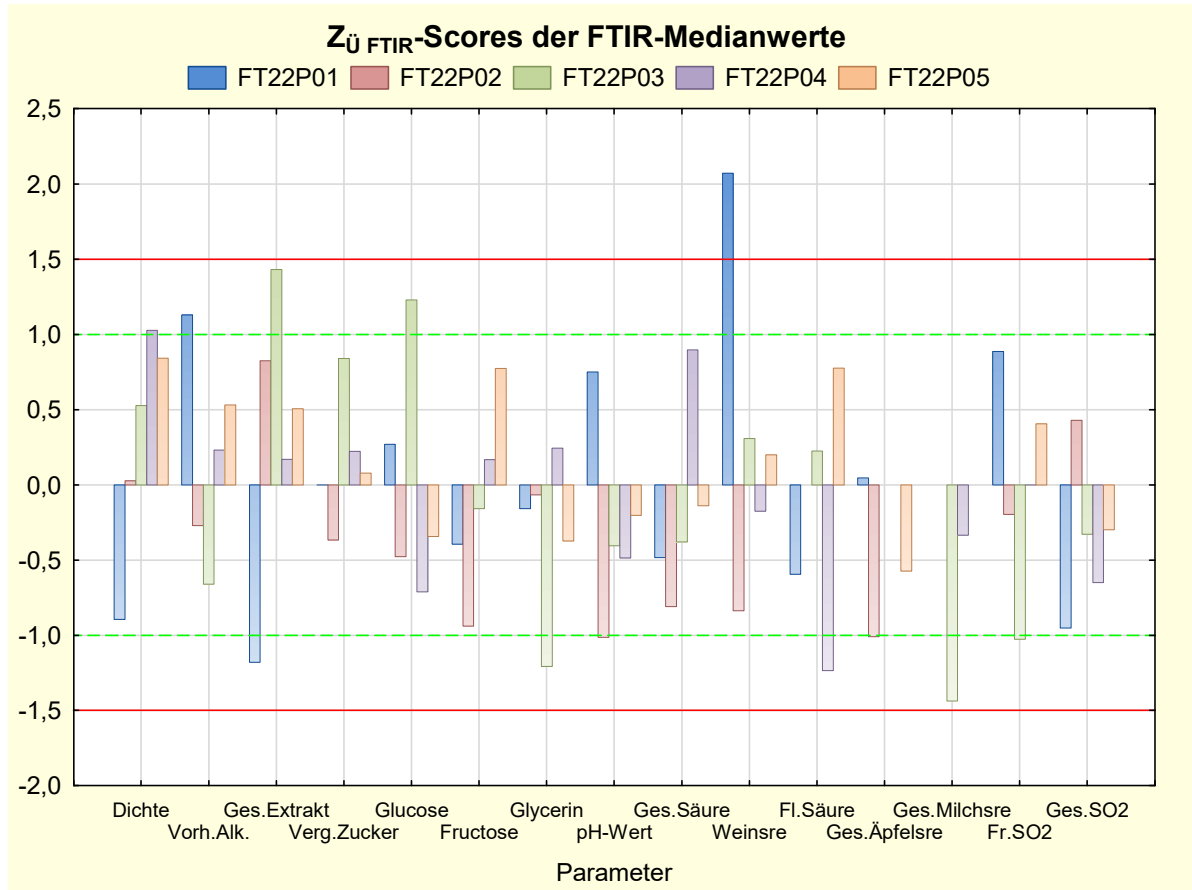
	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $s_{\text{Ü FTIR}}$	$Z_{\text{Ü FTIR}}$ - Score
Relative Dichte 20 °C/20 °C	1,008230	1,008400	-0,000170	0,000190	-0,89
Vorhandener Alkohol [g/L]	80,500	79,500	1,000	0,886	1,13
Gesamtextrakt [g/L]	56,300	57,000	-0,700	0,594	-1,18
Vergärbare Zucker [g/L]	30,500	30,500	0,000	0,871	0,00
Glucose [g/L]	11,310	11,200	0,110	0,408	0,27
Fructose [g/L]	19,000	19,223	-0,223	0,565	-0,39
Glycerin [g/L]	5,750	5,805	-0,055	0,348	-0,16
pH-Wert	3,320	3,283	0,037	0,049	0,75
Gesamtsäure [g/L]	6,530	6,600	-0,070	0,145	-0,48
Weinsäure [g/L]	2,350	1,880	0,470	0,227	2,07
Flüchtige Säure [g/L]	0,320	0,373	-0,053	0,089	-0,59
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	2,720	2,710	0,010	0,218	0,05
Freie Schweflige Säure [mg/L]	55,000	51,000	4,000	4,515	0,89
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	240,00	257,00	-17,00	17,837	-0,95

Wie aus der Tabelle 5 ersichtlich, liegen die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der Mediane der FTIR-Ergebnisse in der Regel deutlich unter 1 und überschreiten nur bei dem Parameter Weinsäure den Wert 1,5. Mit Ausnahme dieses Parameters sind die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores der FTIR-Laborergebnisse aussagekräftig und zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen geeignet. Bei den Parametern Vorhandener Alkohol und Gesamtextrakt ist ein geringer und bei dem Parameter Weinsäure ein erheblicher Matrixeffekt zu berücksichtigen.

5.3 Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter

Einen zusammenfassenden Überblick über die Eignung der FTIR-Untersuchungsergebnisse zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen gibt auf der Grundlage von Gegenüberstellungen aller herkömmlichen und FTIR-Untersuchungsergebnisse die nachstehende Abbildung für alle Prüfgüter. Sie zeigt für die Gesamtheit der eingesetzten Kalibrierungen die $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores 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 $Z_{\text{Ü FTIR}}$ -Scores sind in der Graphik durch grüne bzw. rote Linien markiert. Liegt der absolute Betrag der dargestellten $Z_{\text{Ü}}$ -Scores über 1, ist ein erhöhter Anteil von FTIR-Untersuchungsergebnissen

mit unbefriedigenden, über dem Absolutbetrag von 2, d. h. mit über + 2 bzw. unter -2, liegenden Z-Scores zu erwarten. Wenn der Z_{FTIR} -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.



Zunächst zeigt eine globale Betrachtung der Graphik, dass bei der Hälfte der Parameter systematische Abweichungen ($|Z_{\text{FTIR}}\text{-Score}| > 1,0$) zwischen den herkömmlichen und den FTIR-Ergebnissen auftreten. Insgesamt liegen acht Parameter/Prüfgut-Kombinationen vor, bei denen der Betrag des Z_{FTIR} -Scores den Wert 1,0 überschreitet. Mit vier Überschreitungen wies das Prüfgut FT22P03, der Pfälzer Rotwein, die höchste Anzahl auffälliger Z_{FTIR} -Scores für einzelne Parameter/Prüfgut-Kombinationen auf, gefolgt von dem Prüfgut FT22P01, dem kalifornischen Roséwein, mit drei Überschreitungen. Dennoch liegen für die Mehrzahl der Parameter/Prüfgut-Kombinationen (57 von 69) vernachlässigbare Matrixeffekte vor. In vier Fällen liegt der Z_{FTIR} -Score bei 1,0. Keine Hinweise auf wesentliche systematische Unterschiede liegen für alle Prüfgüter bei den Parametern Dichte, Vergärbare Zucker, Fructose, pH-Wert, Gesamtsäure, Gesamte Äpfelsäure, Freie Schweflige Säure und Gesamte Schweflige Säure vor. Bei diesen Parametern und bei allen unauffälligen Parameter/Prüfgut-Kombinationen charakterisieren die Z-Scores der eigenen Messergebnisse unmittelbar und aussagekräftig die Leistungsfähigkeit der eigenen FTIR-Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters,

Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Daher zeigen erhöhte Z-Score-Beträge bei diesen Kombinationen eindeutig Schwächen der eigenen Parameterkalibrierung oder des Gerätezustandes an.

6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern – Prüfgut Roséwein (FT22P01)

6.1 Berechnete Parameter

Bei dem Prüfgut Roséwein (FT22P01) sollten von allen bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien auch die Ergebnisse zu den berechneten Parametern angegeben werden. Diese Angaben erfolgten nicht vollständig. Von diesen 86 Teilnehmern fehlte die Angabe eines Gesamtalkoholwertes bei 7 Teilnehmern völlig, während zwei weitere Teilnehmer nur einen Wert auf der Grundlage von FTIR-Messwerten mitteilten. Die mitgeteilten Daten wurden nicht rechnerisch nachgeprüft, da erfahrungsgemäß Fehler äußerst selten auftreten. 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 3.9.2 dargelegten Gründen wurde für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt bei dem Prüfgut FT22P01 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 zwei 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.

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 Deskriptiven Ergebnisse

Titelzeile:	Ergebnisse für [Bezeichnung des Analysenparameters];	alle Daten;	ber. Daten
Zeile 1	Anzahl der Laboratorien, die diesen Parameter bearbeitet haben		
Zeile 2:	Minimum: kleinster mitgeteilter, einbezogener Analysenwert		
Zeile 3:	Mittelwert aus allen einbezogenen Analysenwerten		
Zeile 4:	Median aller einbezogenen Analysenwerte		
Zeile 5:	Maximum: größter mitgeteilter, einbezogener Analysenwert		
Zeile 6:	Laborstandardabweichung: Standardabweichung aus allen gültigen Ergebniswerten (s_L)		
Zeile 7:	Standardfehler des Mittelwertes aus den einbezogenen Analysenwerten (u_M)		
Zeile 8:	Zielstandardabweichung: berechnet nach Horwitz (s_H)		
Zeile 9:	Zielstandardabweichung: experimentelle Vergleichstandardabweichung ($s_{exp\ herk.}$)		
Zeile 10:	Zielstandardabweichung: Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung ($s_{\overline{FTIR}}$)		
Zeile 11:	Horrat-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 ($s_L/s_{\overline{FTIR}}$): 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 ($u_M/s_{\overline{FTIR}}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 10		

In der Tabelle 'Deskriptive Ergebnisse' werden die beschreibenden statistischen Werte angegeben, die aus allen einbezogenen (Daten, die nicht mehr als 50 % vom Median abweichen), mit herkömmlichen Methoden erhaltenen Laborwerten (Spalte: alle Daten) bzw. den nach Ausschluss stark abweichender Ergebnisse (Z-Score > |5|) verbleibenden Daten (Spalte: ber. Daten) berechnet wurden. Sie beschreiben die Grundlage der Bewertung der Laborleistungen.

6.2.3 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

Die Tabelle mit den Angaben zu den Analyseverfahren gibt einen Überblick über die zur Bestimmung des jeweiligen Parameters eingesetzten Analyseverfahren und die Häufigkeit ihrer

Anwendung mit einer orientierenden Information über eventuell verfahrensbedingte Ergebnisunterschiede und Ergebnisstreuungen. Hierzu dient eine Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung nach robusten statistischen Methoden.

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 so gewählt, dass die Abweichungsbeträge in der Regel vollständig dargestellt sind. Es wird in begrenztem Maß in 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 meist 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-Scores 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.

6.3 Relative Dichte 20 °C/20 °C**6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 8.4	1,00848	0,000080	0,61	
3	LwK 8.4	1,00865	0,000250	1,89	
4	LwK 8.4	1,00838	-0,000020	-0,15	
5	LwK 8.4	1,00857	0,000170	1,29	
6	LwK 8.4	1,00829	-0,000110	-0,83	
8	LwK 8.1	1,00818	-0,000220	-1,67	
9	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
10	LwK 8.1	1,00850	0,000100	0,76	
11	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
12	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
13	LwK 8.4	1,00834	-0,000060	-0,45	
14	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
15	LwK 8.4	1,00842	0,000020	0,15	
17	LwK 8.4	1,00820	-0,000200	-1,52	
18	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
19	LwK 8.4	1,00836	-0,000040	-0,30	
20	LwK 8.4	1,00847	0,000070	0,53	
21	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
22	LwK 8.4	1,00851	0,000110	0,83	
23	LwK 8.4	1,00836	-0,000040	-0,30	
24	LwK 8.3	1,00851	0,000110	0,83	
25	LwK 8.4	1,00803	-0,000370	-2,80	
26	LwK 8.4	1,00846	0,000060	0,45	
27	LwK 8.4	1,00834	-0,000060	-0,45	
28	LwK 8.4	1,00832	-0,000080	-0,61	
29	LwK 8.1	1,00830	-0,000100	-0,76	
30	LwK 8.4	1,00837	-0,000030	-0,23	
31	LwK 8.4	1,00841	0,000010	0,08	
32	LwK 8.4	1,00842	0,000020	0,15	
33	LwK 8.1	1,00840	0,000000	0,00	
34	LwK 8.4	1,00820	-0,000200	-1,52	
37	LwK 8.4	1,00860	0,000200	1,52	
38	LwK 8.1	1,00845	0,000050	0,38	
39	LwK 8.4	1,00863	0,000230	1,74	
40	LwK 8.4	1,00851	0,000110	0,83	
41	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
42	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
43	LwK 8.4	1,00848	0,000080	0,61	
44	LwK 8.4	1,00823	-0,000170	-1,29	
45	LwK 8.4	1,00844	0,000040	0,30	
46	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
47	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
48	LwK 8.4	1,00863	0,000230	1,74	
49	LwK 8.4	1,00860	0,000200	1,52	
50	LwK 8.4	1,00857	0,000170	1,29	
52	LwK 8.4	1,00860	0,000200	1,52	
53	LwK 8.4	1,00838	-0,000020	-0,15	
54	LwK 8.4	1,00822	-0,000180	-1,36	
55	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
56	LwK 8.4	1,00849	0,000090	0,68	
57	LwK 8.4	1,00890	0,000500	3,79	
58	LwK 8.4	1,00820	-0,000200	-1,52	
59	LwK 8.4	1,00849	0,000090	0,68	
60	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
61	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
62	LwK 8.4	1,00821	-0,000190	-1,44	
64	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
65	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
67	LwK 8.4	1,00860	0,000200	1,52	
72	LwK 8.4	1,00838	-0,000020	-0,15	
73	LwK 8.4	1,00910	0,000700	5,30	(**)
76	LwK 8.4	1,00869	0,000290	2,20	
77	LwK 8.1	1,00890	0,000500	3,79	
80	LwK 8.4	1,00829	-0,000110	-0,83	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
85	LwK 8.4	1,00837	-0,000030	-0,23	
87	LwK 8.4	1,00844	0,000040	0,30	
95	LwK 8.4	1,00847	0,000070	0,53	
121	LwK 8.4	1,00835	-0,000050	-0,38	
122	LwK 8.4	1,00837	-0,000030	-0,23	
123	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
124	LwK 8.4	1,00830	-0,000100	-0,76	
125	LwK 8.1	1,00853	0,000130	0,98	
126	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
127	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
128	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
129	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
130	LwK 8.4	1,00832	-0,000080	-0,61	
131	LwK 8.4	1,00846	0,000060	0,45	
132	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
133	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
134	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
135	LwK 8.4	1,00845	0,000050	0,38	
136	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
137	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
138	LwK 8.4	1,00820	-0,000200	-1,52	
139	LwK 8.4	1,00860	0,000200	1,52	
140	LwK 8.1	1,00809	-0,000310	-2,35	
141	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
142	LwK 8.4	1,00858	0,000180	1,36	
143	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
144	LwK 8.4	1,00822	-0,000180	-1,36	
145	LwK 8.4	1,00844	0,000040	0,30	
146	LwK 8.1	1,00840	0,000000	0,00	
147	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
148	LwK 8.1	1,00860	0,000200	1,52	
149	LwK 8.4	1,00892	0,000520	3,94	
150	LwK 8.4	1,00850	0,000100	0,76	
151	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	
152	LwK 8.2	1,00840	0,000000	0,00	
154	LwK 8.4	1,00840	0,000000	0,00	

6.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
153	FTIR	1,00840	-0,000005	-0,03	
201	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
202	FTIR	1,00823	-0,000175	-0,92	
203	FTIR	1,00867	0,000265	1,39	
204	FTIR	1,00740	-0,001005	-5,29	(**)
205	FTIR	1,00790	-0,000505	-2,66	
206	FTIR	1,00872	0,000315	1,66	
207	FTIR	1,00790	-0,000505	-2,66	
208	FTIR	1,00713	-0,001275	-6,71	(**)
210	FTIR	1,00799	-0,000415	-2,18	
211	FTIR	1,00817	-0,000235	-1,24	
213	FTIR	1,00810	-0,000305	-1,61	
215	FTIR	1,00760	-0,000805	-4,24	
216	FTIR	1,00820	-0,000205	-1,08	
217	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
218	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
219	FTIR	1,00780	-0,000605	-3,18	
220	FTIR	1,00748	-0,000925	-4,87	
221	FTIR	1,00820	-0,000205	-1,08	
222	FTIR	1,00792	-0,000485	-2,55	
223	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
224	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
226	FTIR	1,00824	-0,000165	-0,87	
227	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
228	FTIR	1,00807	-0,000335	-1,76	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	1,00810	-0,000305	-1,61	
230	FTIR	1,00838	-0,000025	-0,13	
232	FTIR	1,00810	-0,000305	-1,61	
233	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
235	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
236	FTIR	1,00820	-0,000205	-1,08	
237	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
238	FTIR	1,00893	0,000525	2,76	
239	FTIR	1,00720	-0,001205	-6,34	(**)
241	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
242	FTIR	1,00796	-0,000445	-2,34	
243	FTIR	1,00833	-0,000075	-0,39	
244	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
245	FTIR	1,00780	-0,000605	-3,18	
246	FTIR	1,00810	-0,000305	-1,61	
247	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
248	FTIR	1,00884	0,000435	2,29	
249	FTIR	1,00880	0,000395	2,08	
251	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
252	FTIR	1,00680	-0,001605	-8,45	(**)
253	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
254	FTIR	1,00828	-0,000125	-0,66	
255	FTIR	1,00840	-0,000005	-0,03	
256	FTIR	1,00750	-0,000905	-4,76	
257	FTIR	1,00910	0,000695	3,66	
258	FTIR	1,00800	-0,000405	-2,13	
259	FTIR	1,00792	-0,000485	-2,55	
260	FTIR	1,00795	-0,000455	-2,39	
261	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
262	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
263	FTIR	1,00850	0,000095	0,50	
264	FTIR	1,00770	-0,000705	-3,71	
265	FTIR	1,00809	-0,000315	-1,66	
266	FTIR	1,00770	-0,000705	-3,71	
267	FTIR	1,00823	-0,000175	-0,92	
268	FTIR	1,00780	-0,000605	-3,18	
269	FTIR	1,00890	0,000495	2,61	
270	FTIR	1,00829	-0,000115	-0,61	
271	FTIR	1,00855	0,000145	0,76	
273	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
274	FTIR	1,00827	-0,000135	-0,71	
275	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
276	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
277	FTIR	1,00880	0,000395	2,08	
278	FTIR	1,00888	0,000475	2,50	
279	FTIR	1,00770	-0,000705	-3,71	
280	FTIR	1,00767	-0,000735	-3,87	
281	FTIR	1,00830	-0,000105	-0,55	
282	FTIR	1,00870	0,000295	1,55	
283	FTIR	1,00800	-0,000405	-2,13	
284	FTIR	1,00810	-0,000305	-1,61	
286	FTIR	1,00750	-0,000905	-4,76	
287	FTIR	1,00777	-0,000635	-3,34	
288	FTIR	1,00777	-0,000635	-3,34	
289	FTIR	1,00791	-0,000495	-2,61	
290	FTIR	1,00760	-0,000805	-4,24	
291	FTIR	1,00788	-0,000525	-2,76	
292	FTIR	1,00780	-0,000605	-3,18	
293	FTIR	1,00740	-0,001005	-5,29	(**)
294	FTIR	1,00860	0,000195	1,03	
295	FTIR	1,00740	-0,001005	-5,29	(**)
312	FTIR	1,00820	-0,000205	-1,08	
325	FTIR	1,01000	0,001595	8,39	(**)

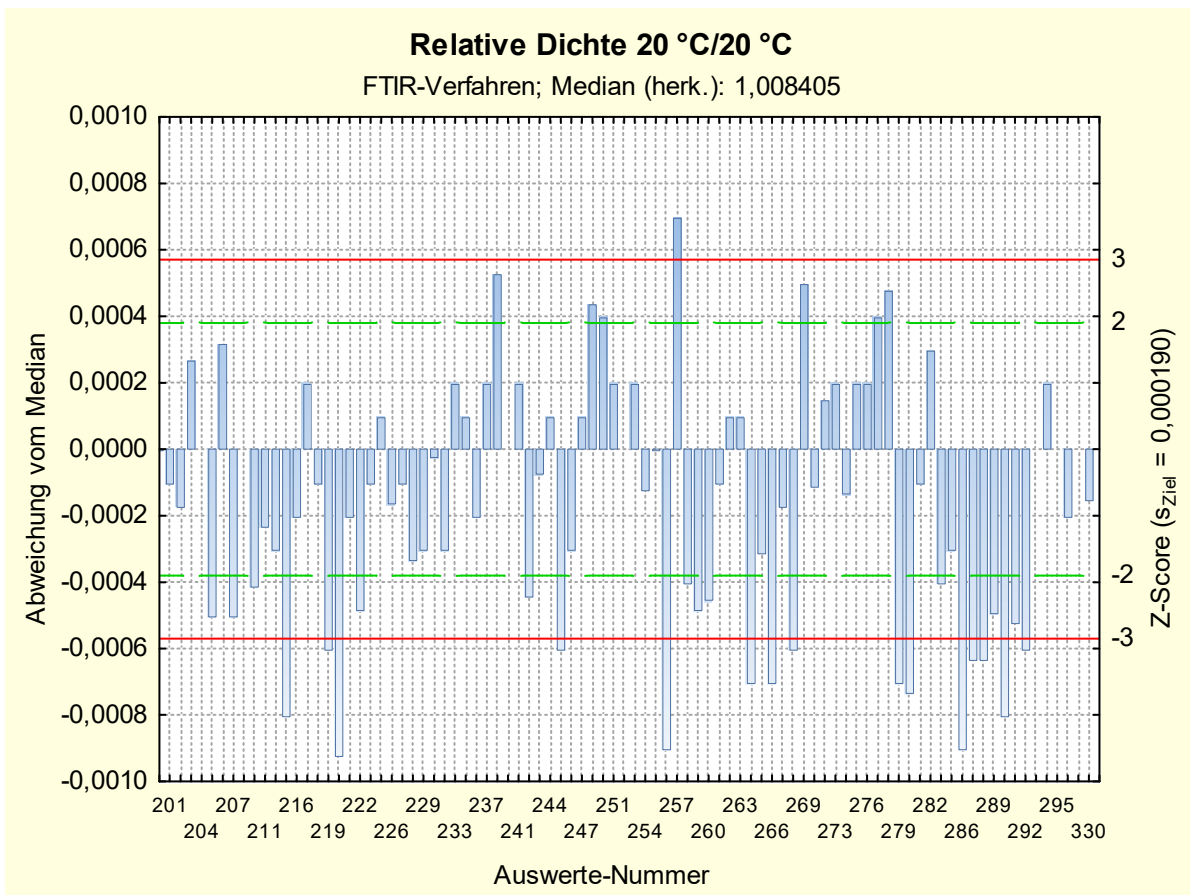
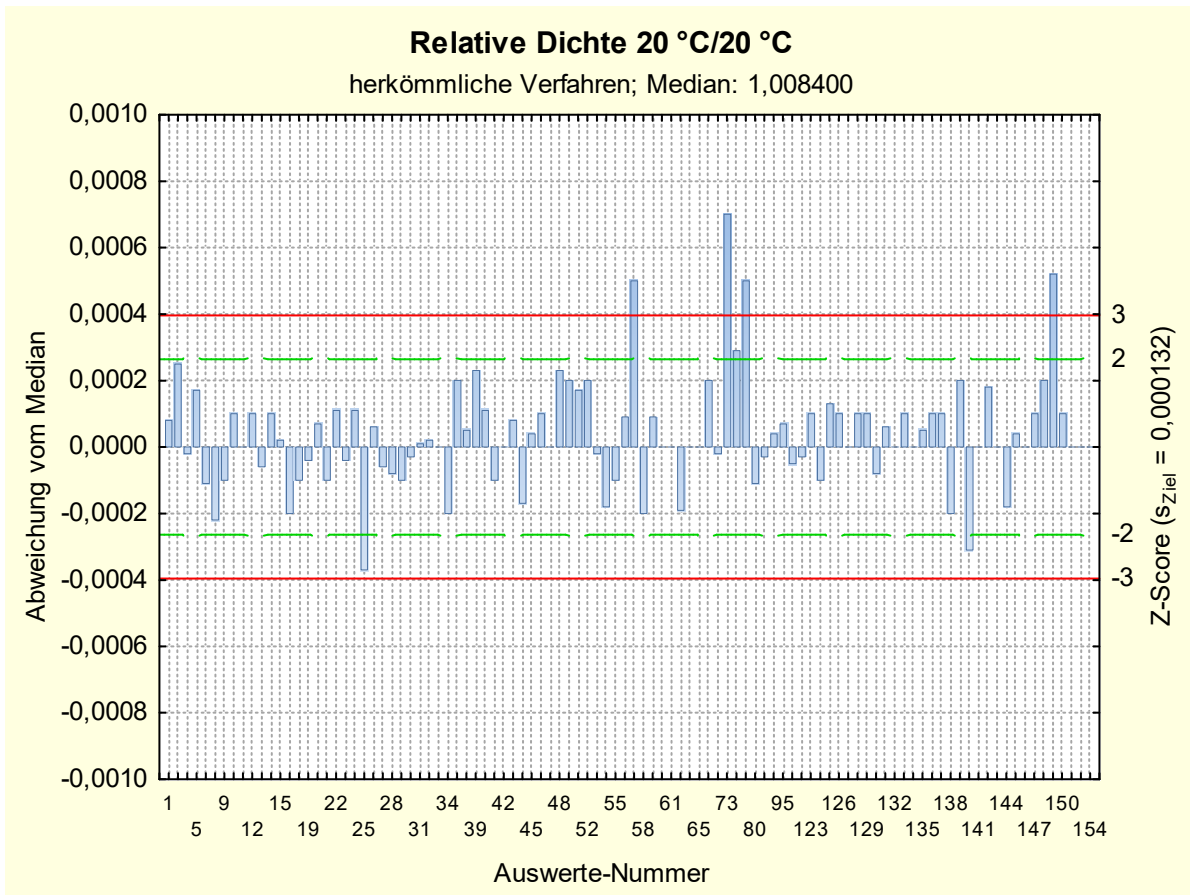
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.3.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	100	99
Minimalwert	1,00803	1,00803
Mittelwert	1,008437	1,008430
Median	1,008405	1,008400
Maximalwert	1,00910	1,00892
Standardabweichung (s_L)	0,000163	0,000150
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000016	0,000015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horvat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,24	1,13
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,86	
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,12	0,11
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,09	

6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	10	1,00842	0,000222
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00840	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	1	1,00851	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	88	1,00843	0,000129
	herkömmliche Verfahren	100	1,00843	0,000132
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	89	1,00819	0,000465



6.4 Gesamtalkohol [g/L]

6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 1.1 (1)	93,50	-0,600	-0,22	-0,56	
3	LwK 1.1 (1)	93,40	-0,705	-0,26	-0,66	
5	LwK 1.1 (1)	93,64	-0,460	-0,17	-0,43	
8	LwK 1.1 (1)	94,07	-0,030	-0,01	-0,03	
9	LwK 1.1 (1)	93,94	-0,160	-0,06	-0,15	
11	LwK 1.1 (3)	93,60	-0,500	-0,19	-0,47	
12	LwK 1.1 (1)	94,90	0,800	0,30	0,75	
13	LwK 1.1 (1)	93,50	-0,600	-0,22	-0,56	
14	LwK 1.1 (1)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
15	LwK 1.1 (1)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
17	LwK 1.1 (2)	95,84	1,740	0,65	1,64	
18	LwK 1.1 (1)	95,60	1,500	0,56	1,41	
19	LwK 1.1 (2)	95,50	1,400	0,52	1,32	
20	LwK 1.1 (1)	94,16	0,064	0,02	0,06	
21	LwK 1.1 (1)	94,40	0,300	0,11	0,28	
22	LwK 1.1 (1)	93,39	-0,710	-0,26	-0,67	
23	LwK 1.1 (2)	94,40	0,300	0,11	0,28	
24	LwK 1.1 (3)	95,20	1,100	0,41	1,03	
25	LwK 1.1 (2)	95,45	1,350	0,50	1,27	
26	LwK 1.1 (1)	94,20	0,100	0,04	0,09	
27	LwK 1.1 (1)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
28	LwK 1.1 (2)	95,46	1,357	0,51	1,28	
29	LwK 1.1 (2)	95,50	1,400	0,52	1,32	
31	LwK 1.1 (1)	93,20	-0,900	-0,34	-0,85	
32	LwK 1.1 (1)	94,40	0,300	0,11	0,28	
33	LwK 1.1 (2)	92,66	-1,440	-0,54	-1,35	
34	LwK 1.1 (1)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
36	LwK 1.1 (1)	94,10	0,000	0,00	0,00	
38	LwK 1.1 (1)	92,99	-1,110	-0,41	-1,04	
39	LwK 1.1 (1)	94,50	0,400	0,15	0,38	
40	LwK 1.1 (1)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
41	LwK 1.1 (1)	93,60	-0,500	-0,19	-0,47	
42	LwK 1.1 (1)	93,67	-0,430	-0,16	-0,40	
43	LwK 1.1 (1)	93,10	-1,000	-0,37	-0,94	
44	LwK 1.1 (2)	94,20	0,100	0,04	0,09	
45	LwK 1.1 (1)	94,00	-0,100	-0,04	-0,09	
46	LwK 1.1 (1)	95,50	1,400	0,52	1,32	
47	LwK 1.1 (1)	93,30	-0,800	-0,30	-0,75	
48	LwK 1.1 (1)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
49	LwK 1.1 (3)	96,40	2,300	0,86	2,16	
50	LwK 1.1 (1)	94,70	0,600	0,22	0,56	
52	LwK 1.1 (1)	94,60	0,500	0,19	0,47	
53	LwK 1.1 (1)	93,50	-0,600	-0,22	-0,56	
54	LwK 1.1 (1)	94,22	0,120	0,04	0,11	
55	LwK 1.1 (2)	95,20	1,100	0,41	1,03	
56	LwK 1.1 (1)	94,74	0,640	0,24	0,60	
58	LwK 1.1 (1)	93,60	-0,500	-0,19	-0,47	
59	LwK 1.1 (1)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
60	LwK 1.1 (1)	93,49	-0,613	-0,23	-0,58	
61	LwK 1.1 (1)	94,21	0,110	0,04	0,10	
76	LwK 1.1 (1)	95,17	1,070	0,40	1,01	
77	LwK 1.1 (2)	96,20	2,100	0,78	1,98	
85	LwK 1.1 (2)	96,00	1,900	0,71	1,79	
95	LwK 1.1 (1)	93,71	-0,390	-0,15	-0,37	
121	LwK 1.1 (1)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
122	LwK 1.1 (1)	94,60	0,500	0,19	0,47	
123	LwK 1.1 (1)	94,40	0,300	0,11	0,28	
124	LwK 1.1 (1)	94,60	0,500	0,19	0,47	
125	LwK 1.1 (1)	95,20	1,100	0,41	1,03	
126	LwK 1.1 (1)	94,30	0,200	0,07	0,19	
127	LwK 1.1 (1)	95,10	1,000	0,37	0,94	
128	LwK 1.1 (1)	91,70	-2,400	-0,89	-2,26	
129	LwK 1.1 (1)	95,00	0,900	0,34	0,85	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
130	LwK 1.1 (1)	93,32	-0,780	-0,29	-0,73	
131	LwK 1.1 (1)	94,08	-0,020	-0,01	-0,02	
132	LwK 1.1 (2)	94,70	0,600	0,22	0,56	
133	LwK 1.1 (2)	93,89	-0,210	-0,08	-0,20	
134	LwK 1.1 (1)	94,70	0,600	0,22	0,56	
135	LwK 1.1 (2)	94,96	0,860	0,32	0,81	
136	LwK 1.1 (2)	94,50	0,400	0,15	0,38	
137	LwK 1.1 (2)	93,38	-0,720	-0,27	-0,68	
138	LwK 1.1 (1)	94,80	0,700	0,26	0,66	
139	LwK 1.1 (1)	94,20	0,100	0,04	0,09	
140	LwK 1.1 (1)	95,30	1,200	0,45	1,13	
141	LwK 1.1 (1)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
142	LwK 1.1 (1)	94,00	-0,100	-0,04	-0,09	
143	LwK 1.1 (1)	93,90	-0,200	-0,07	-0,19	
144	LwK 1.1 (2)	94,00	-0,100	-0,04	-0,09	
145	LwK 1.1 (1)	95,00	0,900	0,34	0,85	
146	LwK 1.1 (3)	95,45	1,350	0,50	1,27	
147	LwK 1.1 (1)	93,60	-0,500	-0,19	-0,47	
148	LwK 1.1 (2)	94,00	-0,100	-0,04	-0,09	
149	LwK 1.1 (2)	93,20	-0,900	-0,34	-0,85	
150	LwK 1.1 (1)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
151	LwK 1.1 (1)	93,32	-0,780	-0,29	-0,73	
152	LwK 1.1 (2)	94,70	0,600	0,22	0,56	
153	LwK 1.1 (FTIR)	94,70	0,600	0,22	0,56	
154	LwK 1.1 (2)	94,40	0,300	0,11	0,28	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

6.4.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
203	LwK 1.1 (FTIR)	95,84	1,745	0,65	1,64	
208	LwK 1.1 (FTIR)	94,04	-0,060	-0,02	-0,06	
211	LwK 1.1 (FTIR)	95,26	1,160	0,43	1,09	
216	LwK 1.1 (FTIR)	94,84	0,740	0,28	0,70	
217	LwK 1.1 (FTIR)	96,35	2,250	0,84	2,12	
218	LwK 1.1 (FTIR)	96,40	2,300	0,86	2,16	
220	LwK 1.1 (FTIR)	94,09	-0,006	-0,00	-0,01	
221	LwK 1.1 (FTIR)	93,70	-0,400	-0,15	-0,38	
222	LwK 1.1 (FTIR)	93,61	-0,489	-0,18	-0,46	
224	LwK 1.1 (FTIR)	94,90	0,800	0,30	0,75	
225	LwK 1.1 (FTIR)	94,83	0,734	0,27	0,69	
227	LwK 1.1 (FTIR)	95,24	1,140	0,42	1,07	
238	LwK 1.1 (FTIR)	96,60	2,500	0,93	2,35	
241	LwK 1.1 (FTIR)	96,30	2,200	0,82	2,07	
242	LwK 1.1 (FTIR)	94,81	0,710	0,26	0,67	
246	LwK 1.1 (FTIR)	95,40	1,300	0,48	1,22	
247	LwK 1.1 (FTIR)	93,10	-1,000	-0,37	-0,94	
248	LwK 1.1 (FTIR)	94,50	0,400	0,15	0,38	
253	LwK 1.1 (FTIR)	93,50	-0,600	-0,22	-0,56	
254	LwK 1.1 (FTIR)	93,50	-0,600	-0,22	-0,56	
255	LwK 1.1 (FTIR)	94,90	0,800	0,30	0,75	
256	LwK 1.1 (FTIR)	97,98	3,880	1,44	3,65	
260	LwK 1.1 (FTIR)	91,65	-2,453	-0,91	-2,31	
261	LwK 1.1 (FTIR)	94,27	0,170	0,06	0,16	
264	LwK 1.1 (3)	95,80	1,700	0,63	1,60	
267	LwK 1.1 (FTIR)	94,23	0,130	0,05	0,12	
268	LwK 1.1 (FTIR)	95,09	0,990	0,37	0,93	
270	LwK 1.1 (FTIR)	95,90	1,800	0,67	1,69	
275	LwK 1.1 (FTIR)	94,29	0,190	0,07	0,18	
276	LwK 1.1 (FTIR)	96,87	2,770	1,03	2,61	
277	LwK 1.1 (FTIR)	96,90	2,800	1,04	2,63	
283	LwK 1.1 (FTIR)	95,34	1,240	0,46	1,17	
294	LwK 1.1 (FTIR)	94,45	0,350	0,13	0,33	
295	LwK 1.1 (FTIR)	93,80	-0,300	-0,11	-0,28	
325	LwK 1.1 (FTIR)	95,69	1,590	0,59	1,50	

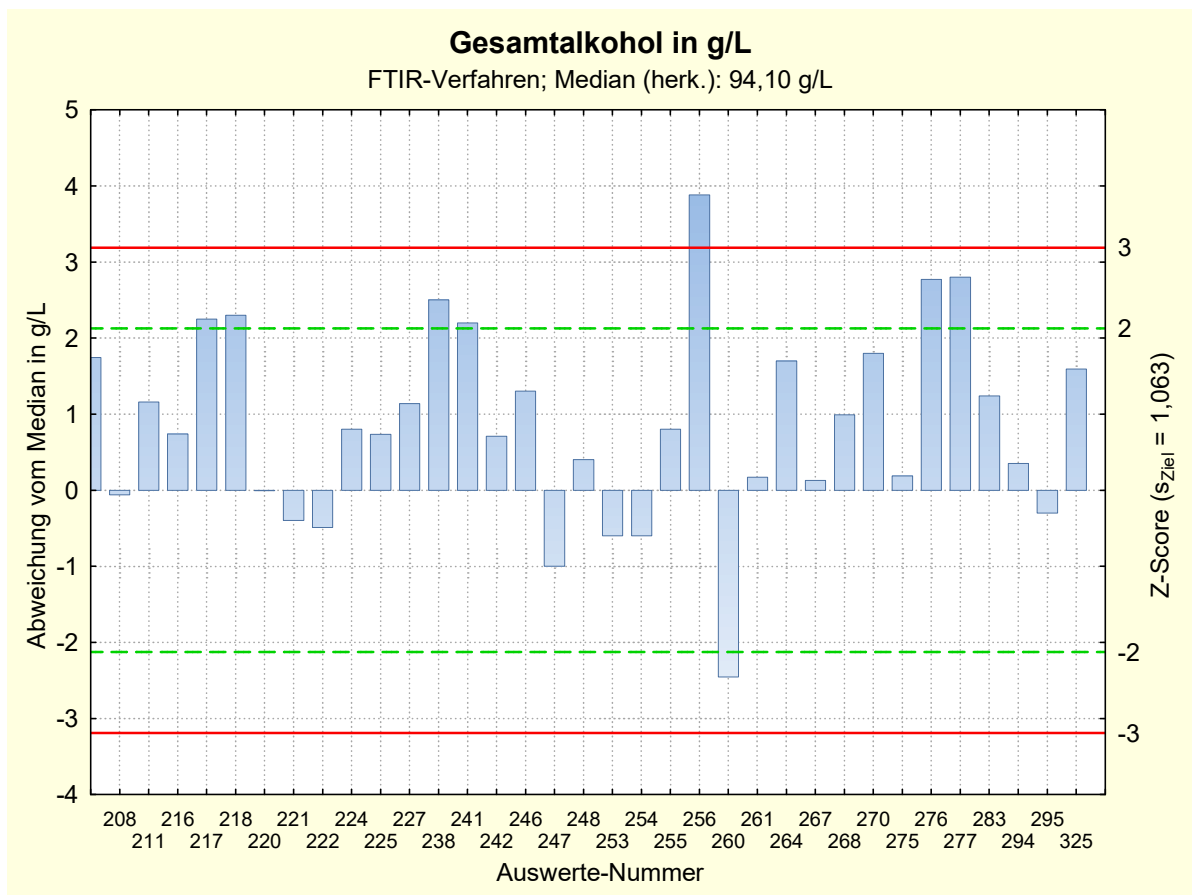
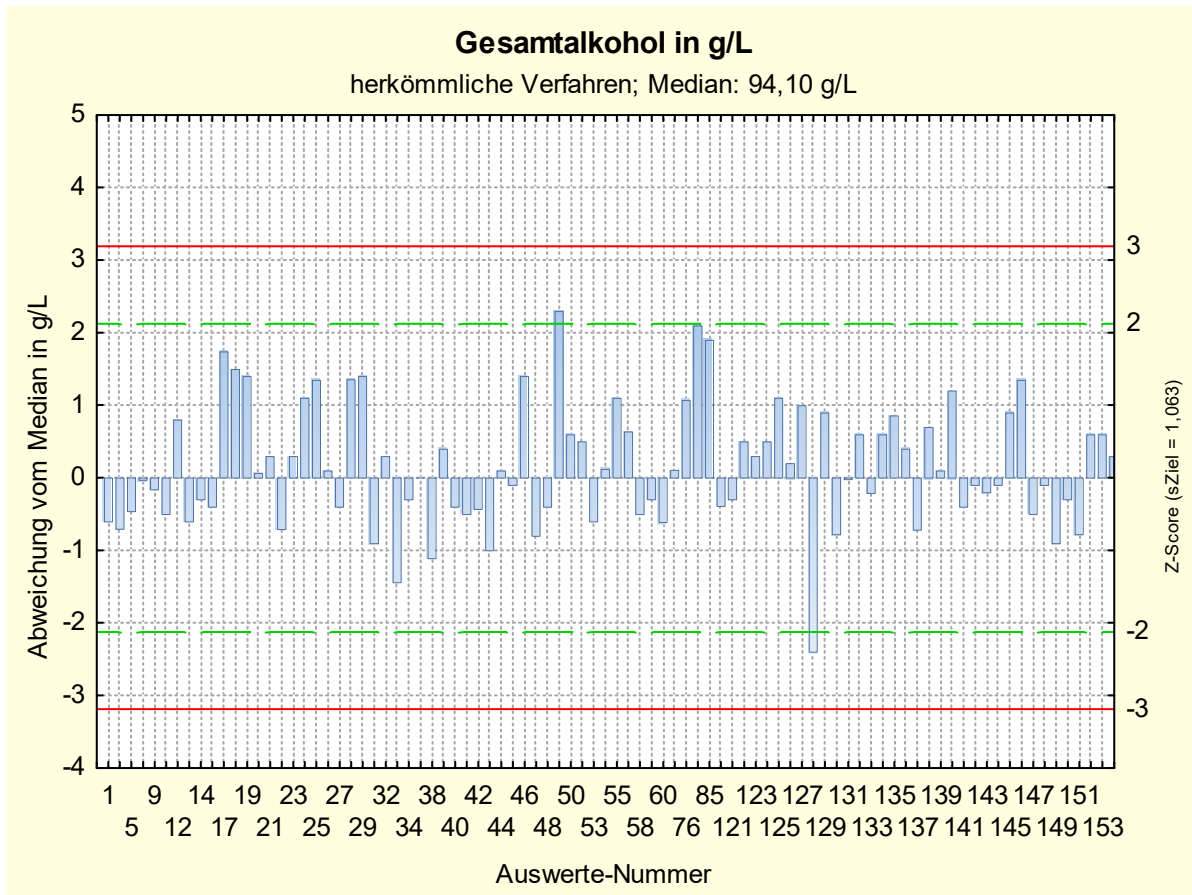
6.4.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtalkohol in g/L	alle Daten
Gültige Werte	83
Minimalwert	91,70
Mittelwert	94,214
Median	94,100
Maximalwert	96,20
Standardabweichung (s_L)	0,811
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,089
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,686
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,063
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$) ^{*)}	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,30
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,76
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$) ^{*)}	
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,08
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$) ^{*)}	

*) Die Bewertung der FTIR-Messergebnisse erfolgte mit der Zielstandardabweichung für herkömmliche Werte

6.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (1) (Zucker enz./HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose, enzymat. oder HPLC] * 0,47)+Vorh. Alkohol [g/L]	62	94,05	0,669
LwK 1.1 (2) (Zucker reduktometrisch)	((Gesamtzucker [reduktometrisch] - 1) * 0,47) + Vorh. Alkohol [g/L]	21	94,70	1,029
	herkömmliche Verfahren	83	94,20	0,802
LwK 1.1 (FTIR) (FTIR-Alkohol +-Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR-Glucose + FTIR-Fructose]*0,47)+Vorh. Alkohol [FTIR] [g/L]	35	94,94	1,248
LwK 1.1 (3) (Alkohol + FTIR-Zucker)	Alkohol herkömmlich + (Gesamt- oder Summenzucker FTIR)*0,47 [g/L]	5	95,27	1,114



6.5 Vorhandener Alkohol [g/L]**6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 2.4	78,69	-0,810	-0,35	-1,51	
3	LwK 2.9	79,22	-0,280	-0,12	-0,52	
4	LwK 2.1	80,34	0,840	0,36	1,57	
5	LwK 2.4	79,29	-0,210	-0,09	-0,39	
6	LwK 2.9	79,08	-0,420	-0,18	-0,79	
8	LwK 2.4	80,17	0,670	0,29	1,25	
9	LwK 2.1	79,74	0,240	0,10	0,45	
10	LwK 2.4	80,15	0,650	0,28	1,21	
11	LwK 2.5	79,24	-0,260	-0,11	-0,49	
12	LwK 2.2	80,50	1,000	0,43	1,87	
13	LwK 2.4	79,20	-0,300	-0,13	-0,56	
14	LwK 2.9	79,85	0,350	0,15	0,65	
15	LwK 2.9	79,40	-0,100	-0,04	-0,19	
17	LwK 2.9	80,80	1,300	0,56	2,43	
18	LwK 2.1	81,00	1,500	0,64	2,80	
19	LwK 2.9	80,10	0,600	0,26	1,12	
20	LwK 2.9	79,89	0,390	0,17	0,73	
21	LwK 2.7	80,40	0,900	0,39	1,68	
22	LwK 2.9	79,20	-0,300	-0,13	-0,56	
23	LwK 2.5	80,00	0,500	0,21	0,93	
24	LwK 2.9	80,20	0,700	0,30	1,31	
25	LwK 2.9	79,72	0,220	0,09	0,41	
26	LwK 2.9	79,56	0,060	0,03	0,11	
27	LwK 2.9	80,00	0,500	0,21	0,93	
28	LwK 2.9	80,91	1,410	0,61	2,64	
29	LwK 2.4	80,50	1,000	0,43	1,87	
30	LwK 2.1	80,21	0,710	0,31	1,33	
31	LwK 2.4	79,11	-0,390	-0,17	-0,73	
32	LwK 2.9	79,80	0,300	0,13	0,56	
33	LwK 2.4	78,94	-0,560	-0,24	-1,05	
34	LwK 2.4	79,10	-0,400	-0,17	-0,75	
36	LwK 2.9	79,40	-0,100	-0,04	-0,19	
38	LwK 2.1	79,80	0,300	0,13	0,56	
39	LwK 2.9	80,00	0,500	0,21	0,93	
40	LwK 2.7	79,50	0,000	0,00	0,00	
41	LwK 2.4	79,25	-0,250	-0,11	-0,47	
42	LwK 2.9	79,34	-0,160	-0,07	-0,30	
43	LwK 2.4	79,20	-0,300	-0,13	-0,56	
44	LwK 2.9	80,40	0,900	0,39	1,68	
45	LwK 2.4	79,60	0,100	0,04	0,19	
46	LwK 2.5	80,50	1,000	0,43	1,87	
47	LwK 2.1	79,50	0,000	0,00	0,00	
48	LwK 2.5	79,10	-0,400	-0,17	-0,75	
49	LwK 2.4	81,50	2,000	0,86	3,74	
50	LwK 2.9	80,20	0,700	0,30	1,31	
52	LwK 2.9	80,11	0,610	0,26	1,14	
53	LwK 2.1	79,06	-0,440	-0,19	-0,82	
54	LwK 2.9	79,90	0,400	0,17	0,75	
55	LwK 2.9	80,40	0,900	0,39	1,68	
56	LwK 2.9	80,05	0,550	0,24	1,03	
57	LwK 2.1	79,10	-0,400	-0,17	-0,75	
58	LwK 2.9	79,40	-0,100	-0,04	-0,19	
59	LwK 2.9	79,30	-0,200	-0,09	-0,37	
60	LwK 2.4	79,34	-0,160	-0,07	-0,30	
61	LwK 2.9	79,50	0,000	0,00	0,00	
62	LwK 2.1	80,03	0,530	0,23	0,99	
64	LwK 2.9	80,15	0,650	0,28	1,21	
65	LwK 2.9	78,90	-0,600	-0,26	-1,12	
67	LwK 2.1	80,60	1,100	0,47	2,06	
72	LwK 2.4	78,77	-0,730	-0,31	-1,36	
73	LwK 2.9	80,80	1,300	0,56	2,43	
76	LwK 2.9	81,30	1,800	0,77	3,36	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
77	LwK 2.2	82,06	2,560	1,10	4,79	
80	LwK 2.9	80,85	1,350	0,58	2,52	
85	LwK 2.9	79,50	0,000	0,00	0,00	
87	LwK 2.9	79,84	0,340	0,15	0,64	
91	LwK 2.4	78,93	-0,570	-0,24	-1,07	
95	LwK 2.9	79,70	0,200	0,09	0,37	
111	NMR	80,50	1,000	0,43	1,87	
112	NMR	91,07	11,570	4,97	21,63	(**)
121	LwK 2.9	79,70	0,200	0,09	0,37	
122	LwK 2.9	80,20	0,700	0,30	1,31	
123	LwK 2.7	80,10	0,600	0,26	1,12	
124	LwK 2.9	80,00	0,500	0,21	0,93	
125	LwK 2.1	80,54	1,040	0,45	1,94	
126	LwK 2.7	80,00	0,500	0,21	0,93	
127	LwK 2.9	80,30	0,800	0,34	1,50	
128	LwK 2.5	78,40	-1,100	-0,47	-2,06	
129	LwK 2.9	80,40	0,900	0,39	1,68	
130	LwK 2.5	79,06	-0,440	-0,19	-0,82	
131	LwK 2.9	79,73	0,230	0,10	0,43	
132	LwK 2.9	79,60	0,100	0,04	0,19	
133	LwK 2.5	77,96	-1,540	-0,66	-2,88	
134	LwK 2.9	80,30	0,800	0,34	1,50	
135	LwK 2.5	79,70	0,200	0,09	0,37	
136	LwK 2.5	80,30	0,800	0,34	1,50	
137	LwK 2.5	78,67	-0,830	-0,36	-1,55	
138	LwK 2.9	80,50	1,000	0,43	1,87	
139	LwK 2.7	79,10	-0,400	-0,17	-0,75	
140	LwK 2.2	81,20	1,700	0,73	3,18	
141	LwK 2.4	79,30	-0,200	-0,09	-0,37	
142	LwK 2.9	79,90	0,400	0,17	0,75	
143	LwK 2.9	79,60	0,100	0,04	0,19	
144	LwK 2.5	80,10	0,600	0,26	1,12	
145	LwK 2.1	80,50	1,000	0,43	1,87	
146	LwK 2.4	81,40	1,900	0,82	3,55	
147	LwK 2.4	79,00	-0,500	-0,21	-0,93	
148	LwK 2.3	79,70	0,200	0,09	0,37	
149	LwK 2.5	78,00	-1,500	-0,64	-2,80	
150	LwK 2.9	79,80	0,300	0,13	0,56	
151	LwK 2.4	78,40	-1,100	-0,47	-2,06	
152	LwK 2.2	80,10	0,600	0,26	1,12	
153	LwK 2.8	81,00	1,500	0,64	2,80	
154	LwK 2.4	79,90	0,400	0,17	0,75	

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

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

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

6.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	79,52	0,020	0,01	0,02	
202	LwK 2.8	79,62	0,120	0,05	0,14	
203	LwK 2.8	81,58	2,080	0,89	2,35	
204	LwK 2.8	79,87	0,370	0,16	0,42	
205	LwK 2.8	79,96	0,460	0,20	0,52	
206	LwK 2.8	79,09	-0,410	-0,18	-0,46	
207	LwK 2.8	79,40	-0,100	-0,04	-0,11	
208	LwK 2.8	80,28	0,780	0,34	0,88	
210	LwK 2.8	80,45	0,950	0,41	1,07	
211	LwK 2.8	80,90	1,400	0,60	1,58	
212	LwK 2.8	80,90	1,400	0,60	1,58	
213	LwK 2.8	81,18	1,680	0,72	1,90	
215	LwK 2.8	83,60	4,100	1,76	4,63	
216	LwK 2.8	82,60	3,100	1,33	3,50	
217	LwK 2.8	82,40	2,900	1,25	3,27	
218	LwK 2.8	81,80	2,300	0,99	2,60	
219	LwK 2.8	80,20	0,700	0,30	0,79	
220	LwK 2.8	79,90	0,400	0,17	0,45	
221	LwK 2.8	80,50	1,000	0,43	1,13	
222	LwK 2.8	79,76	0,260	0,11	0,29	
223	LwK 2.8	81,70	2,200	0,95	2,48	
224	LwK 2.8	79,84	0,340	0,15	0,38	
225	LwK 2.8	81,11	1,610	0,69	1,82	
226	LwK 2.8	80,92	1,420	0,61	1,60	
227	LwK 2.8	80,60	1,100	0,47	1,24	
228	LwK 2.8	81,43	1,930	0,83	2,18	
229	LwK 2.8	79,50	0,000	0,00	0,00	
230	LwK 2.8	79,54	0,040	0,02	0,05	
232	LwK 2.8	81,10	1,600	0,69	1,81	
233	LwK 2.8	80,30	0,800	0,34	0,90	
235	LwK 2.8	79,80	0,300	0,13	0,34	
236	LwK 2.8	79,20	-0,300	-0,13	-0,34	
237	LwK 2.8	80,30	0,800	0,34	0,90	
238	LwK 2.8	82,50	3,000	1,29	3,39	
239	LwK 2.8	81,24	1,740	0,75	1,96	
241	LwK 2.8	82,30	2,800	1,20	3,16	
242	LwK 2.8	80,42	0,920	0,40	1,04	
243	LwK 2.8	80,60	1,100	0,47	1,24	
244	LwK 2.8	80,10	0,600	0,26	0,68	
245	LwK 2.8	81,96	2,460	1,06	2,78	
246	LwK 2.8	81,10	1,600	0,69	1,81	
247	LwK 2.8	79,80	0,300	0,13	0,34	
248	LwK 2.8	79,47	-0,030	-0,01	-0,03	
249	LwK 2.8	81,80	2,300	0,99	2,60	
251	LwK 2.8	81,70	2,200	0,95	2,48	
252	LwK 2.8	78,70	-0,800	-0,34	-0,90	
253	LwK 2.8	79,70	0,200	0,09	0,23	
254	LwK 2.8	79,30	-0,200	-0,09	-0,23	
255	LwK 2.8	81,20	1,700	0,73	1,92	
256	LwK 2.8	81,39	1,890	0,81	2,13	
257	LwK 2.8	81,40	1,900	0,82	2,14	
258	LwK 2.8	78,80	-0,700	-0,30	-0,79	
259	LwK 2.8	80,60	1,099	0,47	1,24	
260	LwK 2.8	77,54	-1,960	-0,84	-2,21	
261	LwK 2.8	79,40	-0,100	-0,04	-0,11	
262	LwK 2.8	82,84	3,340	1,43	3,77	
263	LwK 2.8	80,55	1,050	0,45	1,19	
264	LwK 2.8	82,20	2,700	1,16	3,05	
265	LwK 2.8	80,00	0,500	0,21	0,56	
266	LwK 2.8	80,90	1,400	0,60	1,58	
267	LwK 2.8	79,50	0,000	0,00	0,00	
268	LwK 2.8	80,54	1,040	0,45	1,17	
269	LwK 2.8	81,54	2,040	0,88	2,30	
270	LwK 2.8	81,60	2,100	0,90	2,37	
271	LwK 2.8	81,06	1,560	0,67	1,76	
273	LwK 2.8	81,20	1,700	0,73	1,92	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 2.8	79,61	0,110	0,05	0,12	
275	LwK 2.8	80,00	0,500	0,21	0,56	
276	LwK 2.8	82,50	3,000	1,29	3,39	
277	LwK 2.8	82,69	3,190	1,37	3,60	
278	LwK 2.8	81,00	1,500	0,64	1,69	
279	LwK 2.8	78,86	-0,640	-0,27	-0,72	
280	LwK 2.8	80,67	1,170	0,50	1,32	
281	LwK 2.8	81,51	2,010	0,86	2,27	
282	LwK 2.8	79,91	0,410	0,18	0,46	
283	LwK 2.8	81,00	1,500	0,64	1,69	
284	LwK 2.8	80,50	1,000	0,43	1,13	
286	LwK 2.8	80,45	0,950	0,41	1,07	
287	LwK 2.8	79,64	0,140	0,06	0,16	
288	LwK 2.8	80,06	0,560	0,24	0,63	
289	LwK 2.8	79,96	0,460	0,20	0,52	
290	LwK 2.8	79,88	0,380	0,16	0,43	
291	LwK 2.8	80,40	0,900	0,39	1,02	
292	LwK 2.8	79,46	-0,040	-0,02	-0,05	
293	LwK 2.8	78,86	-0,640	-0,27	-0,72	
294	LwK 2.8	81,60	2,100	0,90	2,37	
295	LwK 2.8	80,00	0,500	0,21	0,56	
312	LwK 2.8	80,90	1,400	0,60	1,58	
325	LwK 2.8	80,13	0,630	0,27	0,71	
330	LwK 2.8	80,86	1,360	0,58	1,53	

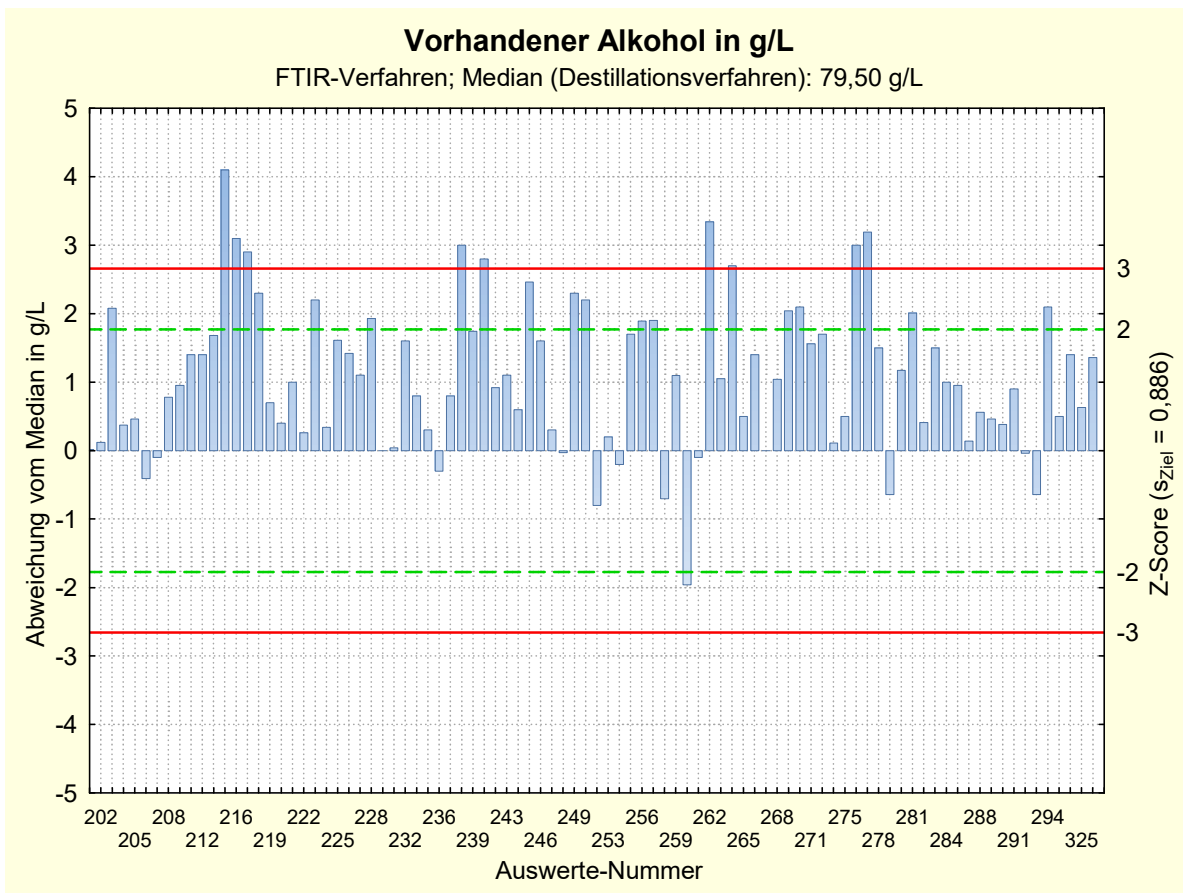
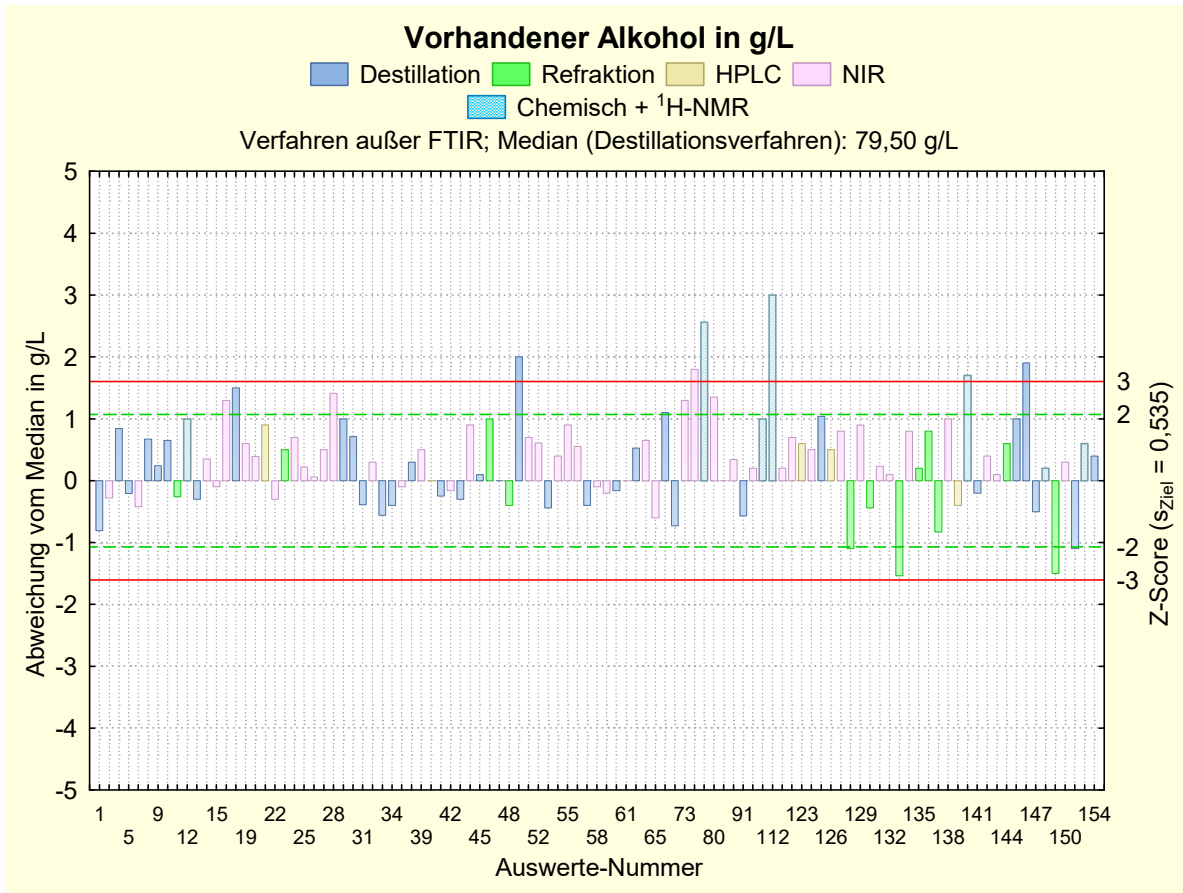
Die Messwerte in **roter** Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

6.5.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	33
Minimalwert	78,40
Mittelwert	79,702
Median	79,500
Maximalwert	81,50
Standardabweichung (s _L)	0,786
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,137
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,328
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,886
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,34
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,47
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,89
Quotient (u _M /s _H)	0,06
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,26
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,15

6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	12	80,05	0,667
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	21 33	79,41 79,66	0,686 0,796
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	4	80,97	0,975
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	79,70	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	12	79,25	0,997
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	79,82	0,582
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	91	80,56	1,072
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	46	79,91	0,515
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	2	85,79	8,48



6.6 Gesamtextrakt [g/L]

6.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
3	LwK 3.3 (herk.)	57,5	0,45	0,26	0,76	
5	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
8	LwK 3.1	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	
9	LwK 3.3 (herk.)	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	
10	LwK 3.1	57,3	0,30	0,17	0,51	
11	LwK 3.3 (herk.)	56,7	-0,26	-0,15	-0,44	
12	LwK 3.2	57,5	0,50	0,28	0,84	
13	LwK 3.3 (herk.)	56,5	-0,50	-0,28	-0,84	
14	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
15	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
17	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
18	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
19	LwK 3.3 (herk.)	57,0	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
21	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
22	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
23	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
24	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
25	LwK 3.3 (herk.)	56,0	-1,00	-0,57	-1,68	
26	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
27	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
28	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,40	0,23	0,67	
29	LwK 3.1	57,0	0,00	0,00	0,00	
30	LwK 3.2	57,0	0,00	0,00	0,00	
31	LwK 3.3 (herk.)	56,7	-0,29	-0,17	-0,49	
32	LwK 3.3 (herk.)	57,0	0,00	0,00	0,00	
33	LwK 3.3 (herk.)	56,5	-0,50	-0,28	-0,84	
34	LwK 3.3 (herk.)	56,2	-0,80	-0,46	-1,35	
36	herk./FTIR 2	56,3	-0,70	-0,40	-1,18	
38	LwK 3.2	57,2	0,20	0,11	0,34	
39	LwK 3.3 (herk.)	57,5	0,50	0,28	0,84	
40	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
41	LwK 3.3 (herk.)	56,5	-0,50	-0,28	-0,84	
42	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
43	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
44	LwK 3.2	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
45	LwK 3.3 (herk.)	57,0	0,00	0,00	0,00	
46	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,40	0,23	0,67	
47	LwK 3.2	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
48	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
49	LwK 3.3 (herk.)	58,1	1,10	0,63	1,85	
50	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
52	LwK 3.3 (herk.)	57,6	0,60	0,34	1,01	
53	LwK 3.2	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	
54	LwK 3.3 (herk.)	56,5	-0,50	-0,28	-0,84	
55	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
56	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
57	LwK 3.2	57,9	0,90	0,51	1,52	
58	LwK 3.3 (herk.)	56,3	-0,70	-0,40	-1,18	
59	LwK 3.3 (herk.)	57,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
62	LwK 3.2	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	
67	LwK 3.2	57,4	0,40	0,23	0,67	
73	LwK 3.3 (herk.)	59,0	2,00	1,14	3,37	
76	LwK 3.3 (herk.)	58,5	1,50	0,85	2,53	
77	LwK 3.3 (herk.)	59,0	2,00	1,14	3,37	
80	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,37	0,21	0,62	
85	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
87	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
95	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
121	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
122	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
123	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
124	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
125	LwK 3.2	57,5	0,50	0,28	0,84	
126	LwK 3.3 (herk.)	57,3	0,30	0,17	0,51	
127	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
128	LwK 3.3 (herk.)	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	
129	LwK 3.3 (herk.)	57,5	0,50	0,28	0,84	
130	LwK 3.3 (herk.)	56,4	-0,60	-0,34	-1,01	
131	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
132	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
133	LwK 3.3 (herk.)	56,4	-0,62	-0,35	-1,04	
134	LwK 3.3 (herk.)	57,0	0,00	0,00	0,00	
135	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
136	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,40	0,23	0,67	
137	LwK 3.3 (herk.)	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
138	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
139	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
140	LwK 3.3 (herk.)	56,4	-0,60	-0,34	-1,01	
141	LwK 3.3 (herk.)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	
142	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,40	0,23	0,67	
143	LwK 3.3 (herk.)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
144	LwK 3.3 (herk.)	56,2	-0,80	-0,46	-1,35	
145	LwK 3.2	57,5	0,50	0,28	0,84	
146	FTIR (gemessen)	56,5	-0,50	-0,28	-0,84	
147	LwK 3.3 (herk.)	57,1	0,10	0,06	0,17	
148	LwK 3.3 (herk.)	57,5	0,50	0,28	0,84	
149	LwK 3.3 (herk.)	57,6	0,60	0,34	1,01	
150	LwK 3.3 (herk.)	57,4	0,40	0,23	0,67	
151	LwK 3.3 (herk.)	56,4	-0,60	-0,34	-1,01	
152	LwK 3.3 (herk.)	57,2	0,20	0,11	0,34	
153	FTIR (gemessen)	57,0	0,00	0,00	0,00	
154	LwK 3.3 (herk.)	56,6	-0,40	-0,23	-0,67	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

6.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	herk./FTIR 2	55,6	-1,44	-0,82	-2,42	
202	FTIR (gemessen)	55,8	-1,20	-0,68	-2,02	
203	FTIR (gemessen)	57,4	0,35	0,20	0,59	
205	FTIR-Basis	56,9	-0,15	-0,09	-0,25	
208	FTIR (gemessen)	53,5	-3,50	-1,99	-5,89	(**)
210	FTIR (gemessen)	55,9	-1,12	-0,64	-1,89	
211	FTIR (gemessen)	56,1	-0,88	-0,50	-1,48	
216	FTIR (gemessen)	56,6	-0,42	-0,24	-0,71	
217	FTIR (gemessen)	56,3	-0,70	-0,40	-1,18	
218	FTIR (gemessen)	55,9	-1,10	-0,63	-1,85	
220	FTIR (gemessen)	53,5	-3,50	-1,99	-5,89	(**)
221	FTIR (gemessen)	55,7	-1,30	-0,74	-2,19	
222	FTIR (gemessen)	56,0	-1,00	-0,57	-1,69	
224	FTIR-Basis	57,1	0,10	0,06	0,17	
225	FTIR (gemessen)	56,8	-0,23	-0,13	-0,39	
227	FTIR-Basis	57,1	0,10	0,06	0,17	
228	FTIR (gemessen)	57,1	0,06	0,03	0,10	
233	herk./FTIR 2	56,3	-0,70	-0,40	-1,18	
236	FTIR (gemessen)	55,5	-1,50	-0,85	-2,53	
237	herk./FTIR 2	57,5	0,50	0,28	0,84	
238	FTIR (gemessen)	58,4	1,38	0,79	2,32	
239	FTIR (gemessen)	54,4	-2,60	-1,48	-4,38	
241	herk./FTIR 2	58,5	1,50	0,85	2,53	
242	FTIR-Basis	56,2	-0,80	-0,46	-1,35	
245	FTIR (gemessen)	56,3	-0,70	-0,40	-1,18	
246	FTIR-Basis	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
247	FTIR-Basis	57,2	0,20	0,11	0,34	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
248	FTIR-Basis	58,0	1,00	0,57	1,68	
252	herk./FTIR 2	57,1	0,10	0,06	0,17	
254	FTIR-Basis	56,4	-0,60	-0,34	-1,01	
255	herk./FTIR 1	57,4	0,40	0,23	0,67	
256	FTIR-Basis	55,3	-1,70	-0,97	-2,86	
258	FTIR (gemessen)	57,4	0,40	0,23	0,67	
261	FTIR (gemessen)	58,2	1,20	0,68	2,02	
262	FTIR (gemessen)	58,0	1,00	0,57	1,68	
264	FTIR-Basis	56,0	-1,00	-0,57	-1,68	
266	FTIR-Basis	55,6	-1,40	-0,80	-2,36	
267	FTIR (gemessen)	56,8	-0,25	-0,14	-0,42	
268	FTIR (gemessen)	55,4	-1,58	-0,90	-2,66	
269	FTIR (gemessen)	55,0	-1,97	-1,12	-3,32	
270	FTIR-Basis	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
271	FTIR (gemessen)	55,6	-1,44	-0,82	-2,42	
274	FTIR (gemessen)	50,5	-6,55	-3,73	-11,03	(**)
275	FTIR (gemessen)	57,4	0,40	0,23	0,67	
276	FTIR (gemessen)	57,4	0,40	0,23	0,67	
277	FTIR (gemessen)	57,0	0,00	0,00	0,00	
278	FTIR (gemessen)	56,9	-0,10	-0,06	-0,17	
279	FTIR-Basis	55,0	-2,00	-1,14	-3,37	
280	FTIR-Basis	55,6	-1,43	-0,82	-2,41	
281	FTIR (gemessen)	55,4	-1,59	-0,91	-2,68	
283	FTIR-Basis	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
286	FTIR (gemessen)	55,0	-2,00	-1,14	-3,37	
287	FTIR-Basis	55,4	-1,60	-0,91	-2,69	
288	FTIR-Basis	55,6	-1,40	-0,80	-2,36	
289	FTIR-Basis	55,8	-1,20	-0,68	-2,02	
290	FTIR-Basis	54,9	-2,10	-1,20	-3,54	
291	FTIR-Basis	55,9	-1,07	-0,61	-1,80	
292	FTIR-Basis	55,3	-1,70	-0,97	-2,86	
293	FTIR-Basis	54,1	-2,90	-1,65	-4,88	
294	FTIR (gemessen)	56,7	-0,30	-0,17	-0,51	
295	FTIR (gemessen)	54,4	-2,60	-1,48	-4,38	
325	FTIR (gemessen)	56,8	-0,20	-0,11	-0,34	

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

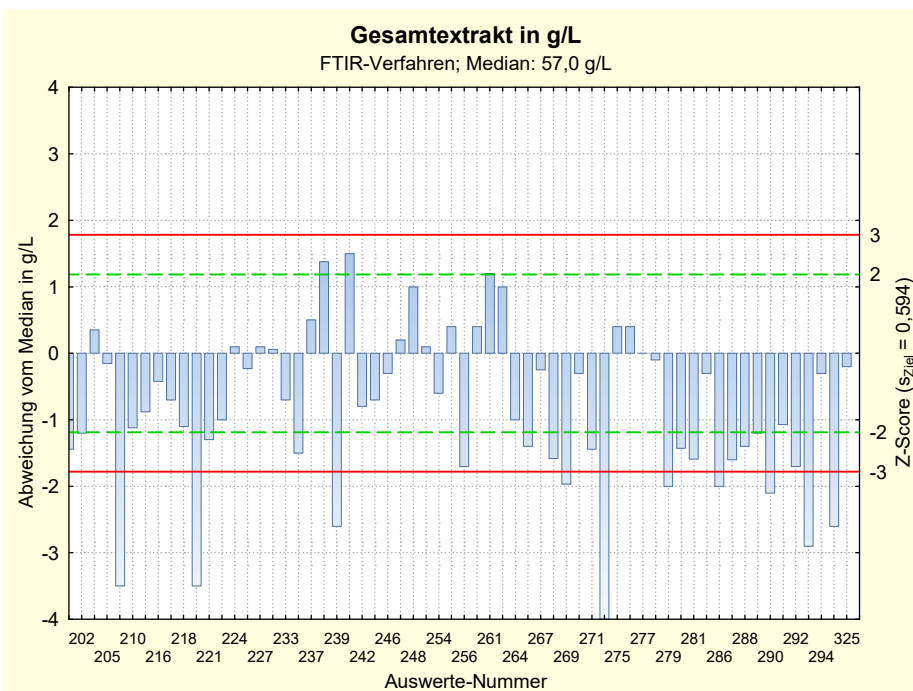
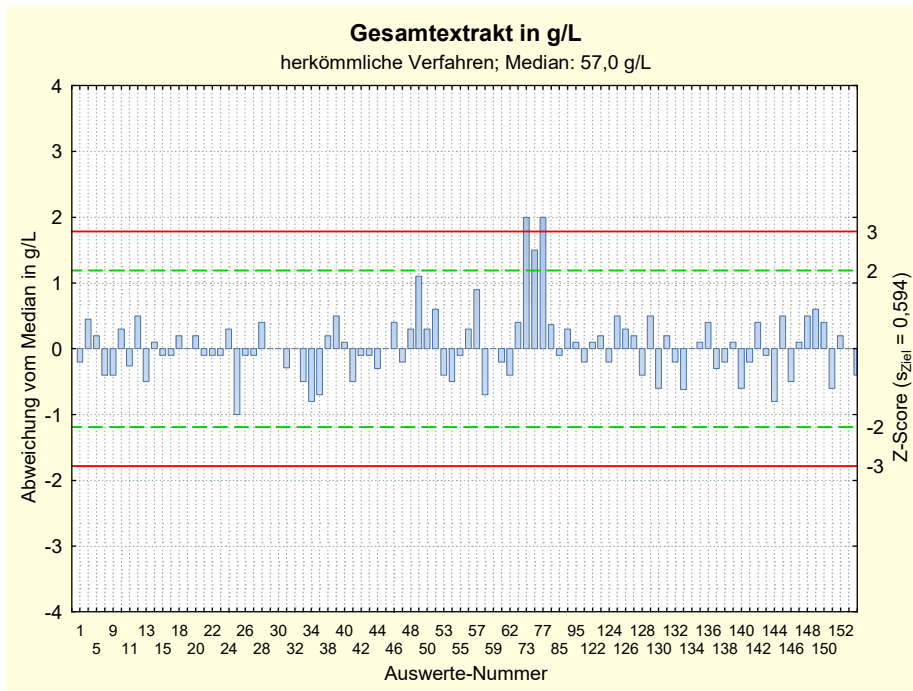
6.6.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	92
Minimalwert	56,0
Mittelwert	57,06
Median	57,00
Maximalwert	59,0
Standardabweichung (s_L)	0,508
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,053
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,755
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U\ FTIR}$)	(0,565) *)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,29
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,86
Quotient ($s_L/s_{U\ FTIR}$)	(0,90)
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,09
Quotient ($u_M/s_{U\ FTIR}$)	(0,09)

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

6.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	56,967	0,398
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n.LwK 2.1	11	57,154	0,499
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	78	57,005	0,411
	herkömmliche Verfahren	92	57,020	0,415
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (aus Spektrum)	36	56,209	1,244
herk./FTIR 1	Berechnung nach Tabarie auf der Basis: densitometr. Dichte und FTIR-Alkohol	1	57,400	
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis: FTIR-Dichte und FTIR-Alkohol	22	56,068	0,932
herk./FTIR 2	Berechnung nach Tabarie auf der Basis: FTIR-Dichte, Alkohol nach herk. Methode	6	56,851	1,134



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 3.3 (herk.)	25,0	-1,40	-1,53	-1,34	
3	LwK 3.3 (herk.)	27,3	0,89	0,98	0,85	
5	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
8	LwK 3.1	26,7	0,30	0,33	0,29	
9	LwK 3.3 (herk.)	26,9	0,50	0,55	0,48	
10	LwK 3.1	26,9	0,53	0,58	0,51	
11	herk./FTIR 1	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
12	LwK 3.2	26,9	0,50	0,55	0,48	
13	LwK 3.3 (herk.)	26,0	-0,40	-0,44	-0,38	
14	LwK 3.2	26,5	0,10	0,11	0,10	
15	LwK 3.3 (herk.)	26,5	0,10	0,11	0,10	
17	LwK 3.3 (herk.)	26,6	0,20	0,22	0,19	
18	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
19	LwK 3.3 (herk.)	24,4	-2,00	-2,19	-1,91	
20	LwK 3.3 (herk.)	26,8	0,40	0,44	0,38	
21	LwK 3.3 (herk.)	27,2	0,80	0,88	0,76	
22	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
23	LwK 3.3 (herk.)	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
24	LwK 3.3 (herk.)	25,3	-1,10	-1,21	-1,05	
25	LwK 3.3 (herk.)	23,5	-2,90	-3,18	-2,77	
26	LwK 3.3 (herk.)	25,8	-0,60	-0,66	-0,57	
27	LwK 3.3 (herk.)	27,7	1,30	1,42	1,24	
28	LwK 3.3 (herk.)	26,5	0,05	0,05	0,05	
29	LwK 3.1	25,0	-1,40	-1,53	-1,34	
30	LwK 3.2	26,6	0,20	0,22	0,19	
31	LwK 3.3 (herk.)	26,8	0,40	0,44	0,38	
32	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
33	LwK 3.3 (herk.)	27,3	0,90	0,99	0,86	
34	LwK 3.3 (herk.)	24,8	-1,60	-1,75	-1,53	
36	herk./FTIR 2	24,9	-1,50	-1,64	-1,43	
38	LwK 3.2	29,1	2,70	2,96	2,58	
39	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
40	LwK 3.3 (herk.)	26,9	0,50	0,55	0,48	
41	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
42	LwK 3.3 (herk.)	26,4	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 3.3 (herk.)	26,6	0,20	0,22	0,19	
44	LwK 3.2	27,4	1,00	1,10	0,95	
45	LwK 3.3 (herk.)	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
46	LwK 3.3 (herk.)	24,8	-1,60	-1,75	-1,53	
47	LwK 3.2	27,5	1,10	1,21	1,05	
48	LwK 3.3 (herk.)	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
49	LwK 3.3 (herk.)	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
50	LwK 3.3 (herk.)	26,5	0,10	0,11	0,10	
52	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
53	LwK 3.3 (herk.)	25,9	-0,50	-0,55	-0,48	
54	LwK 3.3 (herk.)	26,0	-0,40	-0,44	-0,38	
55	LwK 3.3 (herk.)	25,4	-1,00	-1,10	-0,95	
56	LwK 3.3 (herk.)	25,4	-1,00	-1,10	-0,95	
57	LwK 3.2	27,5	1,10	1,21	1,05	
58	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
59	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
61	LwK 3.3 (herk.)	25,5	-0,90	-0,99	-0,86	
62	LwK 3.2	25,6	-0,80	-0,88	-0,76	
67	LwK 3.2	26,8	0,40	0,44	0,38	
76	LwK 3.3 (herk.)	28,7	2,27	2,49	2,17	
77	LwK 3.3 (herk.)	28,7	2,30	2,52	2,19	
85	LwK 3.3 (herk.)	21,7	-4,70	-5,15	-4,48	
95	LwK 3.3 (herk.)	27,3	0,90	0,99	0,86	
121	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
122	LwK 3.3 (herk.)	26,5	0,10	0,11	0,10	
123	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
124	LwK 3.3 (herk.)	25,7	-0,70	-0,77	-0,67	
125	LwK 3.2	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
126	LwK 3.3 (herk.)	26,9	0,50	0,55	0,48	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
127	LwK 3.3 (herk.)	25,8	-0,60	-0,66	-0,57	
128	LwK 3.3 (herk.)	28,4	2,00	2,19	1,91	
129	LwK 3.3 (herk.)	26,4	0,00	0,00	0,00	
130	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
131	LwK 3.3 (herk.)	26,7	0,30	0,33	0,29	
132	LwK 3.3 (herk.)	24,7	-1,70	-1,86	-1,62	
133	LwK 3.3 (herk.)	22,5	-3,92	-4,30	-3,74	
134	LwK 3.3 (herk.)	26,4	0,00	0,00	0,00	
135	LwK 3.3 (herk.)	24,8	-1,60	-1,75	-1,53	
136	LwK 3.3 (herk.)	27,2	0,80	0,88	0,76	
137	LwK 3.3 (herk.)	25,4	-1,00	-1,10	-0,95	
138	LwK 3.3 (herk.)	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
139	LwK 3.3 (herk.)	26,9	0,50	0,55	0,48	
140	LwK 3.3 (herk.)	25,3	-1,10	-1,21	-1,05	
141	LwK 3.3 (herk.)	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
142	LwK 3.3 (herk.)	27,3	0,90	0,99	0,86	
143	LwK 3.3 (herk.)	26,4	0,00	0,00	0,00	
144	LwK 3.3 (herk.)	26,6	0,20	0,22	0,19	
145	LwK 3.2	26,6	0,20	0,22	0,19	
146	FTIR Basis 1	27,3	0,90	0,99	0,86	
147	LwK 3.3 (herk.)	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
148	LwK 3.3 (herk.)	27,1	0,70	0,77	0,67	
149	LwK 3.3 (herk.)	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
150	LwK 3.3 (herk.)	27,5	1,10	1,21	1,05	
151	LwK 3.3 (herk.)	24,6	-1,76	-1,93	-1,68	
152	LwK 3.3 (herk.)	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
153	FTIR Basis 1	27,6	1,20	1,32	1,14	
154	LwK 3.3 (herk.)	25,8	-0,60	-0,66	-0,57	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
203	FTIR-Basis 1	27,0	0,60	0,66	0,57	
205	FTIR Basis 1	26,2	-0,23	-0,25	-0,22	
208	FTIR Basis 1	23,9	-2,50	-2,74	-2,39	
210	FTIR (gemessen)	26,1	-0,27	-0,30	-0,26	
211	FTIR Basis 1	25,6	-0,83	-0,91	-0,79	
216	FTIR (gemessen)	28,2	1,81	1,98	1,73	
217	FTIR Basis 1	26,6	0,20	0,22	0,19	
218	FTIR-Basis 2	26,3	-0,10	-0,11	-0,10	
220	FTIR Basis 1	23,3	-3,10	-3,40	-2,96	
221	FTIR Basis 1	27,7	1,30	1,42	1,24	
222	FTIR-Basis 2	26,5	0,10	0,11	0,10	
224	FTIR-Basis 2	25,7	-0,71	-0,78	-0,68	
225	FTIR Basis 1	28,6	2,20	2,41	2,10	
227	FTIR-Basis 2	25,5	-0,90	-0,99	-0,86	
238	herk./FTIR 1	25,9	-0,50	-0,55	-0,48	
241	herk./FTIR 2	28,8	2,40	2,63	2,29	
242	FTIR-Basis 1	25,6	-0,80	-0,88	-0,76	
245	FTIR (gemessen)	24,8	-1,60	-1,75	-1,53	
246	FTIR Basis 1	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
247	FTIR-Basis 2	27,9	1,50	1,64	1,43	
248	FTIR-Basis 2	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
254	FTIR-Basis 2	26,1	-0,30	-0,33	-0,29	
255	herk./FTIR 1	28,2	1,80	1,97	1,72	
256	FTIR Basis 1	21,7	-4,70	-5,15	-4,48	
261	FTIR Basis 1	26,6	0,19	0,21	0,18	
264	FTIR Basis 1	24,0	-2,40	-2,63	-2,29	
267	FTIR Basis 1	25,5	-0,94	-1,03	-0,90	
268	FTIR (gemessen)	24,1	-2,27	-2,49	-2,17	
275	FTIR Basis 1	27,0	0,60	0,66	0,57	
276	FTIR Basis 1	26,5	0,10	0,11	0,10	
277	FTIR-Basis 2	28,4	2,00	2,19	1,91	
283	FTIR (gemessen)	26,2	-0,20	-0,22	-0,19	
294	FTIR (gemessen)	25,1	-1,30	-1,42	-1,24	
295	FTIR Basis 1	23,7	-2,70	-2,96	-2,58	
325	FTIR Basis 1	23,7	-2,70	-2,96	-2,58	

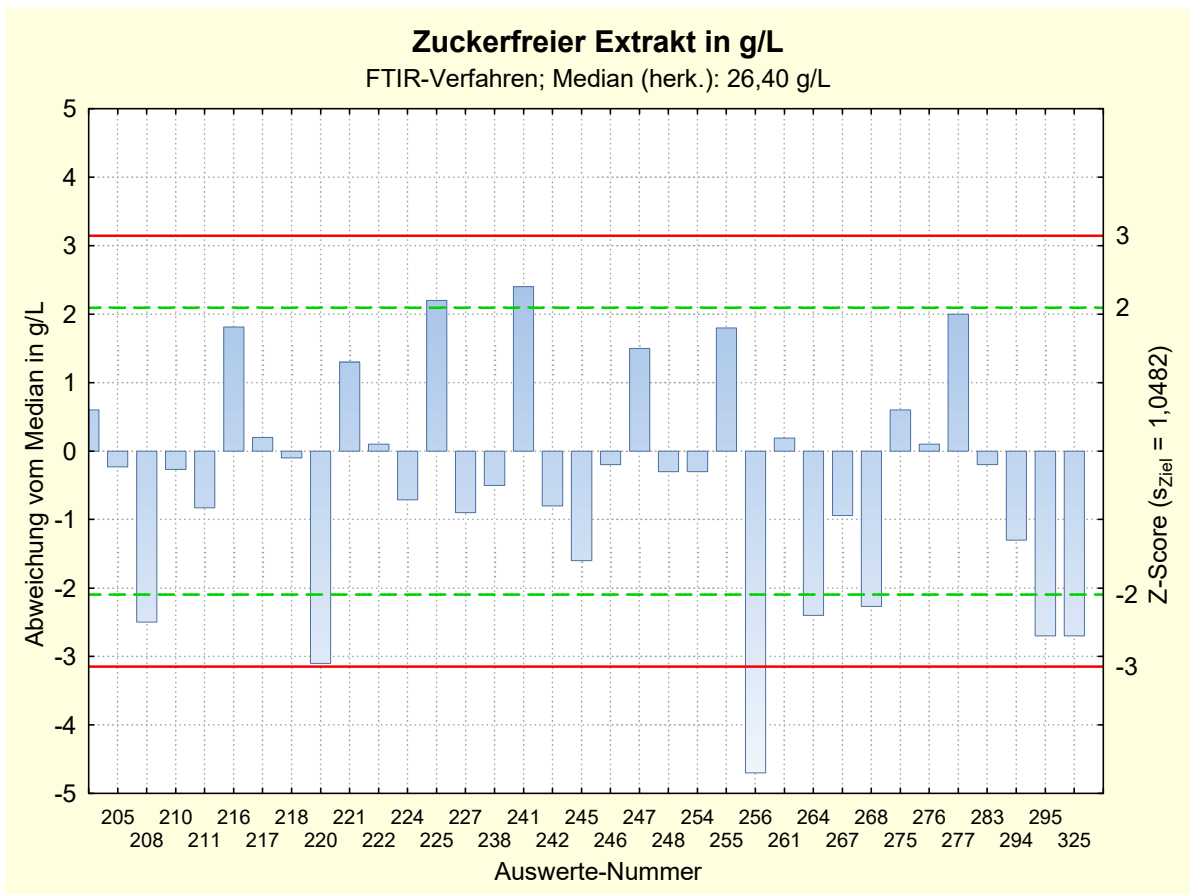
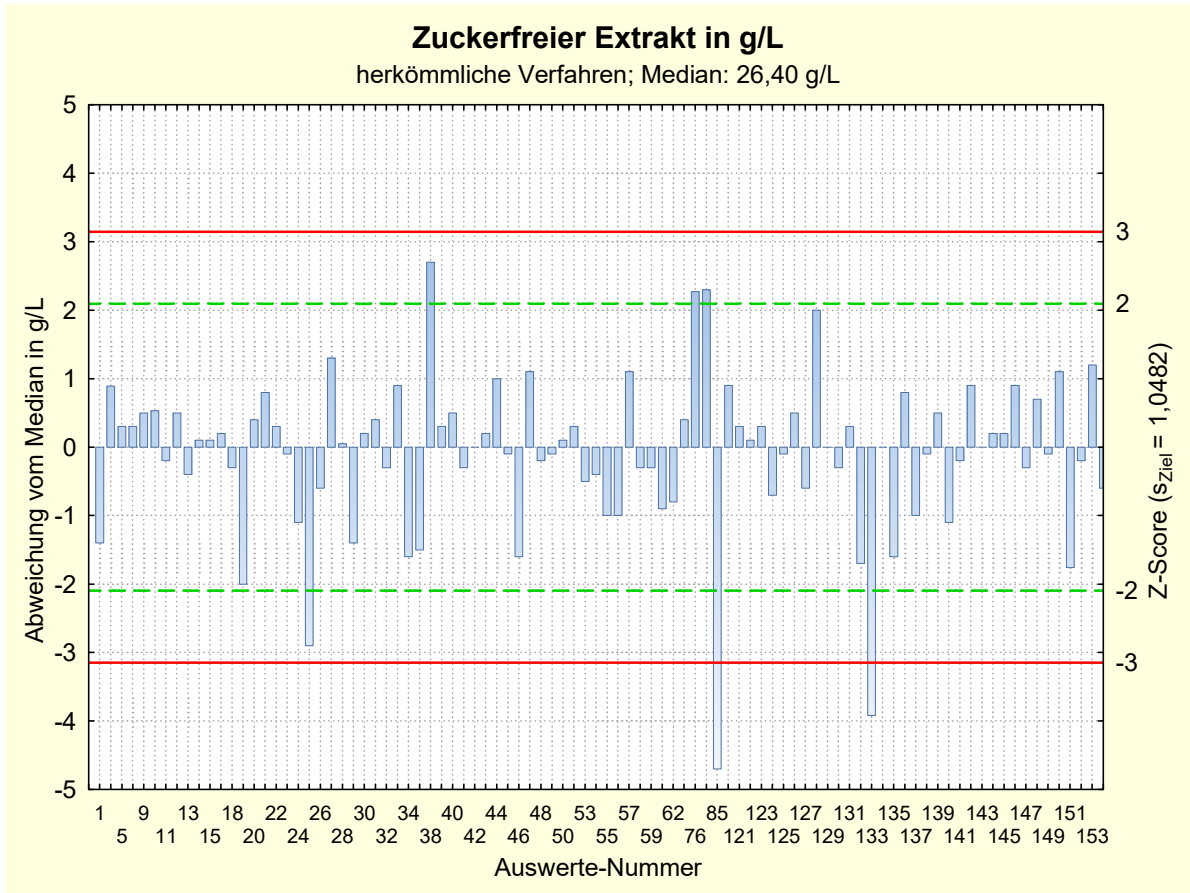
6.7.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Zuckerfreier Extrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	88
Minimalwert	21,7
Mittelwert	26,29
Median	26,40
Maximalwert	29,1
Standardabweichung (s_L)	1,136
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,121
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,912
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}^*)$)	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,24
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,08
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}^*)$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,13
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,12
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	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	26,307	1,007
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n. LwK 2.1	11	26,900	0,717
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	74	26,268	0,853
	herkömmliche Verfahren	88	26,353	0,851
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	25,759	1,625
herk./FTIR 1	Berechnung n. Tabarie auf der Basis: densitometr. Dichte; FTIR-Alkohol und FTIR-Zucker)	3	26,713	1,314
FTIR-Basis 1	FTIR gemessener Gesamtextrakt - FTIR-Zucker	20	25,828	1,769
FTIR-Basis 2	Berechnung nach Tabarie auf der Basis: FTIR-Dichte, FTIR-Alkohol und FTIR-Zucker	8	26,522	1,096
herk./FTIR 2	Berechnung n. Tabarie (Basis: FTIR-Dichte; Al- kohol u. Zucker n. den angegeb. herk. Metho- den)	2	26,850	3,127



6.8 Vergärbare Zucker [g/L]**6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Bewertungsbasis: Enzymatik und HPLC

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 4.5	31,83	1,330	1,29	1,53	
2	LwK 4.5	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
3	LwK 4.5	30,16	-0,340	-0,33	-0,39	
4	LwK 4.5	31,32	0,820	0,79	0,94	
5	LwK 4.5	30,52	0,020	0,02	0,02	
6	LwK 4.5	29,91	-0,590	-0,57	-0,68	
8	LwK 4.5	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
9	LwK 4.5	29,70	-0,800	-0,78	-0,92	
10	LwK 4.7	30,37	-0,130	-0,13	-0,15	
12	LwK 4.7	30,60	0,100	0,10	0,11	
13	LwK 4.5	30,56	0,060	0,06	0,07	
14	LwK 4.7	30,60	0,099	0,10	0,11	
15	LwK 4.5	30,35	-0,150	-0,15	-0,17	
17	LwK 4.4	32,00	1,500	1,45	1,72	
18	LwK 4.5	30,59	0,090	0,09	0,10	
19	LwK 4.4	32,45	1,950	1,89	2,24	
20	LwK 4.7	30,37	-0,130	-0,13	-0,15	
21	LwK 4.7	29,80	-0,700	-0,68	-0,80	
22	LwK 4.7	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
23	LwK 4.4	30,60	0,100	0,10	0,11	
24	LwK 4.4	32,00	1,500	1,45	1,72	
25	LwK 4.4	33,50	3,000	2,91	3,45	
26	LwK 4.5	31,08	0,580	0,56	0,67	
27	LwK 4.7	29,20	-1,300	-1,26	-1,49	
28	LwK 4.4	30,95	0,450	0,44	0,52	
29	LwK 4.3	32,00	1,500	1,45	1,72	
30	LwK 4.5	30,41	-0,094	-0,09	-0,11	
31	LwK 4.7	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
32	LwK 4.5	31,00	0,500	0,48	0,57	
33	LwK 4.4	29,20	-1,300	-1,26	-1,49	
34	LwK 4.5	31,32	0,820	0,79	0,94	
36	LwK 4.5	31,40	0,900	0,87	1,03	
38	LwK 4.5	28,06	-2,440	-2,37	-2,80	
39	LwK 4.5	30,81	0,310	0,30	0,36	
40	LwK 4.7	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
41	LwK 4.5	30,37	-0,131	-0,13	-0,15	
42	LwK 4.5	30,49	-0,010	-0,01	-0,01	
43	LwK 4.5	30,37	-0,133	-0,13	-0,15	
44	LwK 4.4	29,30	-1,200	-1,16	-1,38	
45	LwK 4.5	30,69	0,190	0,18	0,22	
46	LwK 4.5	32,60	2,100	2,04	2,41	
47	LwK 4.5	29,30	-1,200	-1,16	-1,38	
48	LwK 4.5	31,10	0,600	0,58	0,69	
49	LwK 4.4	31,80	1,300	1,26	1,49	
50	LwK 4.5	30,82	0,320	0,31	0,37	
52	LwK 4.5	30,80	0,300	0,29	0,34	
53	LwK 4.5	30,70	0,200	0,19	0,23	
54	LwK 4.5	30,50	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 4.4	31,50	1,000	0,97	1,15	
56	LwK 4.7	31,90	1,400	1,36	1,61	
57	LwK 4.4	30,40	-0,100	-0,10	-0,11	
58	LwK 4.5	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
59	LwK 4.7	30,90	0,402	0,39	0,46	
60	LwK 4.5	30,10	-0,403	-0,39	-0,46	
61	LwK 4.5	31,30	0,800	0,78	0,92	
62	LwK 4.5	31,00	0,500	0,48	0,57	
67	LwK 4.4	30,60	0,100	0,10	0,11	
72	LwK 4.4	26,70	-3,800	-3,68	-4,36	
76	LwK 4.5	29,83	-0,670	-0,65	-0,77	
77	LwK 4.3	31,34	0,840	0,81	0,96	
85	LwK 4.4	35,20	4,700	4,56	5,40	(**)
91	LwK 4.5	27,00	-3,500	-3,39	-4,02	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
95	LwK 4.7	29,81	-0,690	-0,67	-0,79	
112	NMR	30,07	-0,430	-0,42	-0,49	
113	NMR	29,55	-0,951	-0,92	-1,09	
114	NMR	27,17	-3,330	-3,23	-3,82	
121	LwK 4.5	30,10	-0,400	-0,39	-0,46	
122	LwK 4.7	30,60	0,100	0,10	0,11	
123	LwK 4.7	30,50	0,000	0,00	0,00	
124	LwK 4.5	31,10	0,600	0,58	0,69	
125	LwK 4.5	31,18	0,680	0,66	0,78	
126	LwK 4.7	30,40	-0,100	-0,10	-0,11	
127	LwK 4.5	31,40	0,900	0,87	1,03	
128	LwK 4.7	28,20	-2,300	-2,23	-2,64	
129	LwK 4.5	31,07	0,570	0,55	0,65	
130	LwK 4.5	30,35	-0,150	-0,15	-0,17	
131	LwK 4.5	30,54	0,040	0,04	0,05	
132	LwK 4.4	32,10	1,600	1,55	1,84	
133	LwK 4.4	33,90	3,400	3,30	3,91	
134	LwK 4.7	30,60	0,100	0,10	0,11	
135	LwK 4.4	32,38	1,880	1,82	2,16	
136	LwK 4.4	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
137	LwK 4.4	31,30	0,800	0,78	0,92	
138	LwK 4.5	30,10	-0,400	-0,39	-0,46	
139	LwK 4.7	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
140	LwK 4.5	31,07	0,570	0,55	0,65	
141	LwK 4.5	30,60	0,100	0,10	0,11	
142	LwK 4.5	30,10	-0,400	-0,39	-0,46	
143	LwK 4.5	30,46	-0,040	-0,04	-0,05	
144	LwK 4.4	29,60	-0,900	-0,87	-1,03	
145	LwK 4.7	30,82	0,320	0,31	0,37	
146	LwK 4.8	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
147	LwK 4.5	31,00	0,500	0,48	0,57	
148	LwK 4.4	30,50	0,000	0,00	0,00	
149	LwK 4.4	31,35	0,850	0,82	0,98	
150	LwK 4.5	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
151	LwK 4.5	31,76	1,260	1,22	1,45	
152	LwK 4.3	31,00	0,500	0,48	0,57	
153	LwK 4.8	29,40	-1,100	-1,07	-1,26	
154	LwK 4.4	30,80	0,300	0,29	0,34	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

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

6.8.2 FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Enzymatik und HPLC

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	30,61	0,110	0,11	0,13	
203	LwK 4.8	30,35	-0,150	-0,15	-0,17	
204	LwK 4.8	33,45	2,950	2,86	3,39	
205	LwK 4.8	30,68	0,180	0,17	0,21	
206	LwK 4.8	29,96	-0,540	-0,52	-0,62	
207	LwK 4.8	28,60	-1,900	-1,84	-2,18	
208	LwK 4.8	29,60	-0,900	-0,87	-1,03	
210	LwK 4.8	29,75	-0,750	-0,73	-0,86	
211	LwK 4.8	30,55	0,050	0,05	0,06	
213	LwK 4.8	30,43	-0,070	-0,07	-0,08	
215	LwK 4.8	28,19	-2,310	-2,24	-2,65	
216	LwK 4.8	28,37	-2,130	-2,06	-2,45	
217	LwK 4.8	29,69	-0,810	-0,79	-0,93	
218	LwK 4.8	30,50	0,000	0,00	0,00	
219	LwK 4.8	31,00	0,500	0,48	0,57	
220	LwK 4.8	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	LwK 4.8	28,00	-2,500	-2,42	-2,87	
222	LwK 4.8	29,47	-1,030	-1,00	-1,18	
223	LwK 4.8	30,60	0,100	0,10	0,11	
224	LwK 4.8	31,41	0,910	0,88	1,05	
225	LwK 4.8	29,20	-1,300	-1,26	-1,49	
226	LwK 4.8	30,04	-0,460	-0,45	-0,53	
227	LwK 4.8	31,60	1,100	1,07	1,26	
228	LwK 4.8	30,87	0,370	0,36	0,42	
229	LwK 4.8	31,09	0,590	0,57	0,68	
230	LwK 4.8	29,65	-0,850	-0,82	-0,98	
232	LwK 4.8	31,00	0,500	0,48	0,57	
233	LwK 4.8	29,21	-1,290	-1,25	-1,48	
235	LwK 4.8	32,70	2,200	2,13	2,53	
236	LwK 4.8	29,30	-1,200	-1,16	-1,38	
237	LwK 4.8	31,00	0,500	0,48	0,57	
238	LwK 4.8	32,51	2,010	1,95	2,31	
239	LwK 4.8	30,80	0,300	0,29	0,34	
241	LwK 4.8	29,70	-0,800	-0,78	-0,92	
242	LwK 4.8	30,61	0,110	0,11	0,13	
243	LwK 4.8	30,60	0,100	0,10	0,11	
244	LwK 4.8	30,50	0,000	0,00	0,00	
245	LwK 4.8	31,48	0,980	0,95	1,13	
246	LwK 4.8	30,50	0,000	0,00	0,00	
247	LwK 4.8	28,20	-2,300	-2,23	-2,64	
248	LwK 4.8	31,90	1,398	1,36	1,61	
249	LwK 4.8	30,40	-0,100	-0,10	-0,11	
251	LwK 4.8	29,30	-1,200	-1,16	-1,38	
252	LwK 4.8	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
253	LwK 4.8	30,10	-0,400	-0,39	-0,46	
254	LwK 4.8	30,30	-0,200	-0,19	-0,23	
255	LwK 4.8	29,15	-1,350	-1,31	-1,55	
256	LwK 4.8	33,60	3,100	3,01	3,56	
257	LwK 4.8	29,29	-1,210	-1,17	-1,39	
258	LwK 4.8	31,20	0,700	0,68	0,80	
259	LwK 4.8	30,20	-0,300	-0,29	-0,34	
260	LwK 4.8	30,11	-0,390	-0,38	-0,45	
261	LwK 4.8	31,61	1,110	1,08	1,27	
262	LwK 4.8	31,26	0,760	0,74	0,87	
263	LwK 4.8	30,25	-0,250	-0,24	-0,29	
264	LwK 4.8	30,10	-0,400	-0,39	-0,46	
265	LwK 4.8	30,40	-0,100	-0,10	-0,11	
266	LwK 4.8	29,64	-0,860	-0,83	-0,99	
267	LwK 4.8	31,34	0,840	0,81	0,96	
268	LwK 4.8	31,29	0,790	0,77	0,91	
269	LwK 4.8	30,02	-0,480	-0,47	-0,55	
270	LwK 4.8	30,80	0,300	0,29	0,34	
271	LwK 4.8	30,54	0,040	0,04	0,05	
273	LwK 4.8	31,33	0,830	0,80	0,95	
274	LwK 4.8	30,82	0,320	0,31	0,37	
275	LwK 4.8	30,40	-0,100	-0,10	-0,11	
276	LwK 4.8	30,90	0,400	0,39	0,46	
277	LwK 4.8	31,60	1,100	1,07	1,26	
278	LwK 4.8	33,20	2,700	2,62	3,10	
279	LwK 4.8	29,90	-0,600	-0,58	-0,69	
280	LwK 4.8	29,87	-0,630	-0,61	-0,72	
281	LwK 4.8	30,63	0,130	0,13	0,15	
282	LwK 4.8	29,32	-1,180	-1,14	-1,36	
283	LwK 4.8	30,50	0,000	0,00	0,00	
284	LwK 4.8	28,77	-1,733	-1,68	-1,99	
286	LwK 4.8	31,10	0,600	0,58	0,69	
287	LwK 4.8	31,03	0,530	0,51	0,61	
288	LwK 4.8	30,83	0,330	0,32	0,38	
289	LwK 4.8	30,73	0,230	0,22	0,26	
290	LwK 4.8	30,43	-0,070	-0,07	-0,08	
291	LwK 4.8	30,23	-0,270	-0,26	-0,31	
292	LwK 4.8	30,60	0,100	0,10	0,11	
293	LwK 4.8	27,70	-2,800	-2,71	-3,22	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
294	LwK 4.8	31,60	1,100	1,07	1,26	
295	LwK 4.8	30,70	0,200	0,19	0,23	
312	LwK 4.8	31,16	0,660	0,64	0,76	
325	LwK 4.8	33,10	2,600	2,52	2,99	
330	LwK 4.8	31,11	0,610	0,59	0,70	

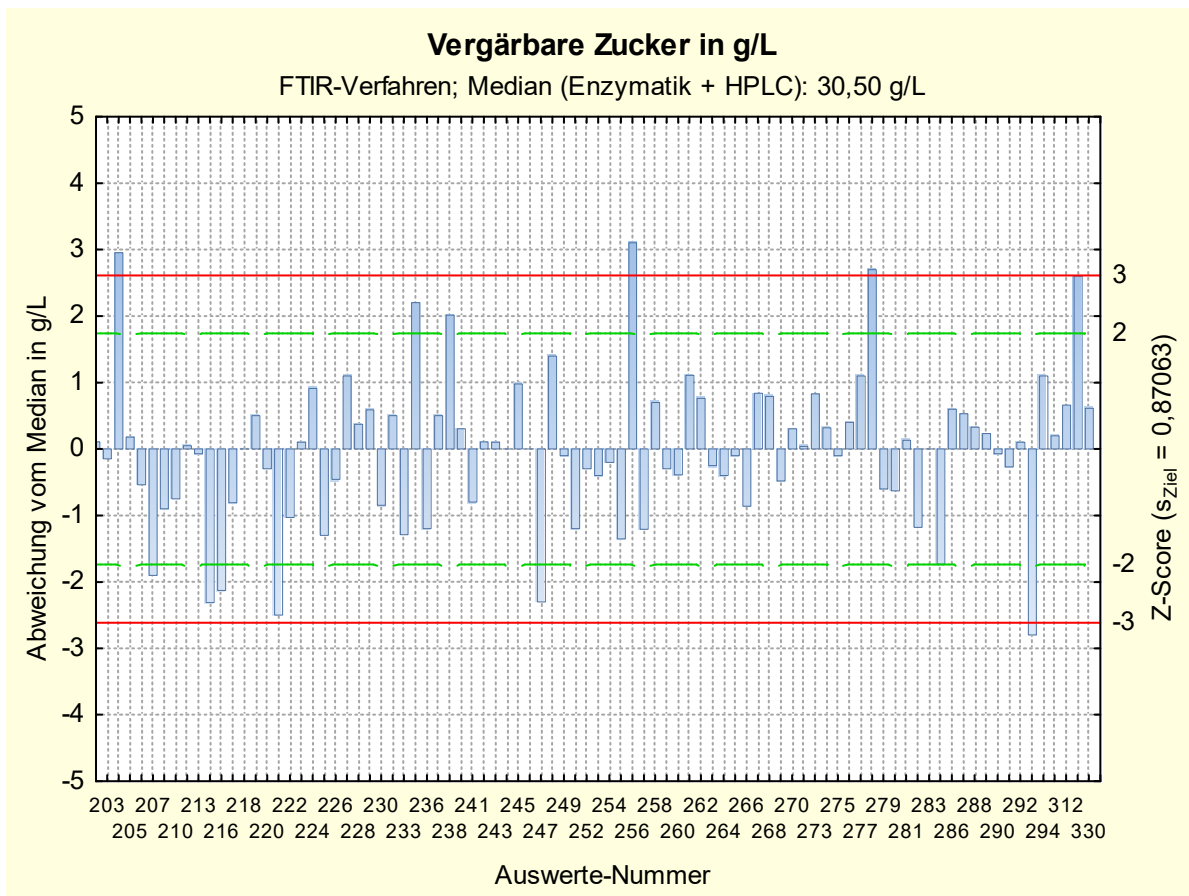
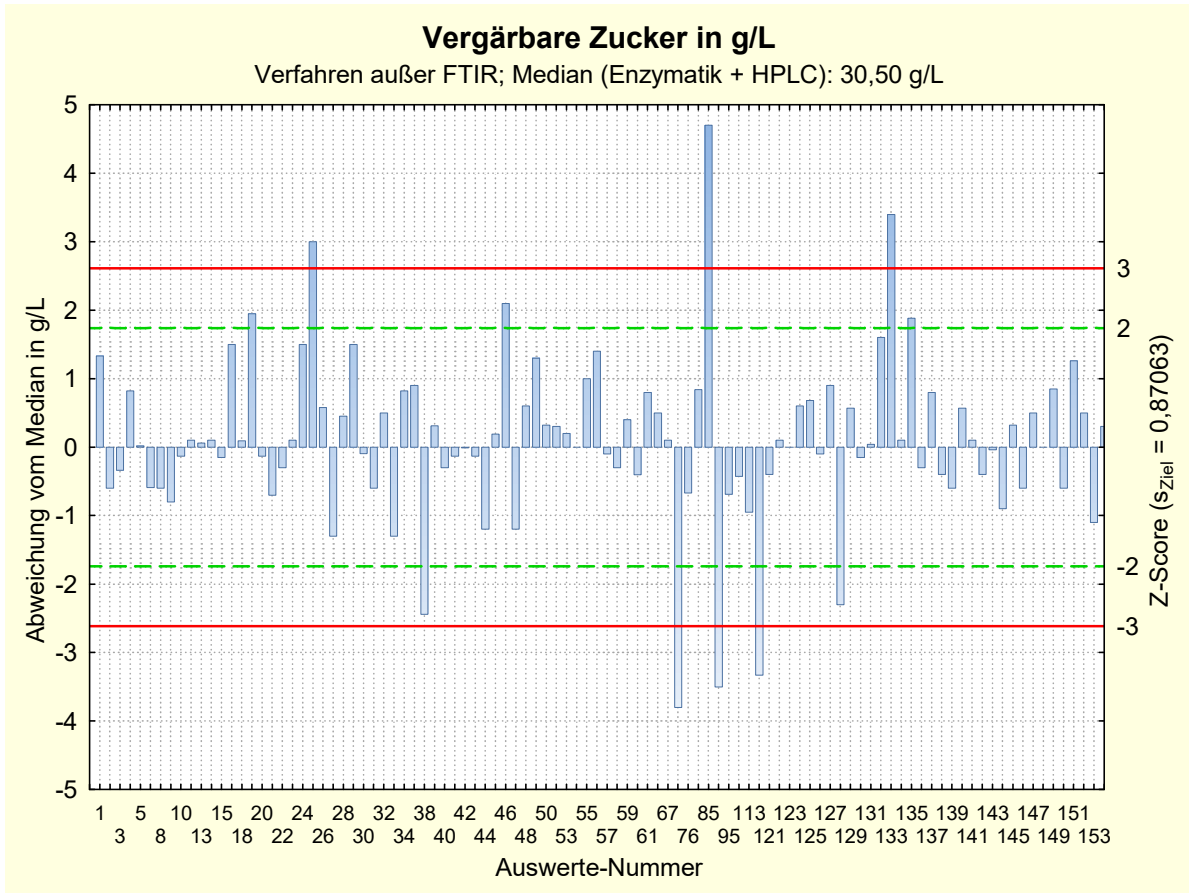
6.8.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	
nur HPLC + Enzymatik	alle Daten
Gültige Werte	69
Minimalwert	27,00
Mittelwert	30,458
Median	30,500
Maximalwert	32,60
Standardabweichung (s_L)	0,847
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,102
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,031
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,871
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U\ FTIR}$) ^{*)}	(0,584)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,82
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,97
Quotient ($s_L/s_{U\ FTIR}$)	(1,45)
Quotient (u_M/s_H)	0,10
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,12
Quotient ($u_M/s_{U\ FTIR}$)	(0,17)

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

6.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	3	31,447	0,577
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	23	31,251	1,498
	reduktometrische Verfahren	26		
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	50	30,595	0,637
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	19	30,308	0,491
	Enzymatik und HPLC	69	30,513	0,619
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	90	30,442	0,935
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	3	28,944	1,726



6.9 Glucose [g/L]**6.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enzymat. Hand	11,63	0,430	0,98	1,24	
2	enzymat. autom.	11,13	-0,070	-0,16	-0,20	
3	enzymat. autom.	11,01	-0,190	-0,43	-0,55	
4	enzymat. autom.	11,66	0,460	1,04	1,33	
5	enzymat. autom.	11,10	-0,100	-0,23	-0,29	
7	enzymat. Hand	11,35	0,150	0,34	0,43	
8	enzymat. Hand	11,10	-0,100	-0,23	-0,29	
9	enzymat. autom.	11,10	-0,100	-0,23	-0,29	
10	HPLC	11,26	0,060	0,14	0,17	
12	HPLC	11,40	0,200	0,45	0,58	
13	enzymat. autom.	11,25	0,050	0,11	0,14	
14	HPLC	11,25	0,049	0,11	0,14	
15	enzymat. autom.	11,02	-0,180	-0,41	-0,52	
18	enzymat. autom.	11,00	-0,200	-0,45	-0,58	
20	HPLC	11,23	0,030	0,07	0,09	
21	HPLC	10,98	-0,220	-0,50	-0,63	
22	HPLC	10,70	-0,500	-1,14	-1,44	
25	enzymat. Hand	11,50	0,300	0,68	0,86	
26	enzymat. autom.	11,54	0,340	0,77	0,98	
27	HPLC	11,00	-0,200	-0,45	-0,58	
30	enzymat. autom.	11,11	-0,087	-0,20	-0,25	
31	HPLC	11,02	-0,180	-0,41	-0,52	
32	enzymat. autom.	11,20	0,000	0,00	0,00	
36	enzymat. autom.	11,70	0,500	1,14	1,44	
38	enzymat. Hand	10,42	-0,780	-1,77	-2,25	
39	enzymat. autom.	11,11	-0,090	-0,20	-0,26	
40	HPLC	11,14	-0,060	-0,14	-0,17	
41	enzymat. autom.	11,05	-0,149	-0,34	-0,43	
42	enzymat. autom.	11,29	0,090	0,20	0,26	
43	enzymat. autom.	11,11	-0,093	-0,21	-0,27	
45	enzymat. autom.	11,13	-0,070	-0,16	-0,20	
47	enzymat. autom.	10,70	-0,500	-1,14	-1,44	
48	enzymat. autom.	11,05	-0,148	-0,34	-0,43	
50	enzymat. autom.	11,51	0,310	0,70	0,89	
53	enzymat. autom.	11,10	-0,100	-0,23	-0,29	
54	enzymat. autom.	11,40	0,200	0,45	0,58	
55	enzymat. autom.	11,20	0,000	0,00	0,00	
56	HPLC	12,00	0,800	1,82	2,31	
59	HPLC	11,39	0,189	0,43	0,54	
60	enzymat. autom.	11,17	-0,030	-0,07	-0,09	
61	enzymat. autom.	11,40	0,200	0,45	0,58	
62	enzymat. Hand	11,66	0,460	1,04	1,33	
76	enzymat. Hand	10,97	-0,230	-0,52	-0,66	
95	HPLC	10,97	-0,230	-0,52	-0,66	
101	HPLC	11,26	0,060	0,14	0,17	
111	NMR	11,86	0,660	1,50	1,90	
112	NMR	11,11	-0,090	-0,20	-0,26	
113	NMR	10,58	-0,622	-1,41	-1,79	
114	NMR	10,51	-0,690	-1,57	-1,99	
121	enzymat. autom.	11,07	-0,130	-0,30	-0,37	
122	HPLC	11,30	0,100	0,23	0,29	
126	HPLC	11,20	0,000	0,00	0,00	
127	enzymat. autom.	11,50	0,300	0,68	0,86	
128	HPLC	10,50	-0,700	-1,59	-2,02	
129	enzymat. autom.	11,53	0,330	0,75	0,95	
130	enzymat. autom.	11,19	-0,010	-0,02	-0,03	
131	enzymat. autom.	11,48	0,280	0,64	0,81	
134	HPLC	11,20	0,000	0,00	0,00	
139	HPLC	10,90	-0,300	-0,68	-0,86	
141	enzymat. autom.	11,50	0,300	0,68	0,86	
142	enzymat. autom.	10,70	-0,500	-1,14	-1,44	
143	enzymat. autom.	11,20	0,000	0,00	0,00	
145	HPLC	11,42	0,220	0,50	0,63	
146	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,29	
147	enzymat. autom.	11,30	0,100	0,23	0,29	
153	FTIR	12,40	1,200	2,72	3,46	

6.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	11,22	0,020	0,05	0,05	
202	FTIR	11,69	0,490	1,11	1,20	
203	FTIR	11,34	0,140	0,32	0,34	
204	FTIR	12,44	1,240	2,82	3,04	
205	FTIR	11,96	0,760	1,73	1,86	
207	FTIR	10,60	-0,600	-1,36	-1,47	
208	FTIR	11,00	-0,200	-0,45	-0,49	
210	FTIR	11,41	0,210	0,48	0,51	
211	FTIR	11,39	0,190	0,43	0,47	
212	FTIR	9,97	-1,230	-2,79	-3,01	
213	FTIR	11,78	0,580	1,32	1,42	
215	FTIR	10,39	-0,810	-1,84	-1,99	
216	FTIR	9,74	-1,460	-3,31	-3,58	
217	FTIR	11,20	0,000	0,00	0,00	
218	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
219	FTIR	12,90	1,700	3,86	4,17	
220	FTIR	13,30	2,100	4,77	5,15	(**)
221	FTIR	10,44	-0,760	-1,73	-1,86	
222	FTIR	10,69	-0,510	-1,16	-1,25	
223	FTIR	11,80	0,600	1,36	1,47	
224	FTIR	12,27	1,070	2,43	2,62	
225	FTIR	11,32	0,120	0,27	0,29	
226	FTIR	10,77	-0,430	-0,98	-1,05	
227	FTIR	12,00	0,800	1,82	1,96	
228	FTIR	11,74	0,540	1,23	1,32	
229	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
230	FTIR	10,86	-0,340	-0,77	-0,83	
232	FTIR	12,90	1,700	3,86	4,17	
233	FTIR	11,06	-0,140	-0,32	-0,34	
235	FTIR	12,60	1,400	3,18	3,43	
237	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
238	FTIR	12,53	1,330	3,02	3,26	
239	FTIR	11,40	0,200	0,45	0,49	
241	FTIR	12,49	1,290	2,93	3,16	
242	FTIR	11,55	0,350	0,79	0,86	
243	FTIR	11,59	0,390	0,89	0,96	
244	FTIR	12,10	0,900	2,04	2,21	
245	FTIR	11,91	0,710	1,61	1,74	
246	FTIR	11,95	0,750	1,70	1,84	
247	FTIR	10,91	-0,290	-0,66	-0,71	
248	FTIR	11,47	0,270	0,61	0,66	
249	FTIR	10,80	-0,400	-0,91	-0,98	
251	FTIR	10,80	-0,400	-0,91	-0,98	
252	FTIR	10,80	-0,400	-0,91	-0,98	
253	FTIR	9,60	-1,600	-3,63	-3,92	
254	FTIR	11,10	-0,100	-0,23	-0,25	
255	FTIR	10,80	-0,400	-0,91	-0,98	
256	FTIR	15,30	4,100	9,31	10,05	(**)
257	FTIR	10,77	-0,430	-0,98	-1,05	
258	FTIR	13,70	2,500	5,68	6,13	(**)
259	FTIR	11,60	0,400	0,91	0,98	
261	FTIR	12,59	1,390	3,16	3,41	
262	FTIR	12,62	1,420	3,22	3,48	
263	FTIR	11,95	0,750	1,70	1,84	
264	FTIR	11,00	-0,200	-0,45	-0,49	
265	FTIR	12,19	0,990	2,25	2,43	
266	FTIR	10,95	-0,250	-0,57	-0,61	
267	FTIR	12,57	1,370	3,11	3,36	
268	FTIR	9,96	-1,240	-2,82	-3,04	
269	FTIR	12,14	0,940	2,13	2,30	
270	FTIR	10,60	-0,600	-1,36	-1,47	
271	FTIR	11,32	0,120	0,27	0,29	
273	FTIR	10,53	-0,670	-1,52	-1,64	
274	FTIR	10,79	-0,410	-0,93	-1,00	
275	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
276	FTIR	12,00	0,800	1,82	1,96	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	10,50	-0,700	-1,59	-1,72	
279	FTIR	11,00	-0,200	-0,45	-0,49	
280	FTIR	10,97	-0,230	-0,52	-0,56	
281	FTIR	12,21	1,010	2,29	2,48	
282	FTIR	12,63	1,430	3,25	3,50	
283	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
284	FTIR	10,40	-0,800	-1,82	-1,96	
286	FTIR	11,50	0,300	0,68	0,74	
287	FTIR	11,53	0,330	0,75	0,81	
288	FTIR	11,27	0,070	0,16	0,17	
289	FTIR	11,37	0,170	0,39	0,42	
290	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
291	FTIR	11,13	-0,070	-0,16	-0,17	
292	FTIR	11,25	0,050	0,11	0,12	
293	FTIR	11,00	-0,200	-0,45	-0,49	
294	FTIR	11,30	0,100	0,23	0,25	
295	FTIR	11,40	0,200	0,45	0,49	
312	FTIR	11,05	-0,150	-0,34	-0,37	
325	FTIR	12,50	1,300	2,95	3,19	
330	FTIR	10,96	-0,240	-0,54	-0,59	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

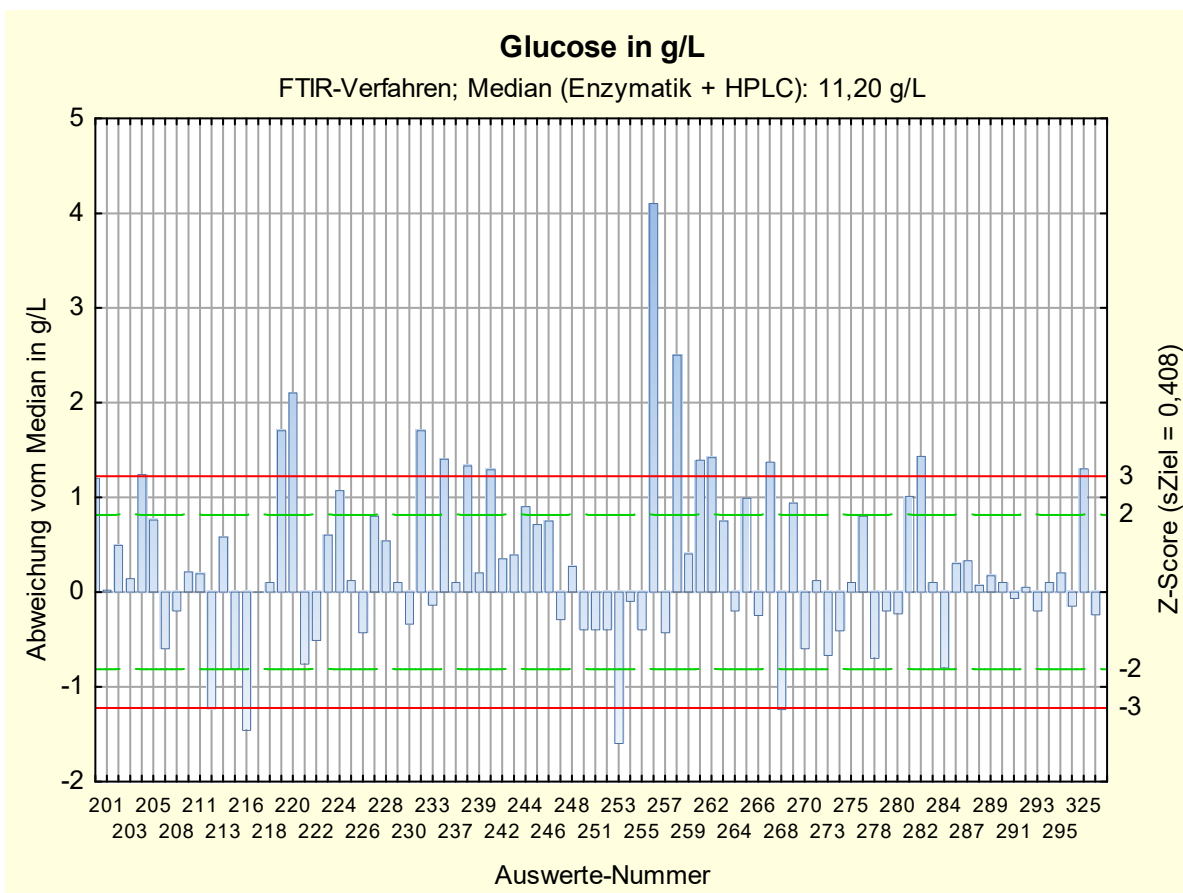
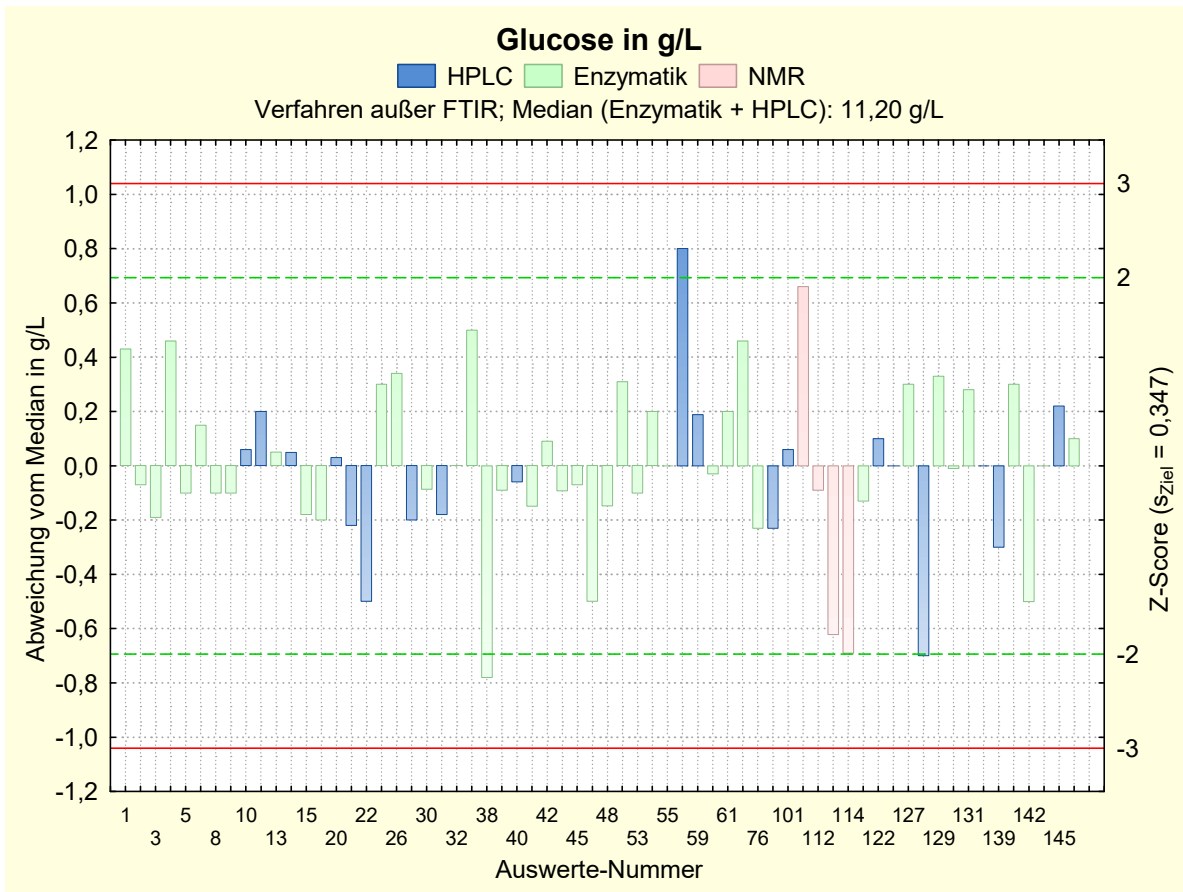
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.9.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	60
Minimalwert	10,42
Mittelwert	11,204
Median	11,200
Maximalwert	12,00
Standardabweichung (s_L)	0,287
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,037
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,440
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,347
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U\ FTIR}$)	0,408
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,65
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,83
Quotient ($s_L/s_{U\ FTIR}$)	0,70
Quotient (u_M/s_H)	0,08
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{U\ FTIR}$)	0,09

6.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	19	11,160	0,239
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	34	11,219	0,218
enzymat. Hand	enzymatisch manuell, OIV-MA-AS311-02	7	11,258	0,443
	herkömmliche Verfahren	60	11,212	0,253
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	11,445	0,785
NMR	1H -Kernresonanzspektroskopie	4	10,982	0,643



6.10 Fructose [g/L]**6.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enzymat. Hand	20,20	0,977	1,40	1,73	
2	enzymat. autom.	18,76	-0,463	-0,66	-0,82	
3	enzymat. autom.	19,15	-0,073	-0,10	-0,13	
4	enzymat. autom.	19,66	0,437	0,63	0,77	
5	enzymat. autom.	19,40	0,177	0,25	0,31	
7	enzymat. Hand	19,40	0,177	0,25	0,31	
8	enzymat. Hand	18,70	-0,523	-0,75	-0,93	
9	enzymat. autom.	18,60	-0,623	-0,89	-1,10	
10	HPLC	19,11	-0,113	-0,16	-0,20	
12	HPLC	19,20	-0,023	-0,03	-0,04	
13	enzymat. autom.	19,31	0,087	0,12	0,15	
14	HPLC	19,35	0,127	0,18	0,22	
15	enzymat. autom.	19,34	0,117	0,17	0,21	
18	enzymat. autom.	19,59	0,367	0,53	0,65	
20	HPLC	19,14	-0,083	-0,12	-0,15	
21	HPLC	18,82	-0,403	-0,58	-0,71	
22	HPLC	19,50	0,277	0,40	0,49	
25	enzymat. Hand	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
26	enzymat. autom.	19,54	0,317	0,45	0,56	
27	HPLC	18,30	-0,923	-1,32	-1,63	
30	enzymat. autom.	19,22	0,000	0,00	0,00	
31	HPLC	18,85	-0,373	-0,54	-0,66	
32	enzymat. autom.	19,76	0,537	0,77	0,95	
36	enzymat. autom.	19,60	0,377	0,54	0,67	
38	enzymat. Hand	17,64	-1,583	-2,27	-2,80	
39	enzymat. autom.	19,70	0,477	0,68	0,84	
40	HPLC	19,06	-0,163	-0,23	-0,29	
41	enzymat. autom.	19,32	0,095	0,14	0,17	
42	enzymat. autom.	19,20	-0,023	-0,03	-0,04	
43	enzymat. autom.	19,26	0,037	0,05	0,07	
45	enzymat. autom.	19,43	0,207	0,30	0,37	
47	enzymat. autom.	18,60	-0,623	-0,89	-1,10	
48	enzymat. autom.	19,21	-0,013	-0,02	-0,02	
50	enzymat. autom.	19,21	-0,013	-0,02	-0,02	
54	enzymat. autom.	19,14	-0,083	-0,12	-0,15	
55	enzymat. autom.	19,70	0,477	0,68	0,84	
56	HPLC	19,90	0,677	0,97	1,20	
59	HPLC	19,51	0,290	0,42	0,51	
60	enzymat. autom.	18,92	-0,303	-0,43	-0,54	
61	enzymat. autom.	19,90	0,677	0,97	1,20	
62	enzymat. Hand	19,34	0,117	0,17	0,21	
76	enzymat. Hand	18,86	-0,363	-0,52	-0,64	
95	HPLC	18,84	-0,383	-0,55	-0,68	
101	HPLC	19,03	-0,193	-0,28	-0,34	
111	NMR	20,42	1,197	1,72	2,12	
112	NMR	18,96	-0,263	-0,38	-0,47	
113	NMR	18,97	-0,253	-0,36	-0,45	
114	NMR	18,66	-0,563	-0,81	-1,00	
121	enzymat. autom.	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
122	HPLC	19,30	0,077	0,11	0,14	
126	HPLC	19,20	-0,023	-0,03	-0,04	
127	enzymat. autom.	19,90	0,677	0,97	1,20	
128	HPLC	17,70	-1,523	-2,19	-2,70	
129	enzymat. autom.	19,54	0,317	0,45	0,56	
130	enzymat. autom.	19,16	-0,063	-0,09	-0,11	
131	enzymat. autom.	19,06	-0,163	-0,23	-0,29	
134	HPLC	19,40	0,177	0,25	0,31	
139	HPLC	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
141	enzymat. autom.	19,10	-0,123	-0,18	-0,22	
142	enzymat. autom.	19,40	0,177	0,25	0,31	
143	enzymat. autom.	19,26	0,037	0,05	0,07	
145	HPLC	19,40	0,177	0,25	0,31	
146	FTIR	18,60	-0,623	-0,89	-1,10	
147	enzymat. autom.	19,70	0,477	0,68	0,84	
153	FTIR	17,50	-1,723	-2,47	-3,05	

6.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	19,38	0,157	0,23	0,28	
202	FTIR	18,92	-0,303	-0,43	-0,54	
203	FTIR	19,01	-0,213	-0,31	-0,38	
204	FTIR	21,01	1,787	2,56	3,17	
205	FTIR	18,72	-0,503	-0,72	-0,89	
207	FTIR	18,00	-1,223	-1,75	-2,17	
208	FTIR	18,60	-0,623	-0,89	-1,10	
210	FTIR	18,34	-0,883	-1,27	-1,56	
211	FTIR	19,16	-0,063	-0,09	-0,11	
212	FTIR	18,61	-0,613	-0,88	-1,09	
213	FTIR	18,81	-0,413	-0,59	-0,73	
215	FTIR	17,80	-1,423	-2,04	-2,52	
216	FTIR	16,31	-2,913	-4,18	-5,16	(**)
217	FTIR	18,49	-0,733	-1,05	-1,30	
218	FTIR	19,79	0,567	0,81	1,00	
219	FTIR	18,00	-1,223	-1,75	-2,17	
220	FTIR	16,90	-2,323	-3,33	-4,11	
221	FTIR	17,56	-1,663	-2,39	-2,95	
222	FTIR	18,78	-0,443	-0,64	-0,78	
223	FTIR	18,80	-0,423	-0,61	-0,75	
224	FTIR	19,17	-0,053	-0,08	-0,09	
225	FTIR	17,88	-1,343	-1,93	-2,38	
226	FTIR	19,27	0,047	0,07	0,08	
227	FTIR	19,15	-0,073	-0,10	-0,13	
228	FTIR	19,13	-0,093	-0,13	-0,16	
229	FTIR	17,79	-1,433	-2,06	-2,54	
230	FTIR	18,47	-0,753	-1,08	-1,33	
232	FTIR	20,10	0,877	1,26	1,55	
233	FTIR	18,15	-1,073	-1,54	-1,90	
235	FTIR	21,20	1,977	2,84	3,50	
237	FTIR	18,10	-1,123	-1,61	-1,99	
238	FTIR	17,46	-1,763	-2,53	-3,12	
239	FTIR	19,40	0,177	0,25	0,31	
241	FTIR	17,23	-1,993	-2,86	-3,53	
242	FTIR	19,06	-0,163	-0,23	-0,29	
243	FTIR	19,01	-0,213	-0,31	-0,38	
244	FTIR	19,20	-0,023	-0,03	-0,04	
245	FTIR	18,85	-0,373	-0,54	-0,66	
246	FTIR	18,50	-0,723	-1,04	-1,28	
247	FTIR	17,31	-1,913	-2,75	-3,39	
248	FTIR	19,29	0,067	0,10	0,12	
249	FTIR	18,40	-0,823	-1,18	-1,46	
251	FTIR	18,40	-0,823	-1,18	-1,46	
252	FTIR	19,40	0,177	0,25	0,31	
253	FTIR	18,30	-0,923	-1,32	-1,63	
254	FTIR	19,30	0,077	0,11	0,14	
255	FTIR	18,43	-0,793	-1,14	-1,40	
256	FTIR	20,00	0,777	1,11	1,38	
257	FTIR	17,52	-1,703	-2,44	-3,02	
258	FTIR	19,60	0,377	0,54	0,67	
259	FTIR	18,60	-0,623	-0,89	-1,10	
261	FTIR	19,02	-0,203	-0,29	-0,36	
262	FTIR	19,11	-0,113	-0,16	-0,20	
263	FTIR	18,30	-0,923	-1,32	-1,63	
264	FTIR	19,10	-0,123	-0,18	-0,22	
265	FTIR	18,71	-0,513	-0,74	-0,91	
266	FTIR	20,05	0,827	1,19	1,46	
267	FTIR	18,77	-0,453	-0,65	-0,80	
268	FTIR	19,98	0,757	1,09	1,34	
269	FTIR	19,28	0,057	0,08	0,10	
270	FTIR	20,25	1,027	1,47	1,82	
271	FTIR	19,55	0,327	0,47	0,58	
273	FTIR	19,27	0,047	0,07	0,08	
274	FTIR	19,02	-0,203	-0,29	-0,36	
275	FTIR	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
276	FTIR	18,90	-0,323	-0,46	-0,57	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	19,43	0,207	0,30	0,37	
279	FTIR	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
280	FTIR	18,90	-0,323	-0,46	-0,57	
281	FTIR	19,03	-0,193	-0,28	-0,34	
282	FTIR	19,90	0,677	0,97	1,20	
283	FTIR	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
284	FTIR	18,30	-0,923	-1,32	-1,63	
286	FTIR	19,60	0,377	0,54	0,67	
287	FTIR	19,50	0,277	0,40	0,49	
288	FTIR	19,57	0,347	0,50	0,61	
289	FTIR	19,37	0,147	0,21	0,26	
290	FTIR	19,13	-0,093	-0,13	-0,16	
291	FTIR	19,10	-0,123	-0,18	-0,22	
292	FTIR	19,33	0,107	0,15	0,19	
293	FTIR	17,70	-1,523	-2,19	-2,70	
294	FTIR	18,30	-0,923	-1,32	-1,63	
295	FTIR	19,30	0,077	0,11	0,14	
312	FTIR	19,09	-0,133	-0,19	-0,24	
325	FTIR	19,00	-0,223	-0,32	-0,39	
330	FTIR	18,49	-0,733	-1,05	-1,30	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

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

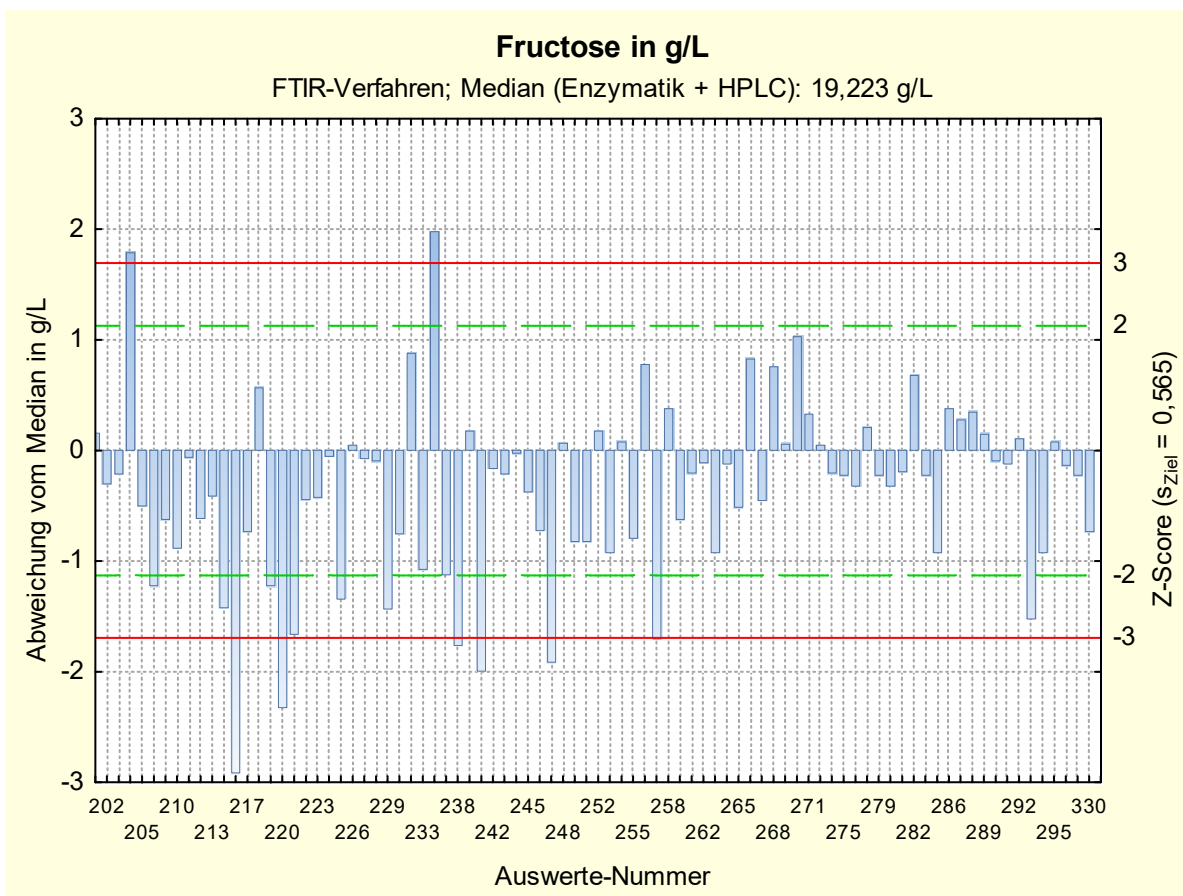
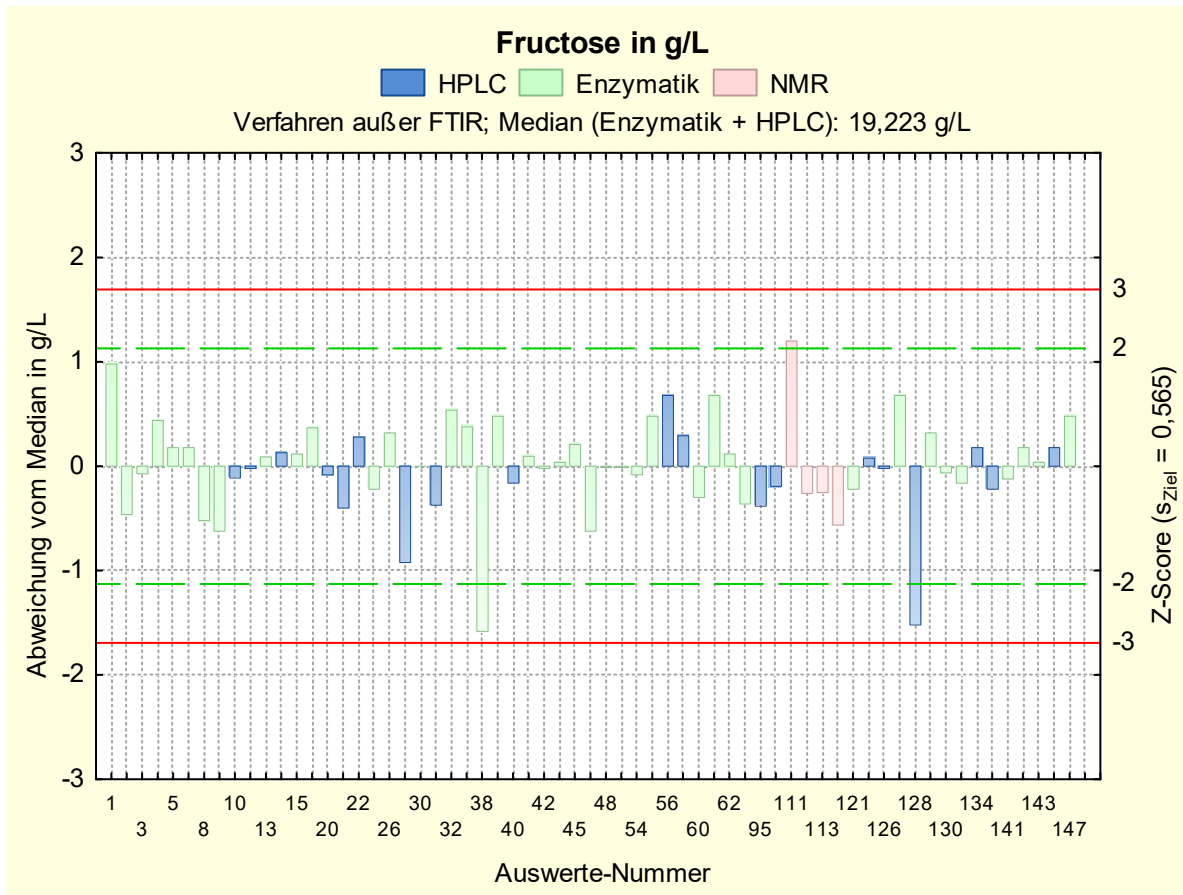
6.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	59
Minimalwert	17,64
Mittelwert	19,210
Median	19,223
Maximalwert	20,20
Standardabweichung (s_L)	0,460
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,060
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,697
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,565
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U\ FTIR}$) ^{*)}	(0,330)
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,66
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,82
Quotient ($s_L/s_{U\ FTIR}$)	(1,39)
Quotient (u_M/s_H)	0,09
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{U\ FTIR}$)	(0,18)

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

6.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	19	19,138	0,332
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	33	19,335	0,334
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell, OIV-MA-AS311-02	7	19,038	0,809
	alle herkömmlichen Verfahren	60	19,241	0,371
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	18,863	0,719
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	19,238	0,864



6.11 Glycerin [g/L]**6.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	enzymat. Hand	5,99	0,185	0,73	
2	enzymat. autom.	6,23	0,425	1,69	
3	enzymat. autom.	5,91	0,105	0,42	
4	enzymat. autom.	5,81	0,005	0,02	
5	enzymat. autom.	6,05	0,245	0,97	
6	enzymat. autom.	6,34	0,535	2,12	
7	enzymat. Hand	5,41	-0,395	-1,57	
9	enzymat. autom.	5,52	-0,285	-1,13	
10	HPLC	5,78	-0,025	-0,10	
20	HPLC	5,83	0,025	0,10	
21	HPLC	5,61	-0,195	-0,77	
22	HPLC	5,70	-0,105	-0,42	
27	HPLC	5,80	-0,005	-0,02	
31	HPLC	5,28	-0,525	-2,08	
40	HPLC	5,63	-0,175	-0,69	
54	enzymat. autom.	5,94	0,135	0,54	
55	enzymat. autom.	5,53	-0,275	-1,09	
56	enzymat. autom.	5,90	0,095	0,38	
59	HPLC	5,84	0,038	0,15	
62	enzymat. Hand	5,71	-0,095	-0,38	
95	HPLC	5,60	-0,205	-0,81	
101	HPLC	6,04	0,235	0,93	
112	NMR	5,92	0,115	0,46	
114	NMR	5,66	-0,145	-0,58	

6.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,95	0,145	0,58	0,42	
202	FTIR	5,97	0,165	0,65	0,47	
203	FTIR	5,66	-0,145	-0,58	-0,42	
205	FTIR	5,52	-0,285	-1,13	-0,82	
206	FTIR	6,46	0,655	2,60	1,88	
207	FTIR	6,10	0,295	1,17	0,85	
208	FTIR	6,70	0,895	3,55	2,57	
210	FTIR	5,60	-0,205	-0,81	-0,59	
211	FTIR	5,43	-0,375	-1,49	-1,08	
213	FTIR	5,28	-0,525	-2,08	-1,51	
215	FTIR	6,64	0,835	3,31	2,40	
216	FTIR	7,33	1,525	6,05	4,38	
217	FTIR	5,75	-0,055	-0,22	-0,16	
218	FTIR	4,50	-1,305	-5,18	-3,75	
219	FTIR	7,40	1,595	6,33	4,58	
220	FTIR	7,81	2,005	7,96	5,76	(**)
221	FTIR	5,41	-0,395	-1,57	-1,14	
222	FTIR	5,14	-0,665	-2,64	-1,91	
223	FTIR	5,80	-0,005	-0,02	-0,01	
224	FTIR	5,42	-0,385	-1,53	-1,11	
227	FTIR	5,95	0,145	0,58	0,42	
228	FTIR	5,53	-0,275	-1,09	-0,79	
229	FTIR	5,55	-0,255	-1,01	-0,73	
230	FTIR	6,50	0,695	2,76	2,00	
233	FTIR	5,83	0,025	0,10	0,07	
235	FTIR	6,40	0,595	2,36	1,71	
236	FTIR	6,00	0,195	0,77	0,56	
237	FTIR	5,30	-0,505	-2,00	-1,45	
238	FTIR	7,07	1,265	5,02	3,64	
239	FTIR	5,70	-0,105	-0,42	-0,30	
241	FTIR	7,46	1,655	6,57	4,76	
242	FTIR	5,48	-0,325	-1,29	-0,93	
243	FTIR	5,22	-0,585	-2,32	-1,68	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
244	FTIR	5,10	-0,705	-2,80	-2,03	
245	FTIR	5,64	-0,165	-0,65	-0,47	
246	FTIR	5,50	-0,305	-1,21	-0,88	
248	FTIR	5,92	0,115	0,46	0,33	
249	FTIR	6,10	0,295	1,17	0,85	
251	FTIR	5,30	-0,505	-2,00	-1,45	
254	FTIR	6,18	0,375	1,49	1,08	
255	FTIR	7,32	1,515	6,01	4,35	
256	FTIR	5,60	-0,205	-0,81	-0,59	
257	FTIR	5,99	0,185	0,73	0,53	
258	FTIR	6,00	0,195	0,77	0,56	
263	FTIR	5,60	-0,205	-0,81	-0,59	
266	FTIR	7,45	1,645	6,53	4,73	
267	FTIR	5,51	-0,295	-1,17	-0,85	
268	FTIR	5,53	-0,275	-1,09	-0,79	
270	FTIR	6,17	0,365	1,45	1,05	
271	FTIR	5,99	0,185	0,73	0,53	
273	FTIR	5,54	-0,265	-1,05	-0,76	
274	FTIR	6,17	0,365	1,45	1,05	
276	FTIR	5,40	-0,405	-1,61	-1,16	
277	FTIR	6,00	0,195	0,77	0,56	
278	FTIR	7,50	1,695	6,73	4,87	
279	FTIR	5,20	-0,605	-2,40	-1,74	
280	FTIR	5,47	-0,335	-1,33	-0,96	
281	FTIR	6,16	0,355	1,41	1,02	
282	FTIR	5,38	-0,425	-1,69	-1,22	
283	FTIR	6,20	0,395	1,57	1,14	
284	FTIR	6,93	1,128	4,48	3,24	
286	FTIR	5,40	-0,405	-1,61	-1,16	
287	FTIR	5,47	-0,335	-1,33	-0,96	
288	FTIR	5,50	-0,305	-1,21	-0,88	
289	FTIR	5,37	-0,435	-1,73	-1,25	
290	FTIR	5,77	-0,035	-0,14	-0,10	
291	FTIR	5,50	-0,305	-1,21	-0,88	
292	FTIR	5,34	-0,465	-1,85	-1,34	
293	FTIR	5,50	-0,305	-1,21	-0,88	
294	FTIR	6,00	0,195	0,77	0,56	
295	FTIR	5,40	-0,405	-1,61	-1,16	
312	FTIR	6,32	0,515	2,04	1,48	
330	FTIR	6,00	0,195	0,77	0,56	

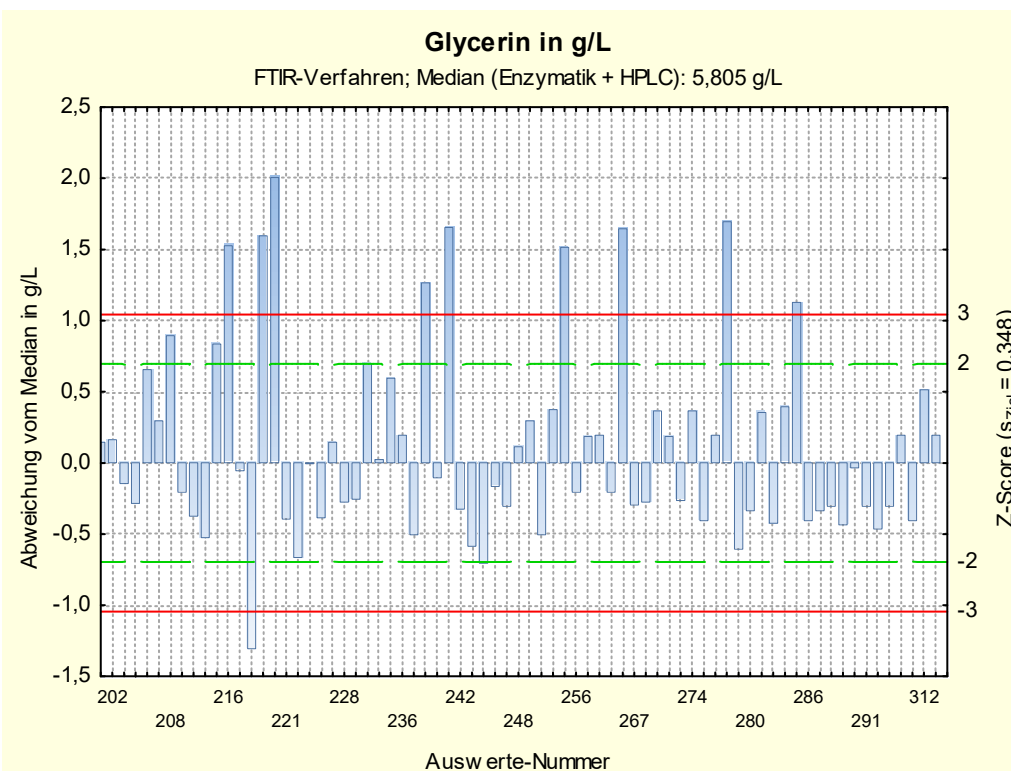
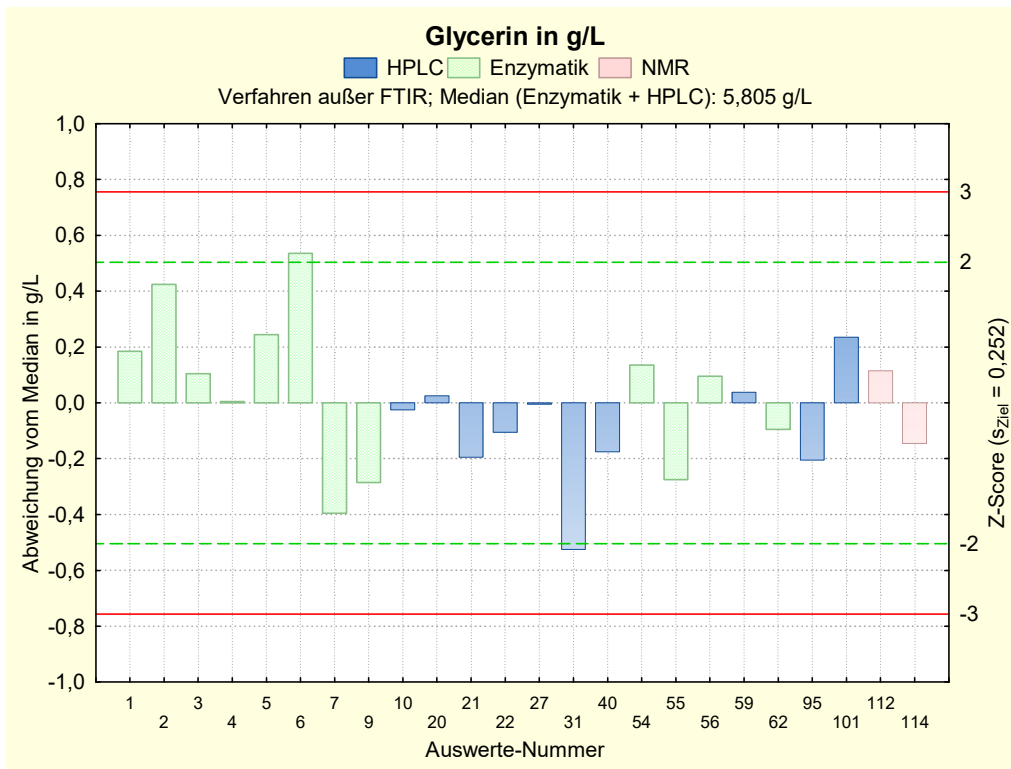
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.11.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	5,28
Mittelwert	5,793
Median	5,805
Maximalwert	6,34
Standardabweichung (s_L)	0,256
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,055
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,252
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U_{FTIR}}$)	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,01
Quotient ($s_L/s_{U_{FTIR}}$)	0,73
Quotient (u_M/s_H)	0,22
Quotient ($u_M/s_{U_{FTIR}}$)	0,16

6.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	5,724	0,170
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	9	5,918	0,291
enzymat. Hand	enzymatisch manuell	3	5,703	0,329
	alle herkömmlichen Verfahren	22	5,789	0,254
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	5,841	0,542
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	2	5,790	0,208



6.12 pH-Wert**6.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
1	potentiometr.	3,33	0,047	0,99	
2	potentiometr.	3,32	0,037	0,78	
3	potentiometr.	3,34	0,057	1,20	
4	potentiometr.	3,32	0,037	0,78	
5	potentiometr.	3,20	-0,083	-1,74	
6	potentiometr.	3,27	-0,013	-0,27	
8	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
9	potentiometr.	3,26	-0,023	-0,48	
10	potentiometr.	3,29	0,007	0,15	
11	potentiometr.	3,30	0,017	0,36	
12	potentiometr.	3,06	-0,223	-4,68	
13	potentiometr.	3,40	0,117	2,46	
14	potentiometr.	3,22	-0,063	-1,32	
15	potentiometr.	3,22	-0,063	-1,32	
18	potentiometr.	3,29	0,011	0,23	
20	potentiometr.	3,27	-0,013	-0,27	
21	potentiometr.	3,24	-0,043	-0,90	
22	potentiometr.	3,32	0,037	0,78	
24	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
25	potentiometr.	3,29	0,007	0,15	
26	potentiometr.	3,24	-0,043	-0,90	
27	potentiometr.	3,35	0,067	1,41	
28	potentiometr.	3,25	-0,033	-0,69	
29	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
30	potentiometr.	3,24	-0,043	-0,90	
31	potentiometr.	3,18	-0,103	-2,16	
32	potentiometr.	3,30	0,017	0,36	
33	potentiometr.	3,15	-0,133	-2,79	
34	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
38	potentiometr.	3,33	0,047	0,99	
40	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
41	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
42	potentiometr.	3,33	0,047	0,99	
44	potentiometr.	3,25	-0,033	-0,69	
45	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
47	potentiometr.	3,24	-0,043	-0,90	
49	potentiometr.	3,20	-0,083	-1,74	
52	potentiometr.	3,11	-0,173	-3,63	
53	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
54	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
55	potentiometr.	3,33	0,047	0,99	
56	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
57	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
58	potentiometr.	3,28	-0,003	-0,06	
59	potentiometr.	3,29	0,003	0,06	
60	potentiometr.	3,22	-0,063	-1,32	
61	potentiometr.	3,38	0,097	2,04	
64	potentiometr.	3,17	-0,113	-2,37	
67	potentiometr.	3,30	0,017	0,36	
72	potentiometr.	3,27	-0,013	-0,27	
76	potentiometr.	3,26	-0,023	-0,48	
77	potentiometr.	3,24	-0,043	-0,90	
80	potentiometr.	3,31	0,027	0,57	
85	potentiometr.	3,30	0,017	0,36	
87	potentiometr.	3,29	0,004	0,08	
91	potentiometr.	3,30	0,017	0,36	

6.12.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,34	0,057	1,16	
202	FTIR	3,28	-0,003	-0,06	
203	FTIR	3,22	-0,063	-1,28	
204	FTIR	3,38	0,097	1,97	
205	FTIR	3,26	-0,023	-0,47	
206	FTIR	3,21	-0,073	-1,48	
207	FTIR	3,34	0,057	1,16	
208	FTIR	3,28	-0,003	-0,06	
210	FTIR	3,26	-0,023	-0,47	
211	FTIR	3,27	-0,013	-0,26	
213	FTIR	3,33	0,047	0,95	
215	FTIR	3,38	0,097	1,97	
216	FTIR	3,21	-0,073	-1,48	
217	FTIR	3,32	0,037	0,75	
218	FTIR	3,34	0,057	1,16	
219	FTIR	3,53	0,247	5,01	(**)
220	FTIR	3,55	0,267	5,42	(**)
221	FTIR	3,28	-0,003	-0,06	
222	FTIR	3,25	-0,037	-0,75	
223	FTIR	3,27	-0,013	-0,26	
224	FTIR	3,26	-0,023	-0,47	
226	FTIR	3,34	0,057	1,16	
227	FTIR	3,34	0,057	1,16	
228	FTIR	3,26	-0,023	-0,47	
229	FTIR	3,32	0,037	0,75	
230	FTIR	3,40	0,117	2,37	
232	FTIR	3,42	0,137	2,78	
233	FTIR	3,43	0,147	2,98	
235	FTIR	3,36	0,077	1,56	
236	FTIR	3,37	0,087	1,76	
237	FTIR	3,25	-0,033	-0,67	
238	FTIR	3,47	0,187	3,79	
239	FTIR	3,43	0,147	2,98	
241	FTIR	3,52	0,237	4,81	
242	FTIR	3,32	0,037	0,75	
243	FTIR	3,23	-0,053	-1,08	
244	FTIR	3,24	-0,043	-0,87	
245	FTIR	3,30	0,017	0,34	
246	FTIR	3,25	-0,033	-0,67	
247	FTIR	3,29	0,007	0,14	
248	FTIR	3,37	0,087	1,76	
249	FTIR	3,17	-0,113	-2,29	
251	FTIR	3,28	-0,003	-0,06	
252	FTIR	3,27	-0,013	-0,26	
253	FTIR	3,40	0,117	2,37	
254	FTIR	3,32	0,037	0,75	
255	FTIR	3,31	0,027	0,55	
256	FTIR	3,19	-0,093	-1,89	
257	FTIR	3,34	0,057	1,16	
258	FTIR	3,25	-0,033	-0,67	
259	FTIR	3,36	0,077	1,56	
260	FTIR	3,45	0,167	3,39	
261	FTIR	3,42	0,137	2,78	
263	FTIR	3,30	0,017	0,34	
264	FTIR	3,24	-0,043	-0,87	
265	FTIR	3,29	0,007	0,14	
266	FTIR	3,25	-0,033	-0,67	
267	FTIR	3,30	0,017	0,34	
268	FTIR	3,31	0,027	0,55	
269	FTIR	3,26	-0,023	-0,47	
270	FTIR	3,05	-0,233	-4,73	
271	FTIR	3,34	0,057	1,16	
273	FTIR	3,35	0,067	1,36	
274	FTIR	3,38	0,097	1,97	
275	FTIR	3,42	0,137	2,78	
276	FTIR	3,29	0,007	0,14	
277	FTIR	3,22	-0,063	-1,28	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	3,33	0,047	0,95	
279	FTIR	3,27	-0,013	-0,26	
280	FTIR	3,36	0,077	1,56	
281	FTIR	3,37	0,087	1,76	
282	FTIR	3,23	-0,053	-1,08	
283	FTIR	3,07	-0,213	-4,32	
284	FTIR	3,31	0,030	0,61	
286	FTIR	3,38	0,097	1,97	
287	FTIR	3,35	0,067	1,36	
288	FTIR	3,36	0,077	1,56	
289	FTIR	3,35	0,067	1,36	
290	FTIR	3,35	0,067	1,36	
291	FTIR	3,33	0,047	0,95	
292	FTIR	3,36	0,077	1,56	
293	FTIR	3,34	0,057	1,16	
294	FTIR	3,42	0,137	2,78	
295	FTIR	3,38	0,097	1,97	
312	FTIR	3,31	0,027	0,55	
325	FTIR	3,29	0,007	0,14	
330	FTIR	3,27	-0,013	-0,26	

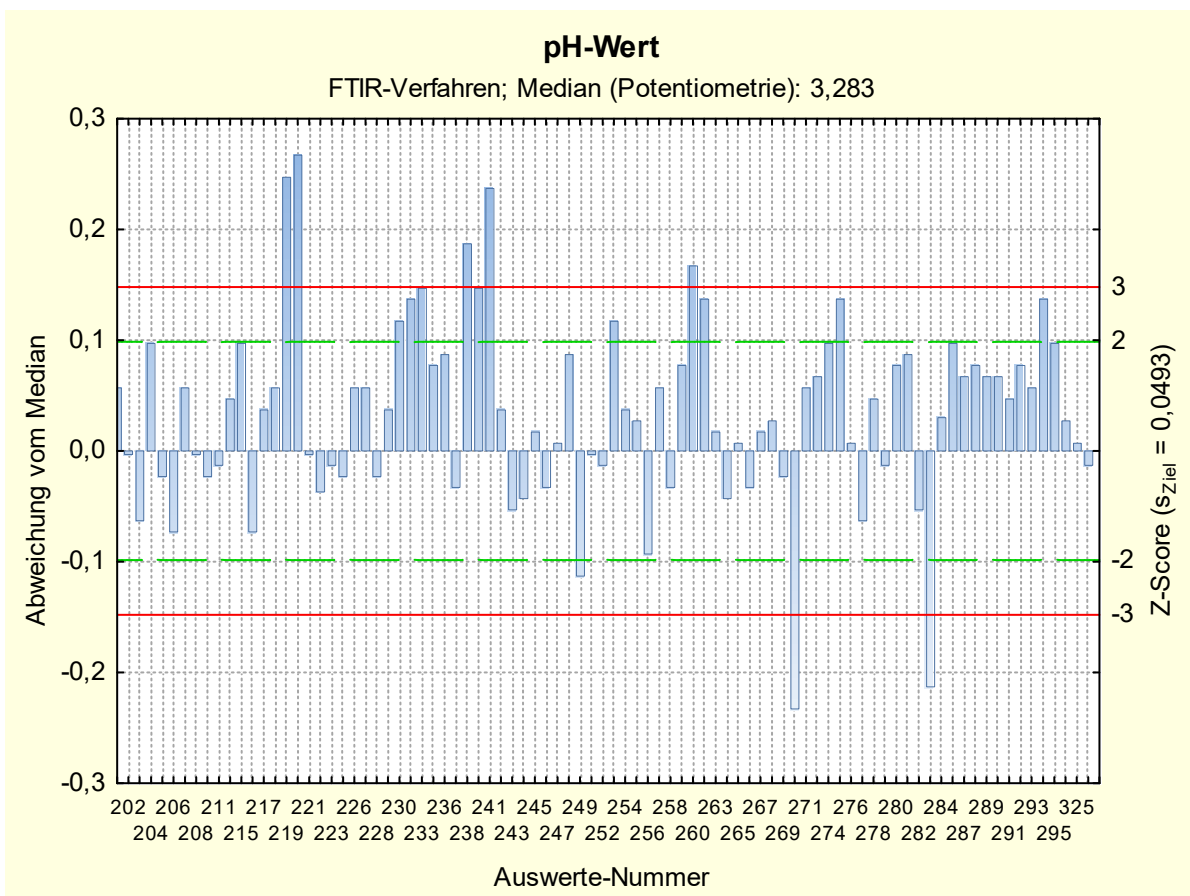
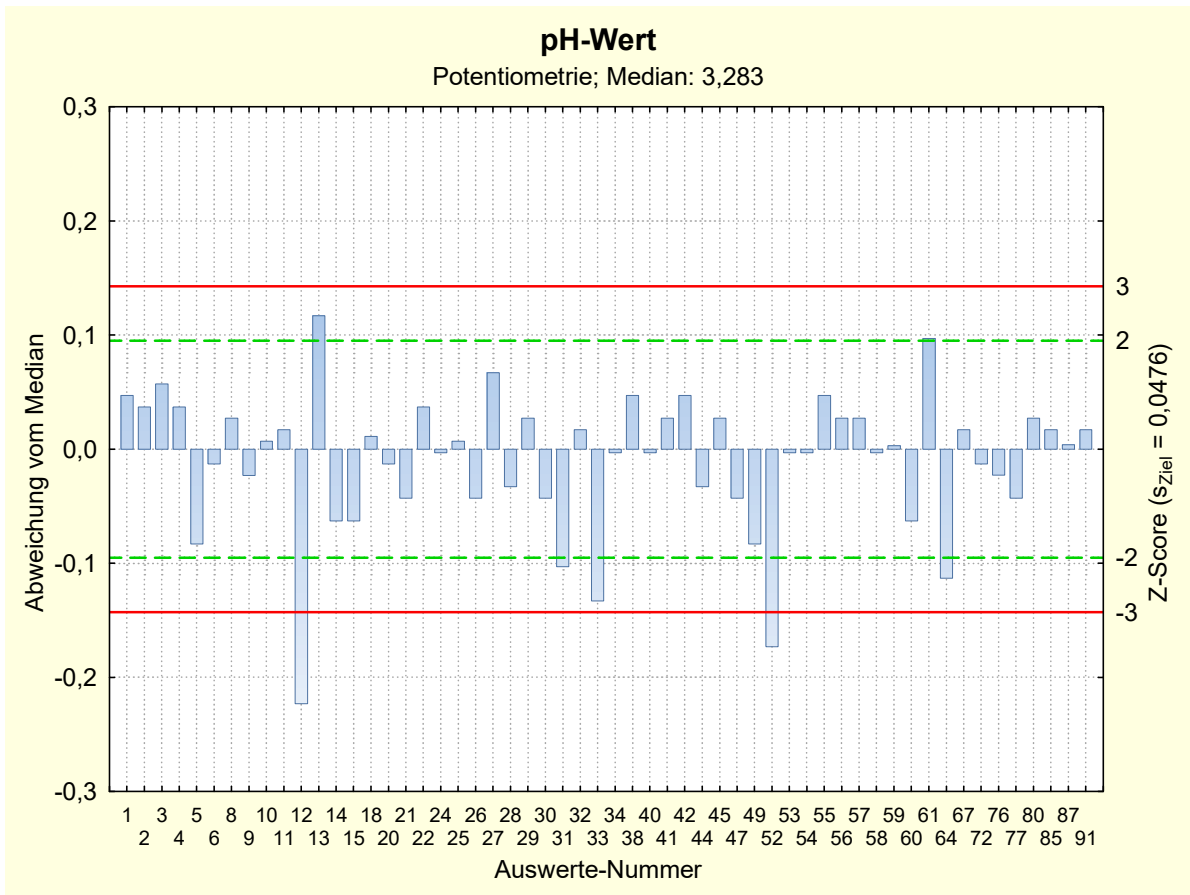
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.12.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	56
Minimalwert	3,06
Mittelwert	3,273
Median	3,283
Maximalwert	3,40
Standardabweichung (s_L)	0,0610
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0082
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,28
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,24
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,17

6.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	56	3,278	0,049
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	3,318	0,074
	alle Verfahren	143	3,300	0,065



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 5.2.1	6,39	-0,210	-0,75	-1,96	
2	LwK 5.2.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
3	LwK 5.2.1	6,53	-0,070	-0,25	-0,65	
4	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
5	LwK 5.1	6,59	-0,010	-0,04	-0,09	
6	LwK 5.1	6,39	-0,210	-0,75	-1,96	
7	LwK 5.2.1	7,63	1,030	3,66	9,61	(**)
8	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
9	LwK 5.2.1	6,45	-0,150	-0,53	-1,40	
10	LwK 5.2.1	6,59	-0,010	-0,04	-0,09	
11	LwK 5.2.1	6,58	-0,020	-0,07	-0,19	
12	LwK 5.2.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
13	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
14	LwK 5.1	6,54	-0,065	-0,23	-0,61	
15	LwK 5.2.1	6,63	0,030	0,11	0,28	
17	LwK 5.2.2	6,80	0,200	0,71	1,87	
18	LwK 5.2.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
19	LwK 5.1	6,47	-0,130	-0,46	-1,21	
20	LwK 5.1	6,78	0,180	0,64	1,68	
21	LwK 5.1	6,61	0,010	0,04	0,09	
22	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
23	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
24	LwK 5.1	6,63	0,030	0,11	0,28	
25	LwK 5.2.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
26	LwK 5.1	6,63	0,030	0,11	0,28	
27	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
28	LwK 5.2.2	6,53	-0,070	-0,25	-0,65	
29	LwK 5.1	6,40	-0,200	-0,71	-1,87	
30	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
31	LwK 5.1	6,57	-0,030	-0,11	-0,28	
32	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
33	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
34	LwK 5.1	6,74	0,140	0,50	1,31	
38	LwK 5.1	6,39	-0,210	-0,75	-1,96	
39	LwK 5.2.1	6,57	-0,030	-0,11	-0,28	
40	LwK 5.2.1	6,58	-0,020	-0,07	-0,19	
41	LwK 5.1	6,76	0,160	0,57	1,49	
42	LwK 5.1	6,30	-0,300	-1,07	-2,80	
43	LwK 5.1	6,45	-0,155	-0,55	-1,45	
44	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
45	LwK 5.1	6,66	0,060	0,21	0,56	
46	LwK 5.1	6,85	0,250	0,89	2,33	
47	LwK 5.2.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
48	LwK 5.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
49	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
50	LwK 5.2.1	6,62	0,020	0,07	0,19	
52	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
53	LwK 5.2.1	6,90	0,300	1,07	2,80	
54	LwK 5.2.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
55	LwK 5.2.1	6,85	0,250	0,89	2,33	
56	LwK 5.1	6,54	-0,060	-0,21	-0,56	
57	LwK 5.1	6,82	0,220	0,78	2,05	
58	LwK 5.2.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
59	LwK 5.1	6,47	-0,130	-0,46	-1,21	
60	LwK 5.1	6,55	-0,050	-0,18	-0,47	
61	LwK 5.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
62	LwK 5.2.1	6,75	0,150	0,53	1,40	
64	LwK 5.2.1	6,75	0,150	0,53	1,40	
67	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
72	LwK 5.1	6,94	0,340	1,21	3,17	
76	LwK 5.1	7,10	0,500	1,78	4,67	
77	LwK 5.2.2	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
85	LwK 5.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
87	LwK 5.2.1	7,14	0,539	1,92	5,03	(**)

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
91	LwK 5.2.1	5,89	-0,710	-2,53	-6,63	(**)
95	LwK 5.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
121	LwK 5.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
122	LwK 5.1	6,51	-0,090	-0,32	-0,84	
123	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
124	FTIR	6,60	0,000	0,00	0,00	
125	LwK 5.1	6,78	0,180	0,64	1,68	
126	LwK 5.2.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
127	LwK 5.1	6,90	0,300	1,07	2,80	
128	LwK 5.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
129	LwK 5.2.1	6,71	0,110	0,39	1,03	
130	LwK 5.1	6,59	-0,010	-0,04	-0,09	
131	LwK 5.1	6,55	-0,050	-0,18	-0,47	
132	LwK 5.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
133	LwK 5.1	6,20	-0,400	-1,42	-3,73	
134	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
135	LwK 5.1	6,66	0,060	0,21	0,56	
136	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
137	LwK 5.1	6,65	0,050	0,18	0,47	
138	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
139	LwK 5.1	6,70	0,100	0,36	0,93	
140	LwK 5.1	6,53	-0,070	-0,25	-0,65	
141	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
142	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
143	LwK 5.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
144	LwK 5.1	7,10	0,500	1,78	4,67	
145	LwK 5.2.1	6,44	-0,160	-0,57	-1,49	
146	FTIR	6,90	0,300	1,07	2,80	
147	LwK 5.2.1	6,63	0,030	0,11	0,28	
148	LwK 5.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
149	LwK 5.2.1	6,60	0,000	0,00	0,00	
150	LwK 5.1	6,64	0,040	0,14	0,37	
151	LwK 5.2.1	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
152	LwK 5.1	6,80	0,200	0,71	1,87	
153	FTIR	6,50	-0,100	-0,36	-0,93	
154	LwK 5.1	6,75	0,150	0,53	1,40	

Rote Methodenangabe: Als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollen keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

6.13.1 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,58	-0,020	-0,07	-0,14	
202	LwK 5.3	6,48	-0,120	-0,43	-0,83	
203	LwK 5.3	6,67	0,070	0,25	0,48	
204	LwK 5.3	5,99	-0,610	-2,17	-4,21	
205	LwK 5.3	6,53	-0,070	-0,25	-0,48	
206	LwK 5.3	6,45	-0,150	-0,53	-1,03	
207	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
208	LwK 5.3	6,52	-0,080	-0,28	-0,55	
210	LwK 5.3	6,53	-0,070	-0,25	-0,48	
211	LwK 5.3	6,29	-0,310	-1,10	-2,14	
212	LwK 5.3	6,49	-0,110	-0,39	-0,76	
213	LwK 5.3	6,67	0,070	0,25	0,48	
215	LwK 5.3	6,61	0,010	0,04	0,07	
216	LwK 5.3	6,74	0,140	0,50	0,97	
217	LwK 5.3	6,61	0,010	0,04	0,07	
218	LwK 5.3	6,69	0,090	0,32	0,62	
219	LwK 5.3	6,55	-0,050	-0,18	-0,34	
220	LwK 5.3	6,53	-0,070	-0,25	-0,48	
221	LwK 5.3	6,71	0,110	0,39	0,76	
222	LwK 5.3	6,67	0,069	0,25	0,48	
223	LwK 5.3	6,80	0,200	0,71	1,38	
224	LwK 5.3	6,43	-0,170	-0,60	-1,17	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
225	LwK 5.3	6,70	0,100	0,36	0,69	
226	LwK 5.3	6,53	-0,070	-0,25	-0,48	
227	LwK 5.3	6,20	-0,400	-1,42	-2,76	
228	LwK 5.3	6,88	0,280	1,00	1,93	
229	LwK 5.3	6,38	-0,220	-0,78	-1,52	
230	LwK 5.3	6,54	-0,060	-0,21	-0,41	
232	LwK 5.3	6,60	0,000	0,00	0,00	
233	LwK 5.3	6,62	0,020	0,07	0,14	
235	LwK 5.3	6,80	0,200	0,71	1,38	
236	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
237	LwK 5.3	6,87	0,270	0,96	1,86	
238	LwK 5.3	7,06	0,460	1,64	3,17	
239	LwK 5.3	6,28	-0,320	-1,14	-2,21	
241	LwK 5.3	6,84	0,240	0,85	1,66	
242	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
243	LwK 5.3	6,67	0,070	0,25	0,48	
244	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
245	LwK 5.3	6,62	0,020	0,07	0,14	
246	LwK 5.3	6,80	0,200	0,71	1,38	
247	LwK 5.3	6,95	0,350	1,25	2,41	
248	LwK 5.3	6,83	0,230	0,82	1,59	
249	LwK 5.3	6,50	-0,100	-0,36	-0,69	
251	LwK 5.3	6,50	-0,100	-0,36	-0,69	
252	LwK 5.3	8,39	1,790	6,37	12,34	(**)
253	LwK 5.3	6,80	0,200	0,71	1,38	
254	LwK 5.3	6,59	-0,010	-0,04	-0,07	
255	LwK 5.3	6,90	0,300	1,07	2,07	
256	LwK 5.3	6,60	0,000	0,00	0,00	
257	LwK 5.3	6,50	-0,100	-0,36	-0,69	
258	LwK 5.3	6,70	0,100	0,36	0,69	
259	LwK 5.3	6,39	-0,210	-0,75	-1,45	
260	LwK 5.3	6,64	0,040	0,14	0,28	
261	LwK 5.3	6,42	-0,180	-0,64	-1,24	
262	LwK 5.3	7,09	0,490	1,74	3,38	
263	LwK 5.3	7,00	0,400	1,42	2,76	
264	LwK 5.3	6,20	-0,400	-1,42	-2,76	
265	LwK 5.3	6,36	-0,240	-0,85	-1,66	
266	LwK 5.3	6,39	-0,210	-0,75	-1,45	
267	LwK 5.3	6,50	-0,100	-0,36	-0,69	
268	LwK 5.3	6,01	-0,590	-2,10	-4,07	
269	LwK 5.3	7,09	0,490	1,74	3,38	
270	LwK 5.3	6,39	-0,210	-0,75	-1,45	
271	LwK 5.3	6,33	-0,270	-0,96	-1,86	
273	LwK 5.3	6,75	0,150	0,53	1,03	
274	LwK 5.3	6,44	-0,160	-0,57	-1,10	
275	LwK 5.3	6,56	-0,040	-0,14	-0,28	
276	LwK 5.3	6,68	0,080	0,28	0,55	
277	LwK 5.3	6,10	-0,500	-1,78	-3,45	
278	LwK 5.3	6,96	0,360	1,28	2,48	
279	LwK 5.3	6,47	-0,130	-0,46	-0,90	
280	LwK 5.3	6,25	-0,350	-1,25	-2,41	
281	LwK 5.3	6,32	-0,280	-1,00	-1,93	
282	LwK 5.3	6,44	-0,160	-0,57	-1,10	
283	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
284	LwK 5.3	6,13	-0,467	-1,66	-3,22	
286	LwK 5.3	6,20	-0,400	-1,42	-2,76	
287	LwK 5.3	6,21	-0,390	-1,39	-2,69	
288	LwK 5.3	6,16	-0,440	-1,57	-3,03	
289	LwK 5.3	6,44	-0,160	-0,57	-1,10	
290	LwK 5.3	6,20	-0,400	-1,42	-2,76	
291	LwK 5.3	6,37	-0,230	-0,82	-1,59	
292	LwK 5.3	6,17	-0,430	-1,53	-2,97	
293	LwK 5.3	6,17	-0,430	-1,53	-2,97	
294	LwK 5.3	6,80	0,200	0,71	1,38	
295	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
312	LwK 5.3	6,59	-0,010	-0,04	-0,07	
325	LwK 5.3	6,40	-0,200	-0,71	-1,38	
330	LwK 5.3	6,67	0,070	0,25	0,48	

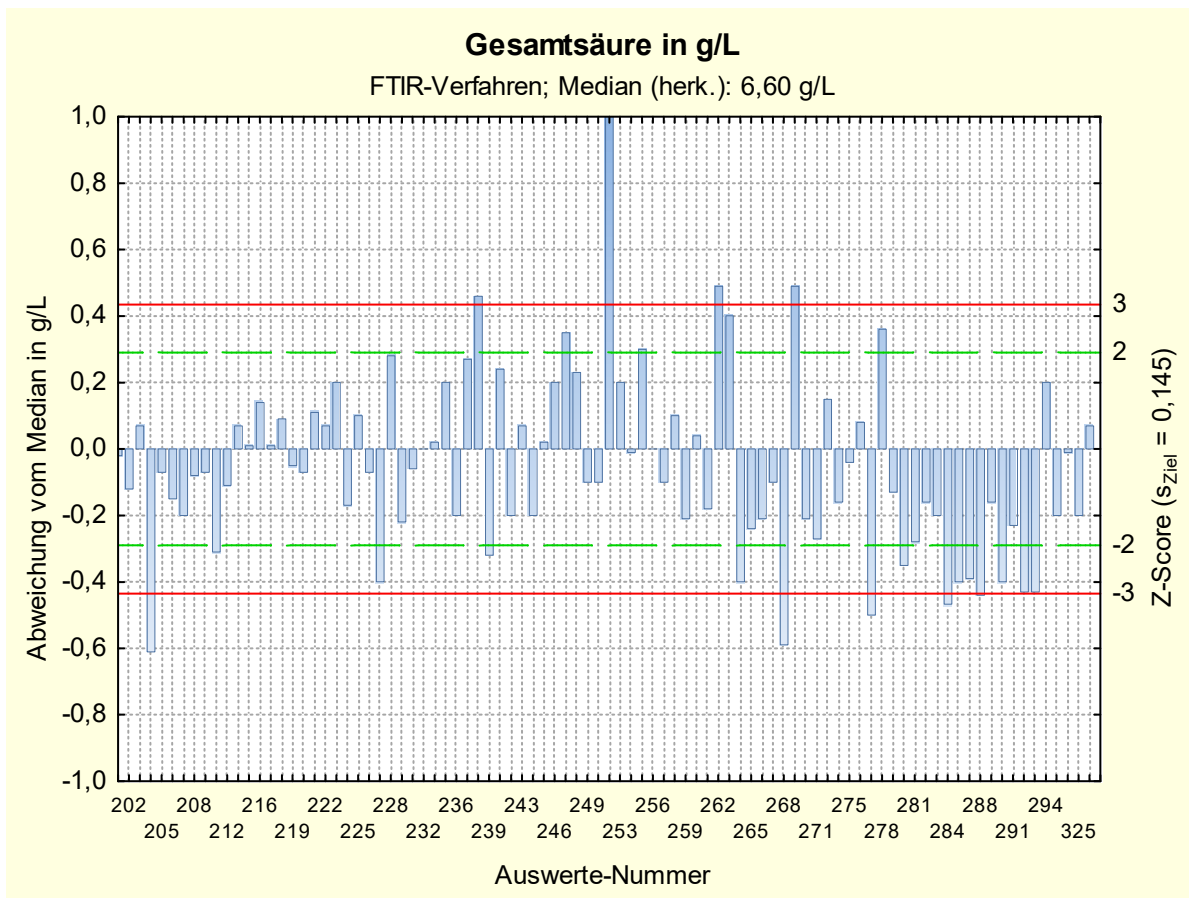
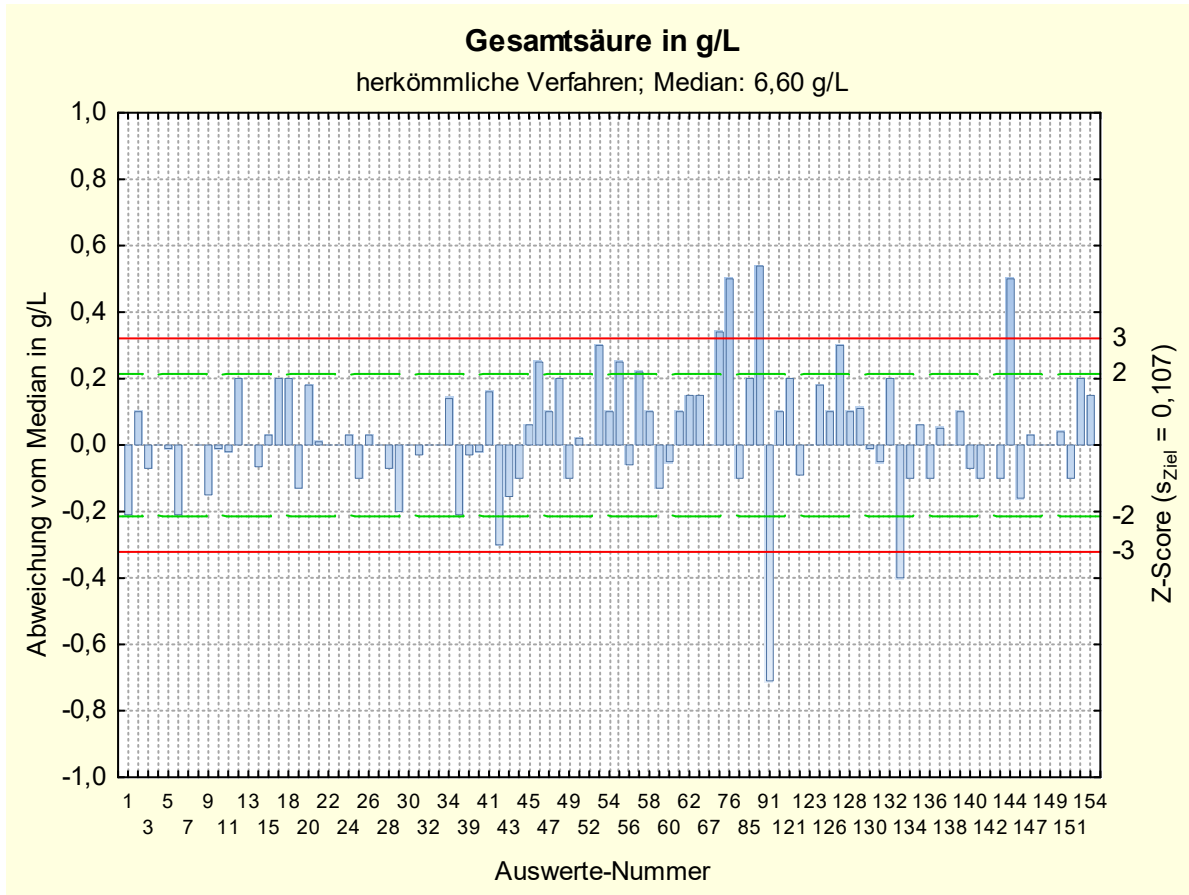
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.13.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten FTIR	ber. Daten herk.
Gültige Werte	97	96	94
Minimalwert	5,89	5,89	6,20
Mittelwert	6,639	6,629	6,631
Median	6,600	6,600	6,600
Maximalwert	7,63	7,14	7,10
Standardabweichung (s_L)	0,203	0,176	0,152
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,021	0,018	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,281	0,281	0,281
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107		0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,72	0,63	0,54
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,89		1,42
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,40	1,22	
Quotient (u_M/s_H)	0,07	0,06	0,06
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,19		0,15
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,14	0,12	

6.13.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	59	6,626	0,0,154
LwK 5.2.1	Potentiometrische Bestimmung; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	35	6,640	0,0,139
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	3	6,603	0,173
	alle herkömmlichen Verfahren	97	6,630	0,148
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	93	6,540	0,198



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	HPLC	2,00	0,120	1,24	
2	HPLC	1,76	-0,120	-1,24	
4	photometr. Hand	1,83	-0,050	-0,52	
5	HPLC	1,83	-0,050	-0,52	
6	photometr. autom.	1,77	-0,110	-1,14	
7	HPLC	1,85	-0,030	-0,31	
8	HPLC	1,86	-0,020	-0,21	
9	photometr. autom.	1,53	-0,350	-3,62	
13	photometr. autom.	2,01	0,130	1,34	
15	photometr. autom.	1,72	-0,160	-1,65	
18	photometr. autom.	1,95	0,070	0,72	
21	HPLC	2,29	0,410	4,24	
22	HPLC	1,78	-0,100	-1,03	
24	HPLC	2,42	0,540	5,58	(**)
25	photometr. Hand	1,67	-0,210	-2,17	
27	HPLC	2,01	0,130	1,34	
30	photometr. autom.	2,18	0,300	3,10	
31	photometr. Hand	2,15	0,270	2,79	
32	photometr. autom.	2,31	0,430	4,45	
39	photometr. autom.	1,75	-0,130	-1,34	
40	HPLC	1,97	0,090	0,93	
41	photometr. autom.	2,07	0,190	1,96	
42	photometr. autom.	1,90	0,020	0,21	
45	photometr. autom.	2,05	0,170	1,76	
47	photometr. autom.	1,82	-0,060	-0,62	
48	photometr. autom.	2,25	0,370	3,83	
50	photometr. autom.	1,84	-0,040	-0,41	
54	photometr. autom.	2,13	0,250	2,59	
55	photometr. autom.	1,77	-0,110	-1,14	
56	HPLC	1,94	0,060	0,62	
58	photometr. autom.	0,50	-1,380	-14,27	(*)
76	photometr. Hand	1,90	0,024	0,25	
101	IC	1,86	-0,020	-0,21	
102	HPLC	1,73	-0,150	-1,55	
112	NMR	1,22	-0,660	-6,82	(**)
113	NMR	1,61	-0,273	-2,82	
114	NMR	1,71	-0,170	-1,76	

6.14.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,22	0,320	3,28	1,41	
202	FTIR	2,11	0,210	2,15	0,93	
203	FTIR	2,12	0,220	2,25	0,97	
204	FTIR	2,89	0,990	10,15	4,36	
205	FTIR	2,37	0,470	4,82	2,07	
207	FTIR	2,60	0,700	7,17	3,08	
208	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
210	FTIR	2,37	0,470	4,82	2,07	
211	FTIR	2,36	0,460	4,71	2,03	
213	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
215	FTIR	2,89	0,990	10,15	4,36	
216	FTIR	2,27	0,370	3,79	1,63	
217	FTIR	2,58	0,680	6,97	3,00	
218	FTIR	2,78	0,880	9,02	3,88	
219	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
220	FTIR	2,32	0,420	4,30	1,85	
221	FTIR	2,05	0,150	1,54	0,66	
222	FTIR	1,95	0,047	0,48	0,21	
223	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
224	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
228	FTIR	2,19	0,290	2,97	1,28	
229	FTIR	1,82	-0,080	-0,82	-0,35	
230	FTIR	2,52	0,620	6,35	2,73	
232	FTIR	2,31	0,410	4,20	1,81	
233	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
235	FTIR	2,68	0,780	7,99	3,44	
237	FTIR	2,80	0,900	9,22	3,96	
238	FTIR	2,65	0,750	7,69	3,30	
239	FTIR	2,06	0,160	1,64	0,70	
241	FTIR	2,35	0,450	4,61	1,98	
242	FTIR	2,71	0,810	8,30	3,57	
243	FTIR	2,12	0,220	2,25	0,97	
244	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
245	FTIR	2,51	0,610	6,25	2,69	
246	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
247	FTIR	2,47	0,570	5,84	2,51	
248	FTIR	2,73	0,830	8,51	3,66	
249	FTIR	2,70	0,800	8,20	3,52	
251	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
252	FTIR	2,01	0,110	1,13	0,48	
253	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
254	FTIR	2,19	0,290	2,97	1,28	
255	FTIR	2,73	0,830	8,51	3,66	
256	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
257	FTIR	3,37	1,470	15,06	6,48	(*)
258	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
260	FTIR	2,99	1,090	11,17	4,80	
261	FTIR	2,44	0,540	5,53	2,38	
264	FTIR	3,20	1,300	13,32	5,73	(*)
265	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
266	FTIR	2,28	0,380	3,89	1,67	
267	FTIR	2,09	0,190	1,95	0,84	
268	FTIR	2,47	0,570	5,84	2,51	
269	FTIR	2,35	0,450	4,61	1,98	
270	FTIR	2,53	0,630	6,46	2,78	
271	FTIR	2,57	0,670	6,87	2,95	
273	FTIR	2,45	0,550	5,64	2,42	
274	FTIR	2,35	0,450	4,61	1,98	
275	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
276	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
278	FTIR	2,77	0,870	8,92	3,83	
279	FTIR	2,27	0,370	3,79	1,63	
280	FTIR	2,23	0,330	3,38	1,45	
281	FTIR	2,22	0,320	3,28	1,41	
282	FTIR	2,14	0,240	2,46	1,06	
283	FTIR	2,50	0,600	6,15	2,64	
284	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
286	FTIR	2,21	0,310	3,18	1,37	
287	FTIR	2,15	0,250	2,56	1,10	
288	FTIR	2,15	0,250	2,56	1,10	
289	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
290	FTIR	2,14	0,240	2,46	1,06	
291	FTIR	2,30	0,400	4,10	1,76	
292	FTIR	2,11	0,210	2,15	0,93	
294	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
295	FTIR	2,24	0,340	3,48	1,50	
312	FTIR	1,73	-0,170	-1,74	-0,75	
325	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
330	FTIR	2,19	0,290	2,97	1,28	

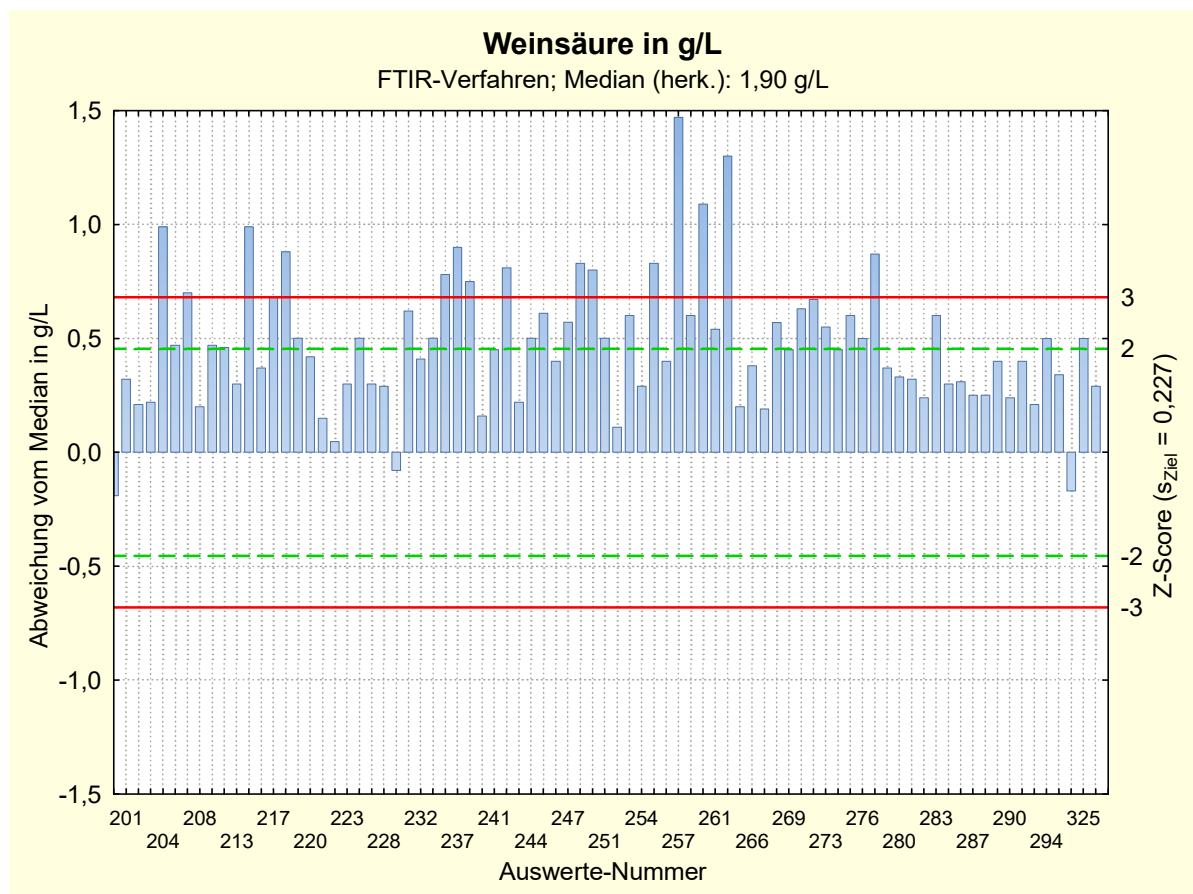
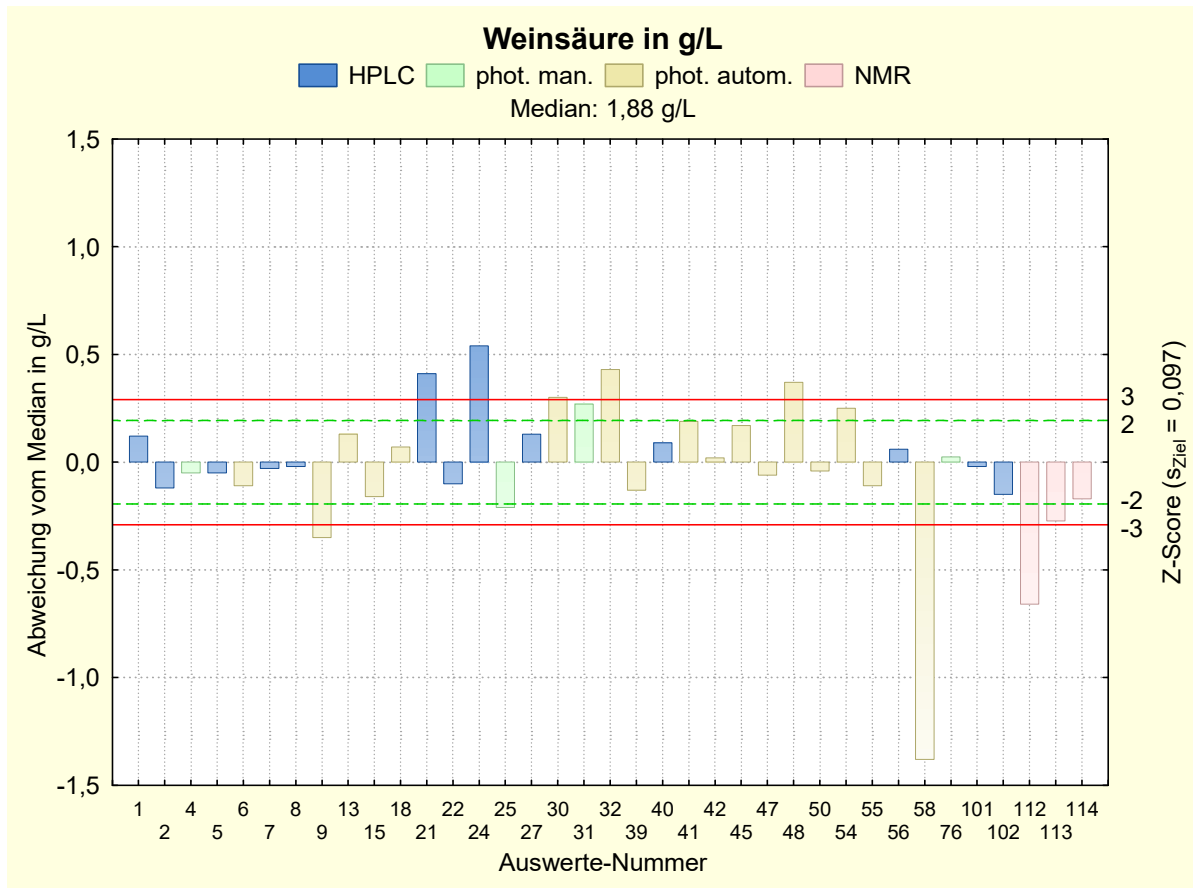
Die mit (*) markierten Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.14.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	33	32
Minimalwert	1,53	1,53
Mittelwert	1,936	1,921
Median	1,900	1,880
Maximalwert	2,42	2,31
Standardabweichung (s_L)	0,203	0,187
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,035	0,033
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,098	0,097
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,227	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,08	1,93
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,90	
Quotient (u_M/s_H)	0,36	0,34
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,16	0,10

6.14.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	1,924	0,172
IC	Ionenchromatographie (IC)	1	1,860	
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	1,883	0,215
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	17	1,915	0,261
	alle herkömmlichen Verfahren	34	1,918	0,207
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	2,364	0,251
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	3	1,531	0,257



6.15 Flüchtige Säure [g/L]**6.15.1 Herkömmliche Laborergebnisse**Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss, experimentelle Zielstandardabweichung, Z_{Max} = 4,5

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	Halbmikro SO2 unber.	0,510	0,1370	5,60	4,80	
4	OIV SO2-korr.	0,480	0,1070	4,37	3,75	
5	Gerhardt SO2 korr.	0,400	0,0270	1,10	0,95	
6	OIV SO2-korr.	0,265	-0,1080	-4,41	-3,78	
8	OIV SO2-korr.	0,310	-0,0630	-2,57	-2,21	
9	OIV SO2-korr.	0,332	-0,0410	-1,68	-1,44	
10	OIV SO2-korr.	0,373	0,0000	0,00	0,00	
12	Gerhardt SO2 ausg.	0,430	0,0570	2,33	2,00	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,420	0,0470	1,92	1,65	
25	Halbmikro SO2 unber.	0,400	0,0270	1,10	0,95	
27	Gerhardt SO2 ausg.	0,440	0,0670	2,74	2,35	
28	Halbmikro SO2 ausg.	0,294	-0,0790	-3,23	-2,77	
29	Wädenswil SO2 korr.	0,340	-0,0330	-1,35	-1,16	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,480	0,1070	4,37	3,75	
31	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0770	3,15	2,70	
33	Halbmikro SO2 unber.	0,600	0,2270	9,27	7,95	(*)
38	Halbmikro SO2 korr.	0,213	-0,1600	-6,54	-5,60	(**)
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,445	0,0720	2,94	2,52	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,260	-0,1130	-4,62	-3,96	
47	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0770	3,15	2,70	
49	Gerhardt SO2 korr.	0,260	-0,1130	-4,62	-3,96	
53	Gerhardt SO2 korr.	0,430	0,0570	2,33	2,00	
54	Rentschler mod. korr.	0,363	-0,0100	-0,41	-0,35	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0770	3,15	2,70	
57	Wädenswil SO2 korr.	0,285	-0,0880	-3,60	-3,08	
60	Gerhardt SO2 korr.	1,100	0,7270	29,70	25,45	(*)
62	OIV SO2-korr.	0,180	-0,1930	-7,89	-6,76	(*)
64	Halbmikro SO2 korr.	0,410	0,0370	1,51	1,30	
66	Wädenswil SO2 korr.	0,494	0,1210	4,94	4,24	
67	Halbmikro SO2 unber.	0,440	0,0670	2,74	2,35	
76	Halbmikro SO2 korr.	0,290	-0,0830	-3,39	-2,91	
77	Halbmikro SO2 unber.	0,450	0,0770	3,15	2,70	
85	Wasserdampfdest.	0,370	-0,0030	-0,12	-0,11	
91	OIV SO2-korr.	0,360	-0,0130	-0,53	-0,46	

Die mit (*) markierten Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der SO₂-korrigierten Werte ab.
Der mit (**) markierte Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.15.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,310	-0,0600	-2,47	-0,67	
202	FTIR	0,370	0,0000	0,00	0,00	
203	FTIR	0,311	-0,0590	-2,43	-0,66	
204	FTIR	0,340	-0,0300	-1,23	-0,34	
205	FTIR	0,330	-0,0400	-1,65	-0,45	
207	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
208	FTIR	0,245	-0,1250	-5,14	-1,40	
210	FTIR	0,331	-0,0390	-1,60	-0,44	
211	FTIR	0,180	-0,1900	-7,82	-2,13	
213	FTIR	0,220	-0,1500	-6,17	-1,68	
215	FTIR	0,160	-0,2100	-8,64	-2,36	
216	FTIR	0,230	-0,1400	-5,76	-1,57	
217	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
218	FTIR	0,270	-0,1000	-4,11	-1,12	
219	FTIR	0,520	0,1500	6,17	1,68	
221	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
223	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
224	FTIR	0,180	-0,1900	-7,82	-2,13	
227	FTIR	0,255	-0,1150	-4,73	-1,29	
228	FTIR	0,201	-0,1690	-6,95	-1,90	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

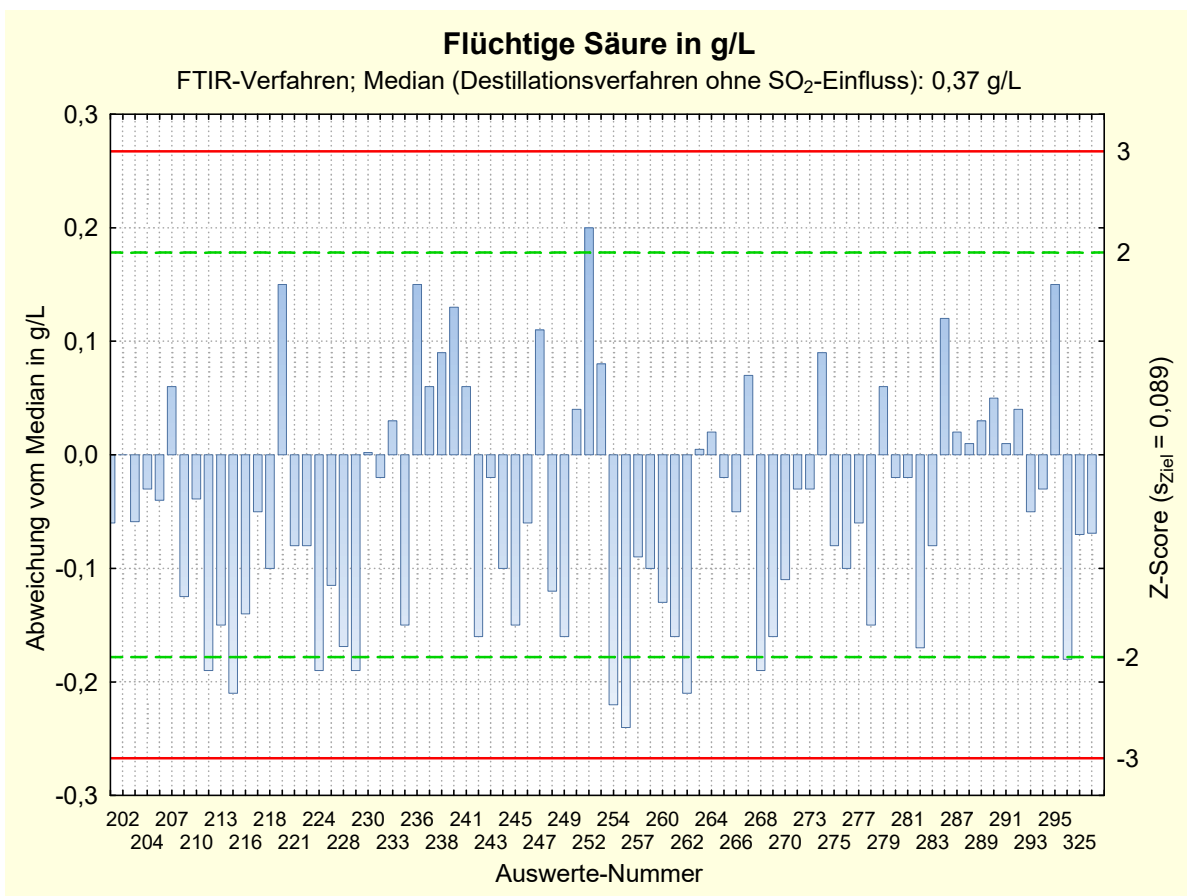
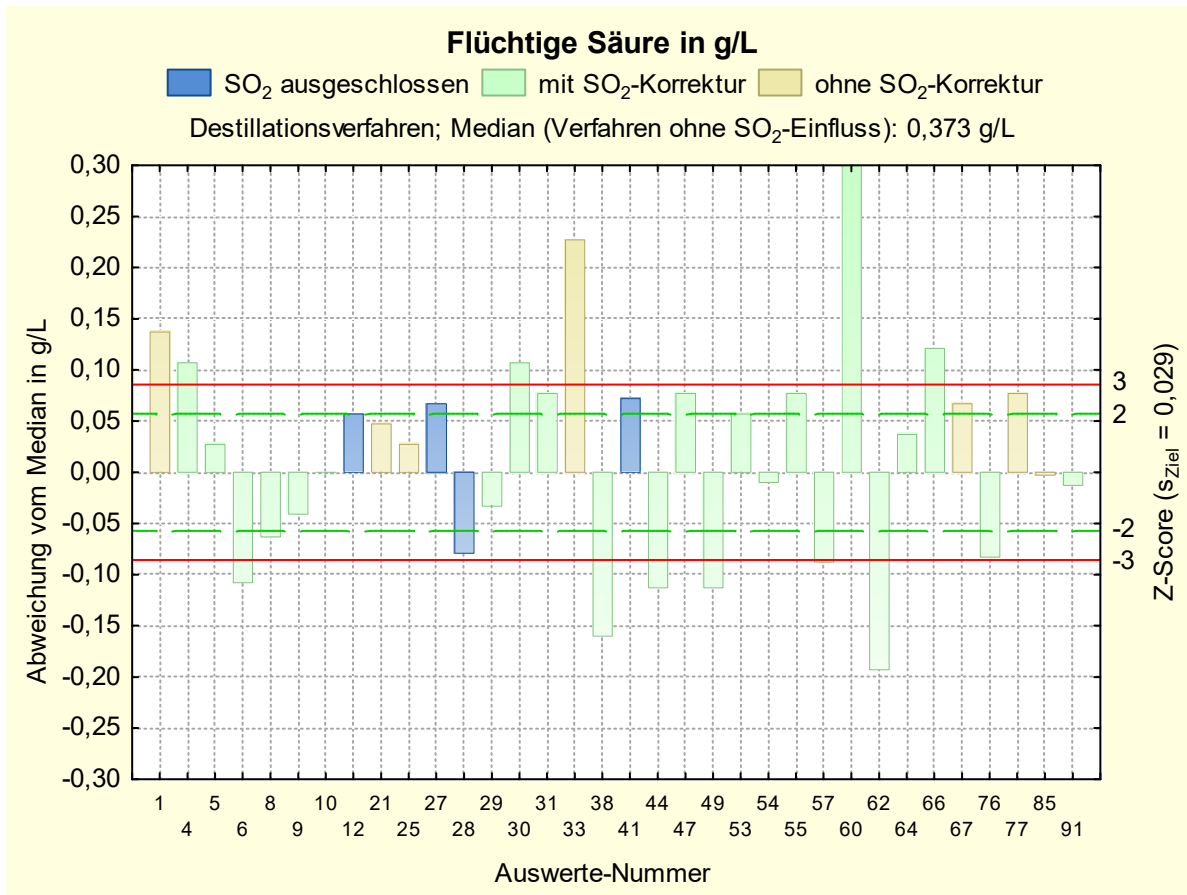
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	0,180	-0,1900	-7,82	-2,13	
230	FTIR	0,372	0,0020	0,08	0,02	
232	FTIR	0,350	-0,0200	-0,82	-0,22	
233	FTIR	0,400	0,0300	1,23	0,34	
235	FTIR	0,220	-0,1500	-6,17	-1,68	
236	FTIR	0,520	0,1500	6,17	1,68	
237	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
238	FTIR	0,460	0,0900	3,70	1,01	
239	FTIR	0,500	0,1300	5,35	1,46	
241	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
242	FTIR	0,210	-0,1600	-6,58	-1,80	
243	FTIR	0,350	-0,0200	-0,82	-0,22	
244	FTIR	0,270	-0,1000	-4,11	-1,12	
245	FTIR	0,220	-0,1500	-6,17	-1,68	
246	FTIR	0,310	-0,0600	-2,47	-0,67	
247	FTIR	0,480	0,1100	4,53	1,23	
248	FTIR	0,250	-0,1200	-4,94	-1,35	
249	FTIR	0,210	-0,1600	-6,58	-1,80	
251	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
252	FTIR	0,570	0,2000	8,23	2,24	
253	FTIR	0,450	0,0800	3,29	0,90	
254	FTIR	0,150	-0,2200	-9,05	-2,47	
255	FTIR	0,130	-0,2400	-9,87	-2,69	
257	FTIR	0,280	-0,0900	-3,70	-1,01	
258	FTIR	0,270	-0,1000	-4,11	-1,12	
260	FTIR	0,240	-0,1300	-5,35	-1,46	
261	FTIR	0,210	-0,1600	-6,58	-1,80	
262	FTIR	0,160	-0,2100	-8,64	-2,36	
263	FTIR	0,375	0,0050	0,21	0,06	
264	FTIR	0,390	0,0200	0,82	0,22	
265	FTIR	0,350	-0,0200	-0,82	-0,22	
266	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
267	FTIR	0,440	0,0700	2,88	0,79	
268	FTIR	0,180	-0,1900	-7,82	-2,13	
269	FTIR	0,210	-0,1600	-6,58	-1,80	
270	FTIR	0,260	-0,1100	-4,53	-1,23	
271	FTIR	0,340	-0,0300	-1,23	-0,34	
273	FTIR	0,340	-0,0300	-1,23	-0,34	
274	FTIR	0,460	0,0900	3,70	1,01	
275	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
276	FTIR	0,270	-0,1000	-4,11	-1,12	
277	FTIR	0,310	-0,0600	-2,47	-0,67	
278	FTIR	0,220	-0,1500	-6,17	-1,68	
279	FTIR	0,430	0,0600	2,47	0,67	
280	FTIR	0,350	-0,0200	-0,82	-0,22	
281	FTIR	0,350	-0,0200	-0,82	-0,22	
282	FTIR	0,200	-0,1700	-6,99	-1,91	
283	FTIR	0,290	-0,0800	-3,29	-0,90	
286	FTIR	0,490	0,1200	4,94	1,35	
287	FTIR	0,390	0,0200	0,82	0,22	
288	FTIR	0,380	0,0100	0,41	0,11	
289	FTIR	0,400	0,0300	1,23	0,34	
290	FTIR	0,420	0,0500	2,06	0,56	
291	FTIR	0,380	0,0100	0,41	0,11	
292	FTIR	0,410	0,0400	1,65	0,45	
293	FTIR	0,320	-0,0500	-2,06	-0,56	
294	FTIR	0,340	-0,0300	-1,23	-0,34	
295	FTIR	0,520	0,1500	6,17	1,68	
312	FTIR	0,190	-0,1800	-7,40	-2,02	
325	FTIR	0,300	-0,0700	-2,88	-0,79	
330	FTIR	0,301	-0,0690	-2,84	-0,77	

6.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L Destillationsergebnisse ohne SO ₂ -Einfluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	25
Minimalwert	0,213	0,260
Mittelwert	0,3721	0,3784
Median	0,3715	0,3730
Maximalwert	0,494	0,494
Standardabweichung (s _L)	0,081	0,076
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,016	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,024	0,024
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089	
Horrat-Wert (s _L /s _H)	3,32	3,10
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	2,84	2,65
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,98	
Quotient (u _M /s _H)	0,65	0,62
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,56	0,53
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,19	

6.15.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	6	0,467	0,076
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	1	0,294	
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,304	0,113
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,362	0,103
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	3	0,438	0,0087
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	9	0,422	0,112
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	7	0,303	0,104
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,363	
Wasserdampfdest.	Wasserdampfdestillation (ohne nähere Angaben)	1	0,370	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	28	0,363	0,108
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	0,319	0,109



6.16 Acetat (als Essigsäure) [g/L]**6.16.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
5	enzymat. autom.	0,193	-0,037	-2,28	
6	enzymat. autom.	0,163	-0,067	-4,13	
13	enzymat. autom.	0,290	0,060	3,70	
15	enzymat. autom.	0,210	-0,020	-1,23	
18	enzymat. autom.	0,250	0,020	1,23	
27	enzymat. autom.	0,390	0,160	9,86	(*)
30	enzymat. autom.	0,400	0,170	10,47	(*)
39	enzymat. autom.	0,249	0,019	1,17	
42	enzymat. autom.	0,240	0,010	0,62	
45	enzymat. autom.	0,214	-0,016	-0,99	
47	enzymat. autom.	0,340	0,110	6,78	(**)
48	enzymat. autom.	0,190	-0,040	-2,46	
50	enzymat. autom.	0,300	0,070	4,31	
53	enzymat. autom.	0,200	-0,030	-1,85	
54	enzymat. autom.	0,243	0,013	0,80	
55	enzymat. autom.	0,200	-0,030	-1,85	
56	enzymat. autom.	0,250	0,020	1,23	
58	enzymat. autom.	0,230	0,000	0,00	
60	enzymat. autom.	0,194	-0,036	-2,20	
61	enzymat. autom.	0,230	0,000	0,00	

6.16.2 Weitere herkömmliche und FTIR-LaborergebnisseBewertungsbasis: enzymatisch, manuell und ¹H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	enzymat. Hand	0,191	-0,008	-0,56	
2	HPLC	0,178	-0,021	-1,46	
3	IC	0,138	-0,061	-4,25	
22	HPLC	0,170	-0,029	-2,02	
24	HPLC	0,221	0,022	1,53	
40	HPLC	<0,3			
62	enzymat. Hand	0,199	0,000	0,00	
111	NMR	0,214	0,015	1,05	
112	NMR	0,220	0,021	1,46	
113	NMR	0,225	0,026	1,80	
114	NMR	0,170	-0,029	-2,02	
220	FTIR	0,310	0,111	7,73	(*)
222	FTIR	0,161	-0,038	-2,65	
241	FTIR	0,420	0,221	15,40	(*)
256	FTIR	0,220	0,021	1,46	
257	FTIR	0,350	0,151	10,52	(*)
284	FTIR	0,500	0,301	20,97	(*)

Die mit (*) markierten Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab.

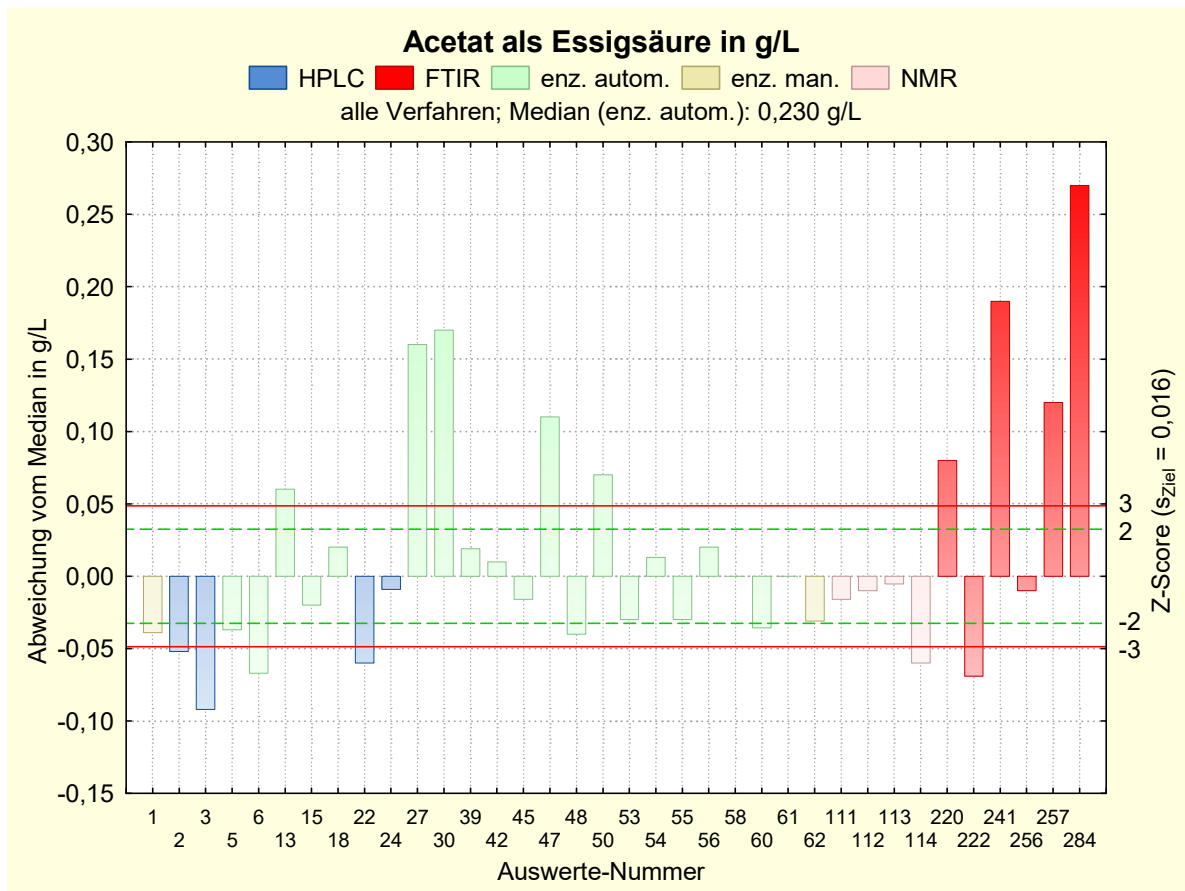
Der mit (**) markierte Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.16.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymat. automat.		enzymat. man. + ¹ H-NMR
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	18	17	9
Minimalwert	0,163	0,163	0,170
Mittelwert	0,233	0,226	0,199
Median	0,230	0,230	0,199
Maximalwert	0,340	0,300	0,225
Standardabweichung (s _L)	0,044	0,036	0,022
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,010	0,009	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,016	0,016	0,014
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})			
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})			
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,72	2,23	1,56
Quotient (u _M /s _H)	0,64	0,54	0,52

6.16.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,187	0,0265
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	20	0,241	0,0552
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,195	0,0064
IC	Ionenchromatographie	1	0,138	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	4	0,208	0,0273
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,327	0,142



6.17 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]**6.17.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Bewertungsbasis: Verfahren außer NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enzymat. Hand	2,59	-0,120	-0,91	-1,38	
2	HPLC	2,69	-0,020	-0,15	-0,23	
3	IC	2,50	-0,209	-1,58	-2,41	
5	HPLC	2,70	-0,010	-0,08	-0,12	
6	enzymat. autom.	2,71	0,000	0,00	0,00	
7	HPLC	2,63	-0,080	-0,61	-0,92	
21	HPLC	2,53	-0,180	-1,36	-2,08	
22	HPLC	2,85	0,140	1,06	1,61	
24	HPLC	2,77	0,060	0,45	0,69	
40	HPLC	2,73	0,020	0,15	0,23	
52	enzymat. autom.	2,93	0,220	1,67	2,54	
56	HPLC	2,86	0,150	1,14	1,73	
62	enzymat. Hand	2,83	0,121	0,92	1,40	
64	enzymat. Hand	2,71	0,000	0,00	0,00	
101	IC	3,06	0,350	2,65	4,04	
102	HPLC	2,53	-0,180	-1,36	-2,08	
111	NMR	2,39	-0,320	-2,43	-3,69	
112	NMR	2,79	0,080	0,61	0,92	
113	NMR	2,56	-0,154	-1,17	-1,78	
114	NMR	2,53	-0,180	-1,36	-2,08	

6.17.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enz.(L-) Hand	2,53	-0,170	-1,29	-1,97	
3	enz.(L-) autom.	2,64	-0,060	-0,46	-0,69	
4	enz.(L-) autom.	2,79	0,090	0,68	1,04	
5	enz.(L-) autom.	2,69	-0,010	-0,08	-0,12	
6	enz.(L-) autom.	2,60	-0,100	-0,76	-1,16	
8	enz.(L-) Hand	2,53	-0,170	-1,29	-1,97	
9	enz.(L-) autom.	2,89	0,190	1,44	2,20	
10	enz.(L-) autom.	2,66	-0,040	-0,30	-0,46	
11	enz.(L-) Hand	2,35	-0,350	-2,66	-4,05	
13	enz.(L-) autom.	2,87	0,170	1,29	1,97	
15	enz.(L-) autom.	2,64	-0,060	-0,46	-0,69	
18	enz.(L-) autom.	2,86	0,160	1,22	1,85	
27	enz.(L-) autom.	2,75	0,050	0,38	0,58	
30	enz.(L-) autom.	2,70	-0,003	-0,02	-0,03	
32	enz.(L-) autom.	2,62	-0,080	-0,61	-0,93	
39	enz.(L-) autom.	2,79	0,090	0,68	1,04	
41	enz.(L-) autom.	2,68	-0,020	-0,15	-0,23	
42	enz.(L-) autom.	2,78	0,080	0,61	0,93	
45	enz.(L-) autom.	2,76	0,060	0,46	0,69	
47	enz.(L-) autom.	2,70	0,000	0,00	0,00	
48	enz.(L-) autom.	2,76	0,060	0,46	0,69	
50	enz.(L-) autom.	2,73	0,030	0,23	0,35	
53	enz.(L-) autom.	2,70	0,000	0,00	0,00	
54	enz.(L-) autom.	2,66	-0,040	-0,30	-0,46	
55	enz.(L-) autom.	2,80	0,100	0,76	1,16	
56	enz.(L-) autom.	2,75	0,050	0,38	0,58	
58	enz.(L-) autom.	3,03	0,330	2,51	3,82	
60	enz.(L-) autom.	2,83	0,132	1,00	1,53	
61	enz.(L-) autom.	2,80	0,100	0,76	1,16	
62	enz.(L-) Hand	2,49	-0,210	-1,60	-2,43	
76	enz.(L-) autom.	2,62	-0,080	-0,61	-0,93	
91	enz.(L-) autom.	2,33	-0,370	-2,81	-4,28	

6.17.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,83	0,120	0,91	0,55	
202	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
203	FTIR	2,68	-0,030	-0,23	-0,14	
204	FTIR	3,21	0,500	3,79	2,29	
205	FTIR	2,68	-0,030	-0,23	-0,14	
207	FTIR	2,40	-0,310	-2,35	-1,42	
208	FTIR	2,82	0,110	0,83	0,50	
210	FTIR	2,94	0,230	1,74	1,06	
211	FTIR	2,68	-0,030	-0,23	-0,14	
213	FTIR	2,93	0,220	1,67	1,01	
215	FTIR	1,43	-1,280	-9,70	-5,87	(**)
216	FTIR	3,08	0,370	2,80	1,70	
217	FTIR	2,62	-0,090	-0,68	-0,41	
218	FTIR	2,47	-0,240	-1,82	-1,10	
220	FTIR	3,16	0,450	3,41	2,06	
221	FTIR	2,21	-0,500	-3,79	-2,29	
222	FTIR	2,68	-0,026	-0,20	-0,12	
223	FTIR	2,50	-0,210	-1,59	-0,96	
224	FTIR	2,62	-0,090	-0,68	-0,41	
227	FTIR	2,90	0,190	1,44	0,87	
228	FTIR	2,62	-0,090	-0,68	-0,41	
229	FTIR	2,74	0,030	0,23	0,14	
230	FTIR	2,79	0,080	0,61	0,37	
232	FTIR	2,81	0,100	0,76	0,46	
233	FTIR	2,90	0,190	1,44	0,87	
235	FTIR	2,78	0,070	0,53	0,32	
236	FTIR	4,40	1,690	12,81	7,75	(*)
237	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
238	FTIR	2,88	0,170	1,29	0,78	
239	FTIR	2,30	-0,410	-3,11	-1,88	
241	FTIR	3,00	0,290	2,20	1,33	
242	FTIR	2,92	0,210	1,59	0,96	
243	FTIR	3,13	0,420	3,18	1,93	
244	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
245	FTIR	2,77	0,060	0,45	0,28	
246	FTIR	2,70	-0,010	-0,08	-0,05	
247	FTIR	3,18	0,470	3,56	2,16	
248	FTIR	1,78	-0,930	-7,05	-4,27	
249	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
251	FTIR	2,60	-0,110	-0,83	-0,50	
253	FTIR	2,90	0,190	1,44	0,87	
254	FTIR	3,00	0,290	2,20	1,33	
255	FTIR	2,87	0,160	1,21	0,73	
256	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
257	FTIR	2,85	0,140	1,06	0,64	
258	FTIR	2,60	-0,110	-0,83	-0,50	
259	FTIR	2,90	0,190	1,44	0,87	
260	FTIR	2,67	-0,040	-0,30	-0,18	
261	FTIR	2,90	0,190	1,44	0,87	
264	FTIR	1,40	-1,310	-9,93	-6,01	(**)
265	FTIR	3,57	0,860	6,52	3,94	
266	FTIR	3,01	0,300	2,27	1,38	
267	FTIR	2,36	-0,350	-2,65	-1,61	
268	FTIR	3,11	0,400	3,03	1,83	
269	FTIR	2,52	-0,190	-1,44	-0,87	
270	FTIR	3,06	0,350	2,65	1,61	
271	FTIR	2,65	-0,060	-0,45	-0,28	
273	FTIR	2,91	0,200	1,52	0,92	
274	FTIR	1,97	-0,740	-5,61	-3,39	
275	FTIR	2,70	-0,010	-0,08	-0,05	
276	FTIR	2,40	-0,310	-2,35	-1,42	
278	FTIR	2,83	0,120	0,91	0,55	
279	FTIR	2,40	-0,310	-2,35	-1,42	
280	FTIR	2,40	-0,310	-2,35	-1,42	
281	FTIR	2,31	-0,400	-3,03	-1,83	
282	FTIR	2,56	-0,150	-1,14	-0,69	
283	FTIR	3,10	0,390	2,96	1,79	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
284	FTIR	2,50	-0,210	-1,59	-0,96	
286	FTIR	2,44	-0,270	-2,05	-1,24	
287	FTIR	2,30	-0,410	-3,11	-1,88	
288	FTIR	2,24	-0,470	-3,56	-2,16	
289	FTIR	2,52	-0,190	-1,44	-0,87	
290	FTIR	2,32	-0,390	-2,96	-1,79	
291	FTIR	2,52	-0,190	-1,44	-0,87	
292	FTIR	2,46	-0,250	-1,89	-1,15	
294	FTIR	2,80	0,090	0,68	0,41	
295	FTIR	2,61	-0,100	-0,76	-0,46	
312	FTIR	2,97	0,260	1,97	1,19	
325	FTIR	2,40	-0,310	-2,35	-1,42	
330	FTIR	2,61	-0,100	-0,76	-0,46	

Der mit (*) markierte Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab.

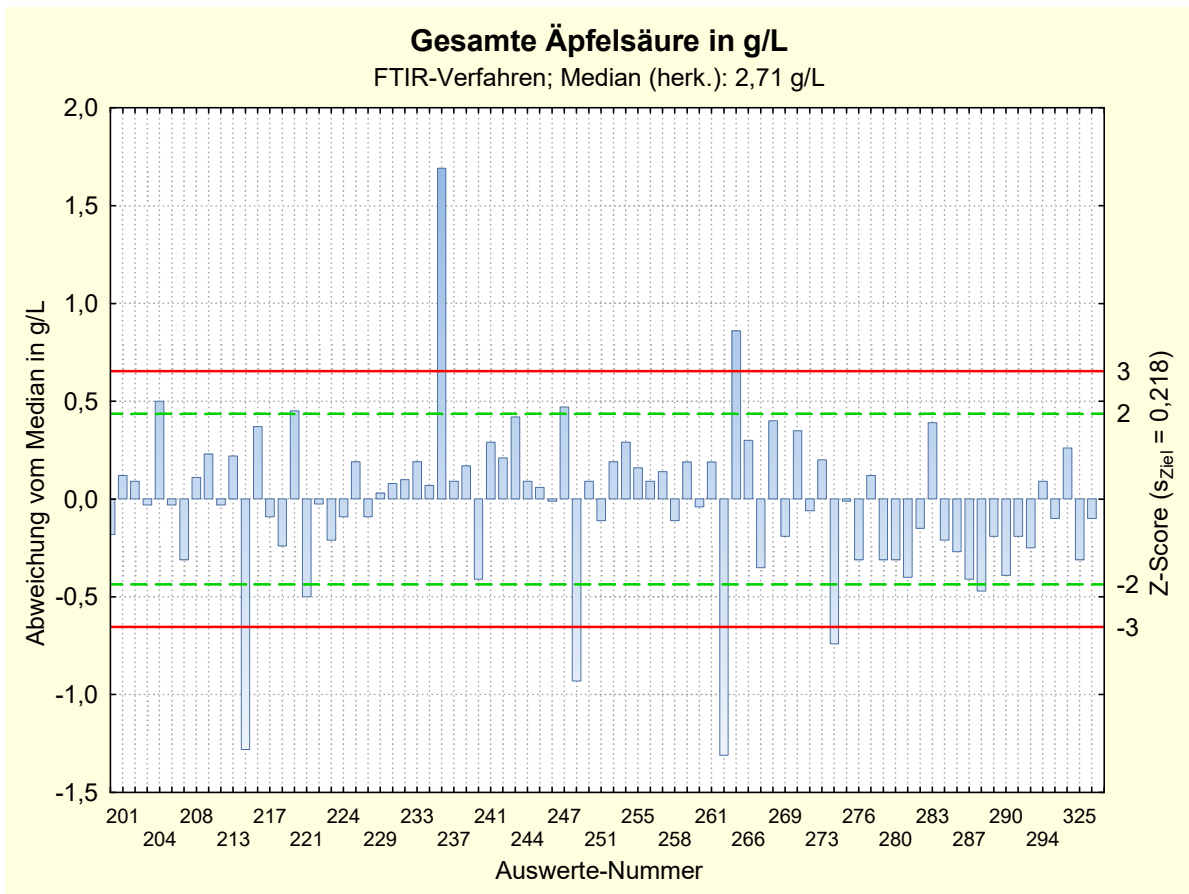
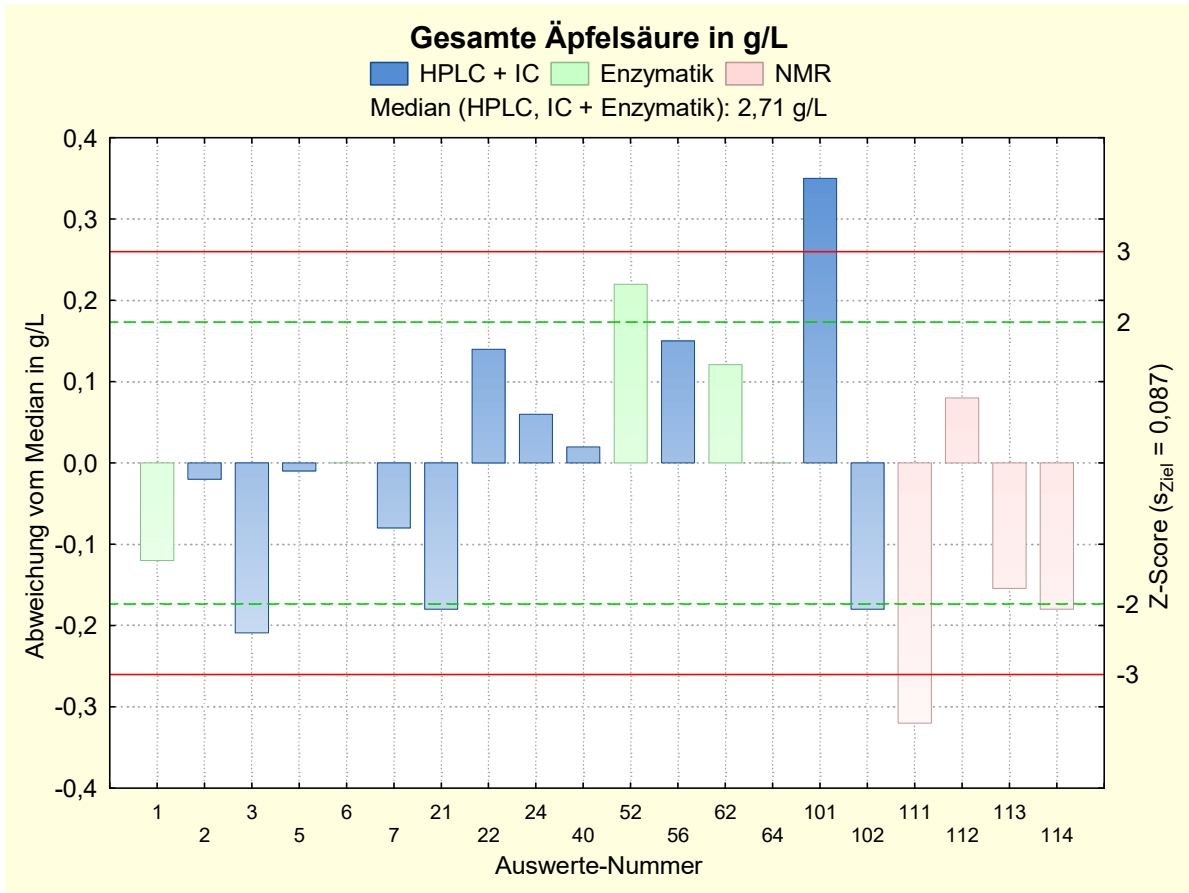
Die mit (**) markierten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

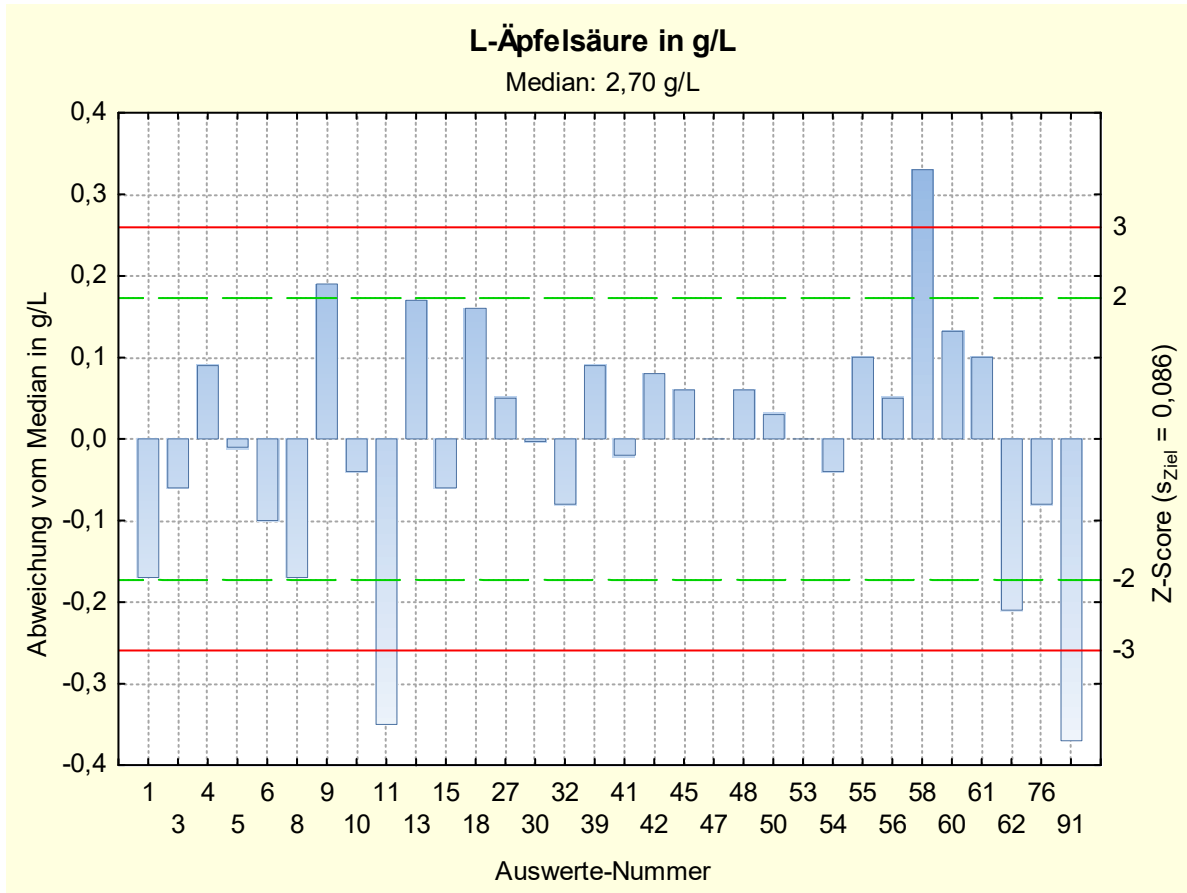
6.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L für:	Gesamte Äpfelsäure (ohne NMR)	
	alle Daten	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	16	32
Minimalwert	2,50	2,33
Mittelwert	2,726	2,698
Median	2,710	2,700
Maximalwert	3,06	3,03
Standardabweichung (s_L)	0,154	0,147
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,039	0,026
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,132	0,132
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,087	0,086
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{FTIR})	0,218	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,17	1,12
Quotient (s_L/s_{exp})	1,78	1,70
Quotient (s_L/s_{FTIR})	0,71	
Quotient (u_M/s_H)	0,29	0,20
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,44	0,30
Quotient (u_M/s_{FTIR})	0,18	

6.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	2,702	0,131
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	3	2,710	0,137
enzymat. Autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisch	2	2,820	0,176
IC	Ionenchromatographie	2	2,781	0,448
	herkömmliche Verfahren	16	2,720	0,160
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	2,707	0,303
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	4	2,566	0,186
enz.(L-), autom.	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	28	2,733	0,100
enz.(L-) Hand	enzymatisch, nur L-Form, manuell	4	2,475	0,097
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	32	2,705	0,128





6.18 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]**6.18.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Bewertungsbasis: Verfahren außer NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	enzymat. Hand	0,337	0,037	1,82	
2	HPLC	0,302	0,002	0,10	
3	IC	0,269	-0,031	-1,52	
4	enzymat. autom.	0,380	0,080	3,93	
5	enzymat. autom.	0,320	0,020	0,98	
7	HPLC	0,200	-0,100	-4,92	
8	enzymat. Hand	0,319	0,019	0,93	
9	enzymat. autom.	0,201	-0,099	-4,87	
10	enzymat. autom.	0,200	-0,100	-4,92	
18	enzymat. autom.	0,300	0,000	0,00	
21	HPLC	0,160	-0,140	-6,88	(**)
22	HPLC	0,260	-0,040	-1,97	
24	HPLC	<= 0			
25	enzymat. Hand	0,093	-0,207	-10,18	(*)
40	HPLC	0,320	0,020	0,98	
52	enzymat. autom.	0,110	-0,190	-9,34	(*)
54	enzymat. autom.	0,302	0,002	0,10	
56	HPLC	0,270	-0,030	-1,47	
60	enzymat. autom.	0,240	-0,060	-2,94	
62	enzymat. Hand	0,520	0,220	10,81	(*)
64	enzymat. Hand	0,575	0,275	13,52	(*)
111	NMR	0,306	0,006	0,29	
112	NMR	0,270	-0,030	-1,47	
113	NMR	0,276	-0,024	-1,20	
114	NMR	0,280	-0,020	-0,98	

6.18.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enz.(L-) Hand	0,104	-0,002	-0,18	-0,07	
3	enz.(L-) autom.	<0,1				
4	enz.(L-) autom.	0,130	0,025	2,93	1,08	
5	enz.(L-) autom.	0,106	0,001	0,06	0,02	
6	enz.(L-) autom.	<0,02				
8	enz.(L-) Hand	0,105	-0,001	-0,06	-0,02	
9	enz.(L-) autom.	0,110	0,005	0,54	0,20	
13	enz.(L-) autom.	<0,2				
15	enz.(L-) autom.	0,100	-0,005	-0,66	-0,24	
18	enz.(L-) autom.	0,100	-0,005	-0,66	-0,24	
27	enz.(L-) autom.	0,100	-0,005	-0,66	-0,24	
30	enz.(L-) autom.	0,067	-0,038	-4,60	-1,70	
32	enz.(L-) autom.	0,110	0,005	0,54	0,20	
39	enz.(L-) autom.	<= 0				
41	enz.(L-) autom.	0,140	0,035	4,12	1,53	
42	enz.(L-) autom.	0,220	0,115	13,68	5,07	(**)
45	enz.(L-) autom.	0,250	0,145	17,26	6,39	(*)
47	enz.(L-) autom.	0,130	0,025	2,93	1,08	
48	enz.(L-) autom.	0,100	-0,005	-0,66	-0,24	
50	enz.(L-) autom.	<= 0				
53	enz.(L-) autom.	0,200	0,095	11,29	4,18	
54	enz.(L-) autom.	0,111	0,006	0,66	0,24	
55	enz.(L-) autom.	0,090	-0,016	-1,85	-0,69	
56	enz.(L-) autom.	0,120	0,015	1,73	0,64	
58	enz.(L-) autom.	0,100	-0,005	-0,66	-0,24	
60	enz.(L-) autom.	0,083	-0,023	-2,70	-1,00	
62	enz.(L-) Hand	0,225	0,120	14,27	5,29	(*)
76	enz.(L-) autom.	0,110	0,005	0,54	0,20	

6.18.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Keine Berechnung von Z-Scores, da der Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereiches.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	-0,110				
202	FTIR	0,310	0,010			
203	FTIR	0,280	-0,020			
204	FTIR	0,630	0,330			(*)
205	FTIR	0,640	0,340			(*)
207	FTIR	0,200	-0,100			
208	FTIR	<= 0				
210	FTIR	0,360	0,060			
211	FTIR	0,020	-0,280			(*)
213	FTIR	<0,2				
215	FTIR	<= 0				
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	0,270	-0,030			
220	FTIR	<= 0				
221	FTIR	0,590	0,290			(*)
222	FTIR	0,202	-0,098			
223	FTIR	0,400	0,100			(**)
224	FTIR	0,040	-0,260			(*)
227	FTIR	0,100	-0,200			(*)
228	FTIR	0,170	-0,130			(**)
229	FTIR	0,280	-0,020			
230	FTIR	<= 0				
232	FTIR	<= 0				
233	FTIR	-0,250				
235	FTIR	0,190	-0,110			
236	FTIR	0,100	-0,200			(*)
237	FTIR	0,100	-0,200			(*)
238	FTIR	<= 0				
239	FTIR	0,060	-0,240			(*)
241	FTIR	-0,610				
242	FTIR	0,070	-0,230			(*)
243	FTIR	0,160	-0,140			(**)
244	FTIR	0,300	0,000			
245	FTIR	0,020	-0,280			(*)
246	FTIR	0,100	-0,200			(*)
247	FTIR	0,260	-0,040			
248	FTIR	-0,160				
249	FTIR	0,300	0,000			
251	FTIR	0,200	-0,100			
253	FTIR	<= 0				
254	FTIR	-0,090				
255	FTIR	<= 0				
256	FTIR	<= 0				
257	FTIR	0,070	-0,230			(*)
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	<= 0				
260	FTIR	0,440	0,140			(*)
261	FTIR	0,180	-0,120			(**)
264	FTIR	0,600	0,300			(*)
265	FTIR	0,600	0,300			(*)
266	FTIR	<= 0				
267	FTIR	-0,090				
268	FTIR	<= 0				
269	FTIR	0,050	-0,250			(*)
270	FTIR	-0,060				
271	FTIR	-0,150				
273	FTIR	-0,110				
274	FTIR	<= 0				
275	FTIR	<= 0				
276	FTIR	0,200	-0,100			
278	FTIR	<= 0				
279	FTIR	0,060	-0,240			(*)
280	FTIR	0,050	-0,250			(*)

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	0,020	-0,280			(*)
282	FTIR	0,130	-0,170			(*)
283	FTIR	<= 0				
284	FTIR	0,333	0,033			
286	FTIR	0,020	-0,280			(*)
287	FTIR	0,070	-0,230			(*)
288	FTIR	0,140	-0,160			(*)
289	FTIR	0,050	-0,250			(*)
290	FTIR	0,260	-0,040			
291	FTIR	0,130	-0,170			(*)
292	FTIR	0,230	-0,070			
294	FTIR	-0,200				
295	FTIR	0,120	-0,180			(*)
312	FTIR	0,340	0,040			
325	FTIR	<= 0				
330	FTIR	0,220	-0,080			

Bei dem Eintrag <= 0 wurde als Ergebnis „0“ mitgeteilt.

Werte mit dem Eintrag „0“ und „-“-Werte sind rot markiert.

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

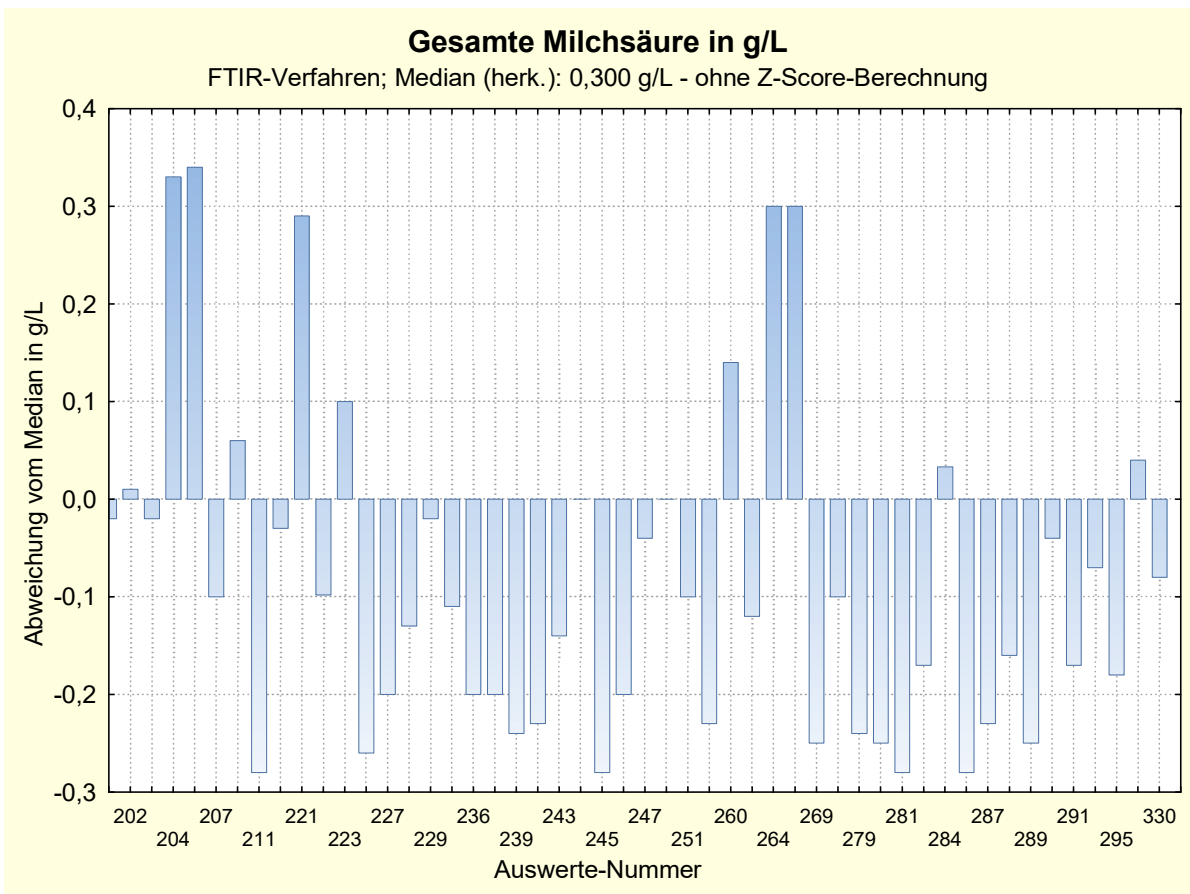
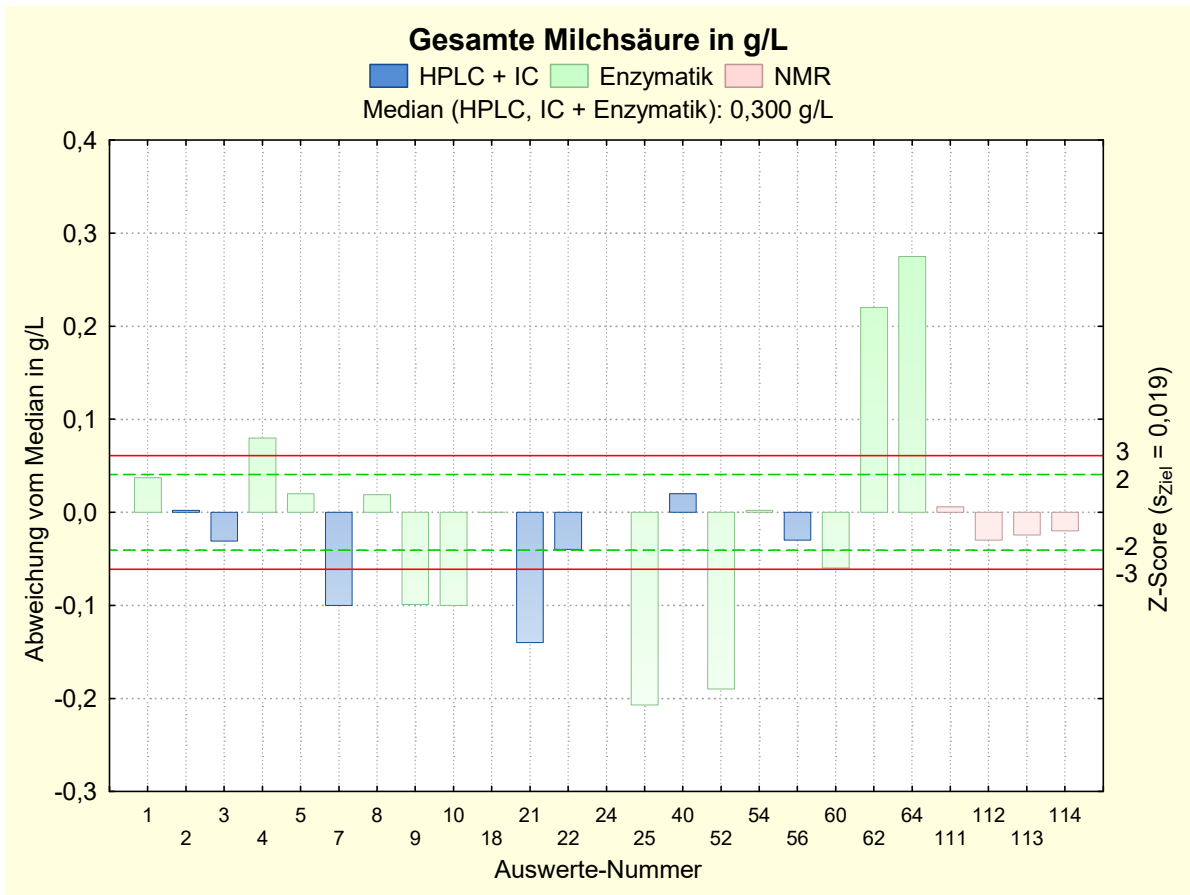
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

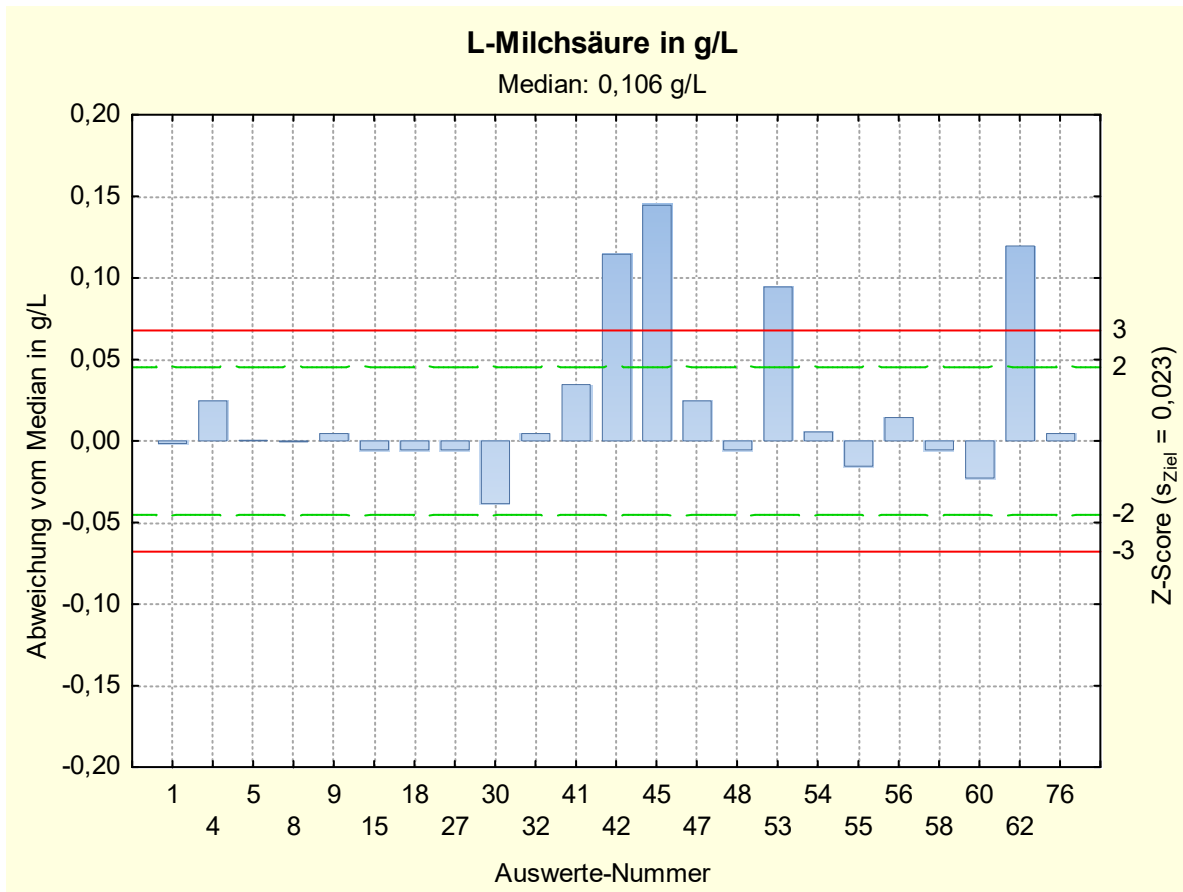
6.18.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L für:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure	
	alle Werte	ber. Werte	alle Werte	ber. Werte
Gültige Werte	16	15	21	20
Minimalwert	0,16	0,20	0,07	0,07
Mittelwert	0,274	0,281	0,116	0,111
Median	0,285	0,300	0,106	0,106
Maximalwert	0,38	0,38	0,22	0,20
Standardabweichung (s _L)	0,060	0,054	0,035	0,027
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,015	0,014	0,008	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,019	0,020	0,008	0,008
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,023	0,023
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,209)	(0,209)		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	3,09	2,65	4,19	3,18
Quotient (s _L /s _{exp})			1,56	1,18
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(0,29)	(0,26)		
Quotient (u _M /s _H)	0,77	0,68	0,91	0,71
Quotient (u _M /s _{exp herk.})			0,34	0,26
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,07)	(0,07)		

6.18.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes	
			Mittel	StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	0,252	0,068
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	8	0,257	0,096
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	5	0,369	0,216
IC	Ionenchromatographie	1	0,269	
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	20	0,275	0,094
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	49	0,198	0,149
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	0,282	0,016
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	0,113	0,025
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	3	0,139	0,068
	alle Verfahren L-Milchsäure	23	0,115	0,026





6.19 Reduktone [mg/L]**6.19.1 Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
5	Acetaldehyd/potent.	49,0	2,00	0,47	
12	Glyoxal/potent.	46,0	-1,00	-0,24	
13	Glyoxal/Stärke	53,0	6,00	1,42	
14	Glyoxal/potent.	46,7	-0,26	-0,06	
15	Glyoxal/Stärke	50,0	3,00	0,71	
16	Propionaldehyd/Stärke	53,0	6,00	1,42	
17	Glyoxal/Stärke	68,0	21,00	4,99	
18	Glyoxal/potent.	47,1	0,10	0,02	
19	Glyoxal/Stärke	43,0	-4,00	-0,95	
20	Glyoxal/Stärke	48,0	1,00	0,24	
21	Glyoxal/potent.	25,0	-22,00	-5,22	(**)
22	Glyoxal/Stärke	46,0	-1,00	-0,24	
23	Glyoxal/Stärke	39,0	-8,00	-1,90	
24	Glyoxal/MTT	36,0	-11,00	-2,61	
25	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
26	Glyoxal/potent.	39,7	-7,31	-1,74	
27	Glyoxal/potent.	43,5	-3,50	-0,83	
29	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
30	Glyoxal/Stärke	43,0	-4,00	-0,95	
31	Glyoxal/potent.	48,0	1,00	0,24	
32	Glyoxal/Stärke	41,0	-6,00	-1,42	
33	Propionaldehyd/Stärke	56,0	9,00	2,14	
34	Propionaldehyd/potent.	51,0	4,00	0,95	
37	Glyoxal/Stärke	48,0	1,00	0,24	
38	Glyoxal/potent.	41,0	-6,00	-1,42	
39	Glyoxal/potent.	49,0	2,00	0,47	
40	Glyoxal/potent.	51,2	4,20	1,00	
41	Glyoxal/Stärke	44,5	-2,50	-0,59	
42	Glyoxal/Stärke	49,0	2,00	0,47	
43	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
44	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
46	Glyoxal/Stärke	49,0	2,00	0,47	
47	Glyoxal/Stärke	52,0	5,00	1,19	
48	Glyoxal/Stärke	46,0	-1,00	-0,24	
49	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
50	Glyoxal/potent.	47,0	0,00	0,00	
51	Glyoxal/Stärke	47,0	0,00	0,00	
54	Glyoxal/MTT	52,4	5,40	1,28	
55	Glyoxal/potent.	44,0	-3,00	-0,71	
56	Acetaldehyd/potent.	48,9	1,90	0,45	
57	Glyoxal/potent.	34,0	-13,00	-3,09	
58	Glyoxal/Stärke	48,0	1,00	0,24	
59	Glyoxal/Stärke	45,0	-2,00	-0,47	
60	Acetaldehyd/potent.	54,7	7,69	1,83	
64	Glyoxal/Stärke	50,0	3,00	0,71	
65	Glyoxal/Stärke	46,0	-1,00	-0,24	
66	Glyoxal/potent.	44,0	-3,00	-0,71	
67	Glyoxal/Stärke	49,0	2,00	0,47	
68	Glyoxal/potent.	50,0	3,00	0,71	
70	Glyoxal/potent.	49,0	2,00	0,47	
76	Acetaldehyd/Stärke	57,0	10,00	2,37	
81	Glyoxal/potent.	41,0	-6,00	-1,42	
82	Glyoxal/potent.	43,0	-4,00	-0,95	
85	Glyoxal/potent.	45,0	-2,00	-0,47	
95	Glyoxal/potent.	43,0	-4,00	-0,95	
121	Acetaldehyd/Stärke	54,0	7,00	1,66	
122	Glyoxal/potent.	46,0	-1,00	-0,24	
123	Propionaldehyd/Stärke	50,0	3,00	0,71	
125	Glyoxal/Stärke	51,0	4,00	0,95	
126	Glyoxal/potent.	49,0	2,00	0,47	
127	Glyoxal/potent.	47,0	0,00	0,00	
128	Glyoxal/potent.	51,0	4,00	0,95	
130	Glyoxal/potent.	43,5	-3,50	-0,83	
131	Glyoxal/Stärke	38,2	-8,80	-2,09	

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
132	Propionaldehyd/Stärke	57,0	10,00	2,37	
134	Glyoxal/potent.	48,0	1,00	0,24	
135	Propionaldehyd/potent.	53,3	6,33	1,50	
136	Glyoxal/Stärke	40,0	-7,00	-1,66	
137	Glyoxal/Stärke	38,3	-8,70	-2,07	
138	Glyoxal/potent.	47,0	0,00	0,00	
139	Glyoxal/potent.	50,0	3,00	0,71	
140	Glyoxal/Stärke	40,0	-7,00	-1,66	
141	Glyoxal/potent.	47,0	0,00	0,00	
142	Propionaldehyd/Stärke	47,0	0,00	0,00	
144	Glyoxal/Stärke	49,0	2,00	0,47	
145	Glyoxal/potent.	45,8	-1,20	-0,28	
146	Glyoxal/Stärke	40,0	-7,00	-1,66	
147	Berechnung (Ascorbinsäure)	40,0	-7,00	-1,66	
149	Glyoxal/Stärke	44,0	-3,00	-0,71	
150	Glyoxal/potent.	55,0	8,00	1,90	
151	Glyoxal/Stärke	48,0	1,00	0,24	
152	Propionaldehyd/Stärke	59,0	12,00	2,85	
153	Glyoxal/Stärke	50,0	3,00	0,71	
154	Glyoxal/Stärke	50,0	3,00	0,71	
132	Propionaldehyd/Stärke	57,0	10,00	2,37	
134	Glyoxal/potent.	48,0	1,00	0,24	
135	Propionaldehyd/potent.	53,3	6,33	1,50	

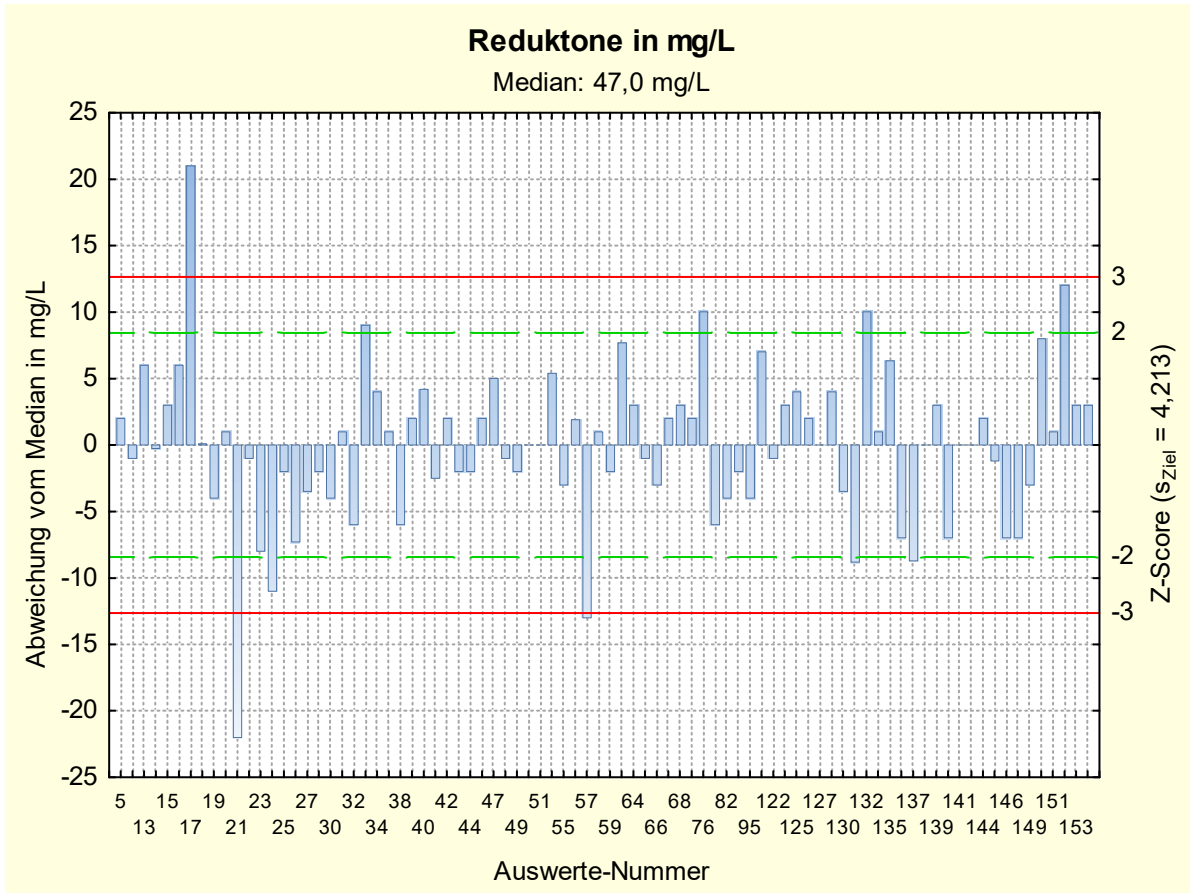
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.19.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone in mg/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	84	83
Minimalwert	25,0	34,0
Mittelwert	46,94	47,20
Median	47,00	47,00
Maximalwert	68,0	68,0
Standardabweichung (s _L)	5,890	5,401
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,643	0,593
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	4,213	4,213
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,40	1,28
Quotient (s _L /s _{exp})		
Quotient (u _M /s _H)	0,15	0,14
Quotient (u _M / s _{exp} herk.)		

6.19.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	2	55,500	2,406
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	3	50,478	3,002
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	6	53,667	5,155
Propionaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Platinelektrode	2	52,165	1,868
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	37	46,086	4,503
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	31	45,972	3,872
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Farbreaktion mit MTT	2	44,200	13,150
Sonstige	Berechnung über Ascorbinsäuregehalt	1	40,000	
	alle Verfahren	84	46,961	4,973



6.20 Freie Schweflige Säure [mg/L]**6.20.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR**

Bewertungsbasis: Destillations- und photometrische Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	LwK 6.2	45,0	-6,00	-1,33	
4	LwK 6.3	56,0	5,00	1,11	
5	LwK 6.2	47,9	-3,10	-0,69	
6	LwK 6.2	46,4	-4,60	-1,02	
8	LwK 6.2	48,0	-3,00	-0,66	
9	LwK 6.2	49,3	-1,70	-0,38	
13	LwK 6.3	57,0	6,00	1,33	
28	LwK 6.2	52,4	1,36	0,30	
36	LwK 6.3	54,0	3,00	0,66	
45	LwK 6.3	59,0	8,00	1,77	
47	LwK 6.3	44,0	-7,00	-1,55	
48	LwK 6.3	62,8	11,80	2,61	
52	LwK 6.3	52,0	1,00	0,22	
53	LwK 6.4	50,0	-1,00	-0,22	
54	LwK 6.4	46,2	-4,80	-1,06	
58	LwK 6.3	47,0	-4,00	-0,89	
61	LwK 6.4	51,0	0,00	0,00	
62	LwK 6.2	61,9	10,90	2,41	
102	LwK 6.3	48,0	-3,00	-0,66	
124	LwK 6.3	54,0	3,00	0,66	
129	LwK 6.3	51,0	0,00	0,00	
143	LwK 6.3	52,0	1,00	0,22	
147	LwK 6.3	59,0	8,00	1,77	
202	LwK 6.5	68,5	17,50	3,88	
205	LwK 6.5	45,0	-6,00	-1,33	
208	LwK 6.5	62,4	11,40	2,52	
210	LwK 6.5	49,4	-1,60	-0,35	
213	LwK 6.5	60,0	9,00	1,99	
215	LwK 6.5	51,5	0,50	0,11	
219	LwK 6.5	67,0	16,00	3,54	
220	LwK 6.5	67,8	16,80	3,72	
221	LwK 6.5	61,0	10,00	2,21	
224	LwK 6.5	58,0	7,00	1,55	
228	LwK 6.5	50,8	-0,18	-0,04	
237	LwK 6.5	58,0	7,00	1,55	
238	LwK 6.5	45,0	-6,00	-1,33	
244	LwK 6.5	49,0	-2,00	-0,44	
249	LwK 6.5	62,0	11,00	2,44	
251	LwK 6.5	48,0	-3,00	-0,66	
255	LwK 6.5	45,0	-6,00	-1,33	
262	LwK 6.5	66,7	15,73	3,48	
263	LwK 6.5	37,5	-13,50	-2,99	
264	LwK 6.5	51,0	0,00	0,00	
265	LwK 6.5	58,0	7,00	1,55	
266	LwK 6.5	59,0	8,00	1,77	
269	LwK 6.5	74,0	23,00	5,09	(**)
275	LwK 6.5	48,0	-3,00	-0,66	
276	LwK 6.5	48,0	-3,00	-0,66	
277	LwK 6.5	41,0	-10,00	-2,21	
278	LwK 6.5	54,0	3,00	0,66	
330	LwK 6.5	56,0	5,00	1,11	

6.20.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
15	LwK 6.1 (incl. Red.)	93,0	1,00	0,13	
16	LwK 6.1 (incl. Red.)	87,0	-5,00	-0,67	
17	LwK 6.1 (incl. Red.)	98,0	6,00	0,81	
20	LwK 6.1 (incl. Red.)	100,0	8,00	1,07	
23	LwK 6.1 (incl. Red.)	95,0	3,00	0,40	
29	LwK 6.1 (incl. Red.)	82,0	-10,00	-1,34	
30	LwK 6.1 (incl. Red.)	90,0	-2,00	-0,27	
33	LwK 6.1 (incl. Red.)	98,0	6,00	0,81	
41	LwK 6.1 (incl. Red.)	90,0	-2,00	-0,27	
42	LwK 6.1 (incl. Red.)	98,0	6,00	0,81	
51	LwK 6.1 (incl. Red.)	88,0	-4,00	-0,54	
55	LwK 6.1 (incl. Red.)	104,0	12,00	1,61	
57	LwK 6.1 (incl. Red.)	97,0	5,00	0,67	
65	LwK 6.1 (incl. Red.)	95,0	3,00	0,40	
70	LwK 6.1 (incl. Red.)	90,0	-2,00	-0,27	
76	LwK 6.1 (incl. Red.)	102,0	10,00	1,34	
77	LwK 6.1 (incl. Red.)	54,0	-38,00	-5,10	(**)
81	Redox (incl. Red.)	78,0	-14,00	-1,88	
82	Redox (incl. Red.)	80,0	-12,00	-1,61	
85	LwK 6.1 (incl. Red.)	91,0	-1,00	-0,13	
94	LwK 6.1 (incl. Red.)	70,0	-22,00	-2,95	
130	LwK 6.1 (incl. Red.)	99,8	7,80	1,05	
137	LwK 6.1 (incl. Red.)	83,9	-8,10	-1,09	
144	LwK 6.1 (incl. Red.)	89,0	-3,00	-0,40	
148	LwK 6.1 (incl. Red.)	54,0	-38,00	-5,10	(**)
152	LwK 6.1 (incl. Red.)	92,0	0,00	0,00	
154	LwK 6.1 (incl. Red.)	96,0	4,00	0,54	

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

6.20.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score	Z-Score	Hinweis
				Horwitz	SH incl. Red.	
12	LwK 6.1 (excl. Red.)	51,0	5,00	1,21	0,67	
14	LwK 6.1 (excl. Red.)	52,5	6,50	1,57	0,87	
18	LwK 6.1 (excl. Red.)	45,5	-0,50	-0,12	-0,07	
19	LwK 6.1 (excl. Red.)	52,0	6,00	1,45	0,81	
21	LwK 6.1 (excl. Red.)	64,0	18,00	4,35	2,42	
22	LwK 6.1 (excl. Red.)	54,0	8,00	1,93	1,07	
24	LwK 6.1 (excl. Red.)	56,0	10,00	2,42	1,34	
25	LwK 6.1 (excl. Red.)	47,0	1,00	0,24	0,13	
26	LwK 6.1 (excl. Red.)	50,9	4,94	1,19	0,66	
27	LwK 6.1 (excl. Red.)	50,5	4,50	1,09	0,60	
31	LwK 6.1 (excl. Red.)	56,0	10,00	2,42	1,34	
32	LwK 6.1 (excl. Red.)	54,0	8,00	1,93	1,07	
34	LwK 6.1 (excl. Red.)	43,0	-3,00	-0,73	-0,40	
37	LwK 6.1 (excl. Red.)	42,0	-4,00	-0,97	-0,54	
38	LwK 6.1 (excl. Red.)	46,0	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl. Red.)	46,0	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 6.1 (excl. Red.)	45,3	-0,70	-0,17	-0,09	
43	LwK 6.1 (excl. Red.)	41,0	-5,00	-1,21	-0,67	
44	LwK 6.1 (excl. Red.)	48,0	2,00	0,48	0,27	
46	LwK 6.1 (excl. Red.)	47,0	1,00	0,24	0,13	
49	LwK 6.1 (excl. Red.)	55,0	9,00	2,18	1,21	
50	LwK 6.1 (excl. Red.)	44,0	-2,00	-0,48	-0,27	
56	LwK 6.1 (excl. Red.)	43,6	-2,40	-0,58	-0,32	
59	LwK 6.1 (excl. Red.)	43,0	-3,00	-0,73	-0,40	
60	LwK 6.1 (excl. Red.)	37,8	-8,24	-1,99	-1,11	
64	LwK 6.1 (excl. Red.)	42,0	-4,00	-0,97	-0,54	
66	LwK 6.1 (excl. Red.)	46,0	0,00	0,00	0,00	
67	LwK 6.1 (excl. Red.)	47,0	1,00	0,24	0,13	
68	LwK 6.1 (excl. Red.)	45,0	-1,00	-0,24	-0,13	
71	LwK 6.1 (excl. Red.)	59,0	13,00	3,14	1,74	
95	LwK 6.1 (excl. Red.)	50,0	4,00	0,97	0,54	
121	LwK 6.1 (excl. Red.)	39,0	-7,00	-1,69	-0,94	
122	LwK 6.1 (excl. Red.)	37,0	-9,00	-2,18	-1,21	
123	LwK 6.1 (excl. Red.)	42,0	-4,00	-0,97	-0,54	
125	LwK 6.1 (excl. Red.)	41,0	-5,00	-1,21	-0,67	
126	LwK 6.1 (excl. Red.)	39,0	-7,00	-1,69	-0,94	
127	LwK 6.1 (excl. Red.)	38,0	-8,00	-1,93	-1,07	
128	LwK 6.1 (excl. Red.)	45,0	-1,00	-0,24	-0,13	
131	LwK 6.1 (excl. Red.)	49,0	3,00	0,73	0,40	
132	LwK 6.1 (excl. Red.)	43,0	-3,00	-0,73	-0,40	
133	LwK 6.1 (excl. Red.)	45,0	-1,00	-0,24	-0,13	
134	LwK 6.1 (excl. Red.)	35,0	-11,00	-2,66	-1,48	
135	LwK 6.1 (excl. Red.)	38,7	-7,34	-1,77	-0,98	
136	LwK 6.1 (excl. Red.)	60,0	14,00	3,38	1,88	
138	LwK 6.1 (excl. Red.)	50,0	4,00	0,97	0,54	
139	LwK 6.1 (excl. Red.)	36,0	-10,00	-2,42	-1,34	
140	LwK 6.1 (excl. Red.)	40,0	-6,00	-1,45	-0,81	
141	LwK 6.1 (excl. Red.)	47,0	1,00	0,24	0,13	
142	LwK 6.1 (excl. Red.)	41,0	-5,00	-1,21	-0,67	
145	LwK 6.1 (excl. Red.)	46,2	0,20	0,05	0,03	
146	LwK 6.1 (excl. Red.)	48,0	2,00	0,48	0,27	
149	LwK 6.1 (excl. Red.)	55,0	9,00	2,18	1,21	
150	LwK 6.1 (excl. Red.)	42,0	-4,00	-0,97	-0,54	
151	LwK 6.1 (excl. Red.)	56,0	10,00	2,42	1,34	
153	LwK 6.1 (excl. Red.)	47,0	1,00	0,24	0,13	

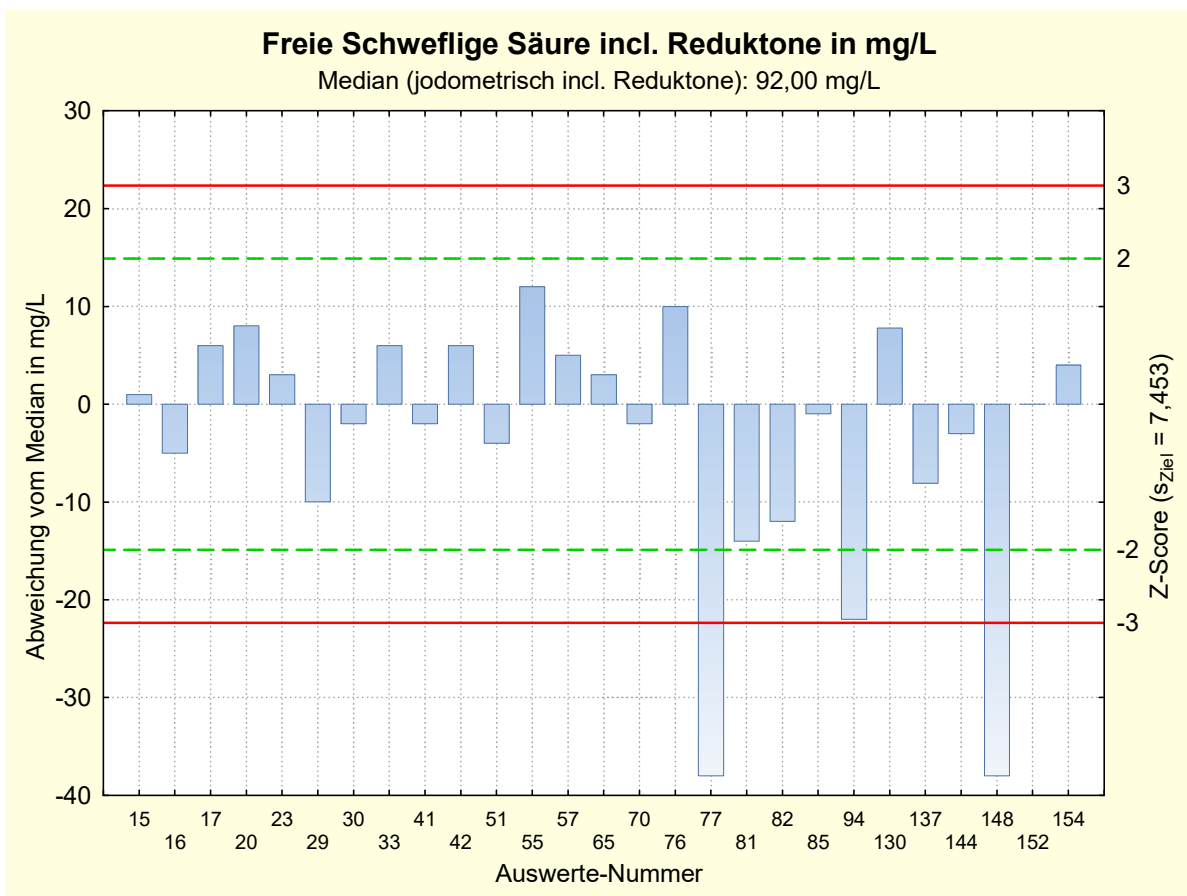
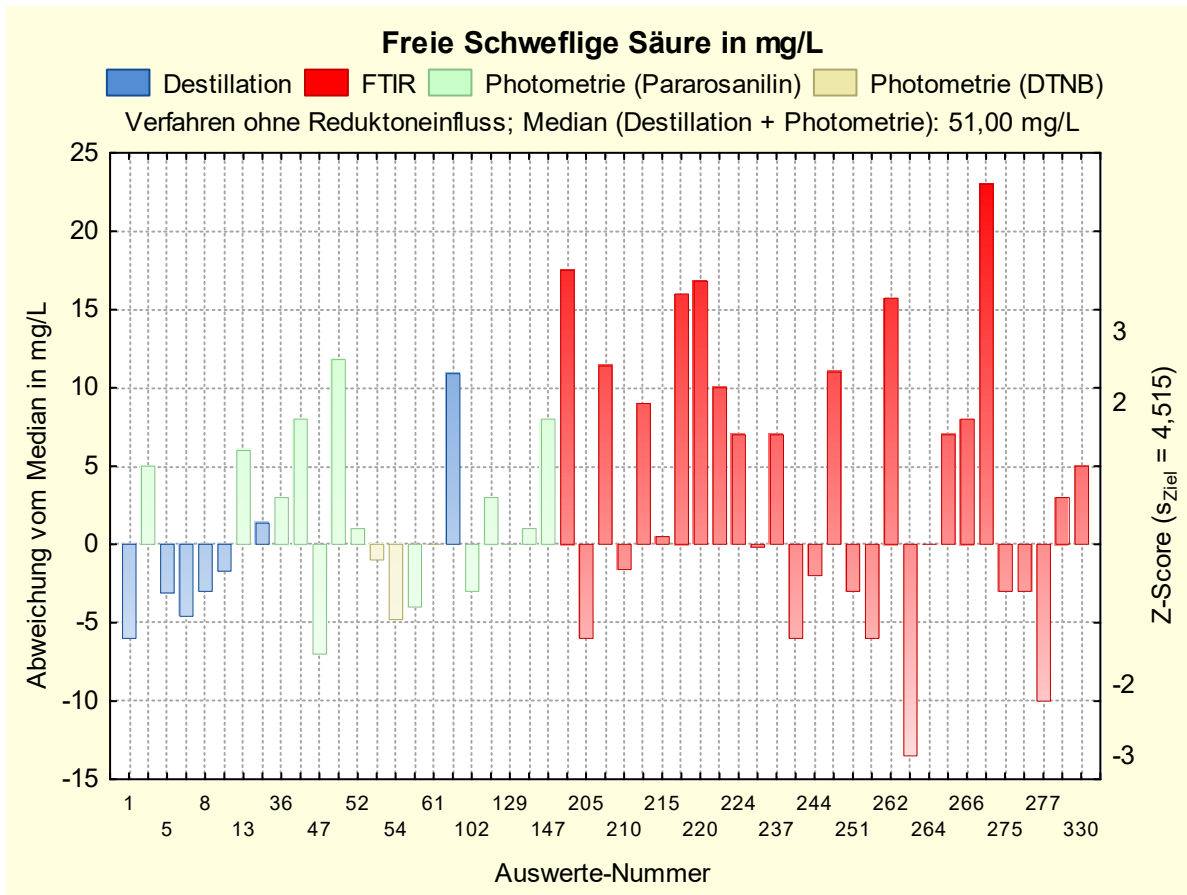
SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone

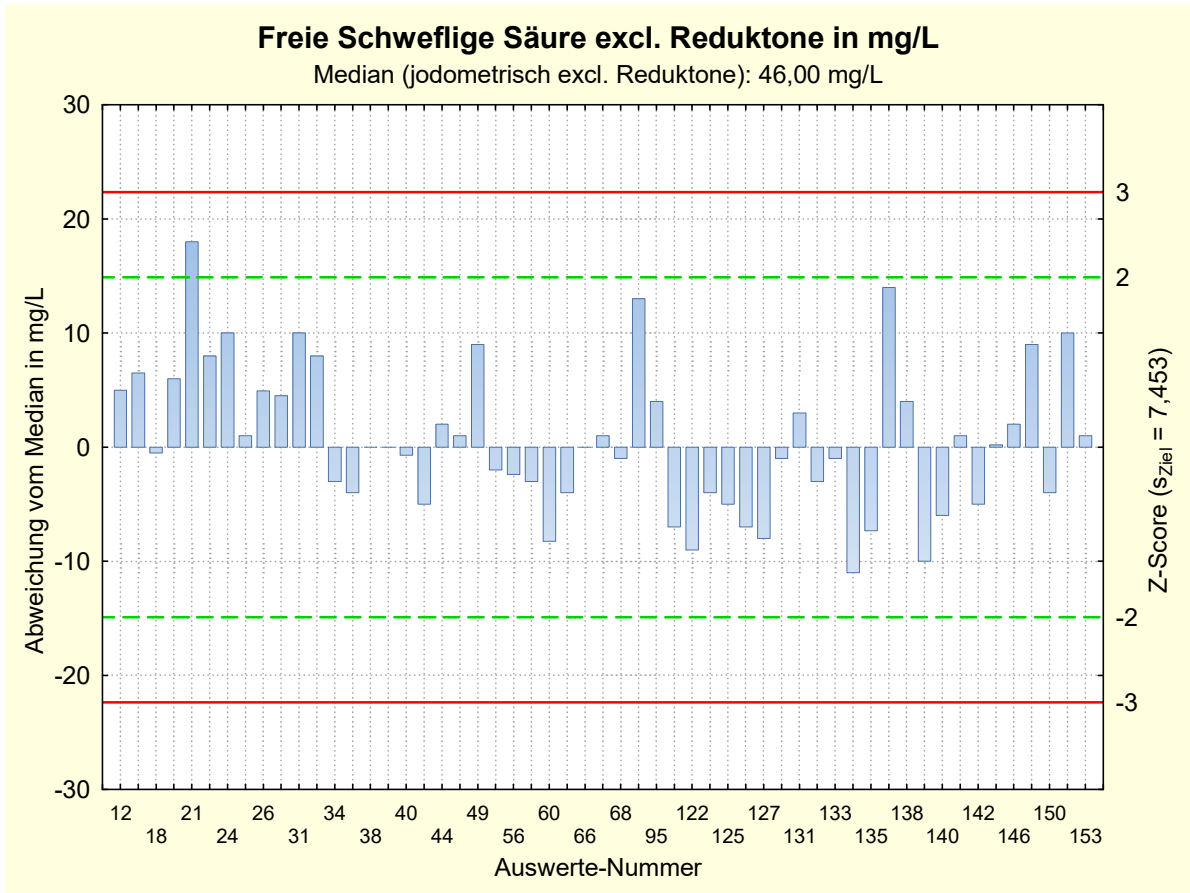
6.20.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	jodometrisch Reduktone		
		inclusive alle Daten	ber. Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	23	27	25	55
Minimalwert	44,0	54,0	70,0	35,0
Mittelwert	51,91	88,69	91,47	46,62
Median	51,00	91,00	92,00	46,00
Maximalwert	62,8	104,0	104,0	64,0
Standardabweichung (s_L)	5,337	12,683	8,120	6,471
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,113	2,441	1,624	0,873
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	4,515	7,384	7,453	4,136
- n. Horwitz incl. Reduktone (s_H incl. Red.)				7,453
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,18	1,72	1,09	1,56
Quotient (s_L/s_{exp})				0,87
Quotient (u_M/s_H)	0,25	0,33	0,22	0,21
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)				0,12

6.20.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox (incl. Red.)	Jodometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der elektrometr. Endpunktbest., ohne Abzug der Reduktone	2	79,00	1,604
LwK 6.1 (incl. Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	25	91,93	8,033
LwK 6.1 (excl. Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B mit Abzug der Reduktone	55	46,38	6,640
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	48,92	3,560
LwK 6.3	Pararosanilimethode (auch automatisiert)	13	53,58	5,725
LwK 6.4	photometrisch mit DTNB (auch automatisiert)	3	49,26	2,498
	Destillations- und photometrische Verfahren	23	51,58	5,378
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	28	55,01	9,830





6.21 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]**6.21.1 Laborergebnisse**

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 7.3	240,0	-17,00	-0,95	-3,17	
4	LwK 7.7	273,0	16,00	0,90	2,99	
5	LwK 7.3	266,0	9,00	0,50	1,68	
6	LwK 7.3	268,8	11,80	0,66	2,20	
7	LwK 7.4.2 mod.	248,0	-9,00	-0,50	-1,68	
8	LwK 7.3	257,0	0,00	0,00	0,00	
9	LwK 7.3	243,0	-14,00	-0,78	-2,61	
10	LwK 7.3	261,4	4,40	0,25	0,82	
12	LwK 7.3	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
13	LwK 7.4.2	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
14	LwK 7.4.2	261,0	4,00	0,22	0,75	
15	LwK 7.4.1	237,0	-20,00	-1,12	-3,73	
16	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	255,0	-2,00	-0,11	-0,37	
17	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	224,0	-33,00	-1,85	-6,16	(**)
18	LwK 7.3	245,4	-11,60	-0,65	-2,17	
19	LwK 7.4.2	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
20	LwK 7.4.2	252,0	-5,00	-0,28	-0,93	
21	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	279,0	22,00	1,23	4,11	
22	LwK 7.4.2 mod.	262,0	5,00	0,28	0,93	
23	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	32,00	1,79	5,97	(**)
24	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	222,0	-35,00	-1,96	-6,53	(**)
25	LwK 7.4.2	251,0	-6,00	-0,34	-1,12	
26	LwK 7.4.2	261,0	4,00	0,22	0,75	
27	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	-8,00	-0,45	-1,49	
28	LwK 7.3	271,3	14,28	0,80	2,67	
29	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	276,0	19,00	1,07	3,55	
30	LwK 7.4.1	257,0	0,00	0,00	0,00	
31	LwK 7.4.1	228,0	-29,00	-1,63	-5,41	(**)
32	LwK 7.4.1	254,0	-3,00	-0,17	-0,56	
33	LwK 7.4.2	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
34	LwK 7.4.2	249,0	-8,00	-0,45	-1,49	
36	LwK 7.7	227,0	-30,00	-1,68	-5,60	(**)
37	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	266,0	9,00	0,50	1,68	
38	LwK 7.4.1	237,0	-20,00	-1,12	-3,73	
39	LwK 7.7	240,0	-17,00	-0,95	-3,17	
40	LwK 7.4.2	261,0	4,00	0,22	0,75	
41	LwK 7.4.1	261,0	4,00	0,22	0,75	
42	LwK 7.4.1	238,0	-19,00	-1,07	-3,55	
43	LwK 7.4.2	258,0	1,00	0,06	0,19	
44	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	233,0	-24,00	-1,35	-4,48	
45	LwK 7.4.2	259,0	2,00	0,11	0,37	
46	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	261,0	4,00	0,22	0,75	
47	LwK 7.6	256,0	-1,00	-0,06	-0,19	
48	LwK 7.7	233,6	-23,40	-1,31	-4,37	
49	LwK 7.4.2	241,0	-16,00	-0,90	-2,99	
50	LwK 7.4.2	228,0	-29,00	-1,63	-5,41	(**)
51	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	32,00	1,79	5,97	(**)
52	LwK 7.7	241,0	-16,00	-0,90	-2,99	
53	LwK 7.7	260,0	3,00	0,17	0,56	
54	LwK 7.7	251,3	-5,70	-0,32	-1,06	
55	LwK 7.4.2	257,0	0,00	0,00	0,00	
56	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	267,0	10,00	0,56	1,87	
57	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	295,0	38,00	2,13	7,09	(**)
58	LwK 7.6	190,0	-67,00	-3,76	-12,51	(**)
59	LwK 7.4.2	256,0	-1,00	-0,06	-0,19	
60	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	265,3	8,26	0,46	1,54	
61	LwK 7.7	250,0	-7,00	-0,39	-1,31	
62	LwK 7.3	255,2	-1,80	-0,10	-0,34	
64	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	247,0	-10,00	-0,56	-1,87	
65	LwK 7.5.3 (incl. Red.)	290,0	33,00	1,85	6,16	(**)
66	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	222,0	-35,00	-1,96	-6,53	(**)
67	LwK 7.4.1	281,0	24,00	1,35	4,48	
68	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	242,0	-15,00	-0,84	-2,80	

Fortsetzung: Laborergebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
70	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	240,0	-17,00	-0,95	-3,17	
71	LwK 7.4.2	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
76	LwK 7.4.1	254,0	-3,00	-0,17	-0,56	
77	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	258,0	1,00	0,06	0,19	
81	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	32,00	1,79	5,97	(**)
82	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	287,0	30,00	1,68	5,60	(**)
85	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	301,0	44,00	2,47	8,21	(**)
94	LwK 7.4.2 mod.	260,0	3,00	0,17	0,56	
95	LwK 7.4.2	262,0	5,00	0,28	0,93	
102	LwK 7.6	288,0	31,00	1,74	5,79	(**)
121	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	-8,00	-0,45	-1,49	
122	LwK 7.3	260,0	3,00	0,17	0,56	
123	LwK 7.3	262,0	5,00	0,28	0,93	
124	LwK 7.6	253,0	-4,00	-0,22	-0,75	
125	LwK 7.4.2	261,5	4,50	0,25	0,84	
126	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	246,0	-11,00	-0,62	-2,05	
127	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	252,0	-5,00	-0,28	-0,93	
128	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	266,0	9,00	0,50	1,68	
129	LwK 7.7	260,0	3,00	0,17	0,56	
130	LwK 7.4.2 mod.	264,0	7,00	0,39	1,31	
131	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	267,9	10,90	0,61	2,03	
132	LwK 7.3m2	248,0	-9,00	-0,50	-1,68	
133	LwK 7.2	264,0	7,00	0,39	1,31	
134	LwK 7.3	258,0	1,00	0,06	0,19	
135	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	237,2	-19,81	-1,11	-3,70	
136	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	240,0	-17,00	-0,95	-3,17	
137	LwK 7.3	300,0	43,00	2,41	8,03	(**)
138	LwK 7.4.2	261,0	4,00	0,22	0,75	
139	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	241,0	-16,00	-0,90	-2,99	
140	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	224,0	-33,00	-1,85	-6,16	(**)
141	LwK 7.4.1	219,0	-38,00	-2,13	-7,09	(**)
142	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	-8,00	-0,45	-1,49	
143	LwK 7.4.1	257,0	0,00	0,00	0,00	
144	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	287,0	30,00	1,68	5,60	(**)
145	LwK 7.7	263,8	6,80	0,38	1,27	
146	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	225,0	-32,00	-1,79	-5,97	(**)
147	LwK 7.4.1	254,0	-3,00	-0,17	-0,56	
148	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	260,0	3,00	0,17	0,56	
149	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	219,0	-38,00	-2,13	-7,09	(**)
150	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	245,0	-12,00	-0,67	-2,24	
151	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	259,0	2,00	0,11	0,37	
152	LwK 7.4.1	256,0	-1,00	-0,06	-0,19	
153	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	217,0	-40,00	-2,24	-7,47	(**)
154	LwK 7.4.1	258,0	1,00	0,06	0,19	

6.21.2 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Schweflige Säure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
202	LwK 7.8	236,8	-20,20	-1,13	
205	LwK 7.8	247,0	-10,00	-0,56	
207	LwK 7.8	168,0	-89,00	-4,99	
208	LwK 7.8	239,0	-18,00	-1,01	
210	LwK 7.8	263,9	6,93	0,39	
213	LwK 7.8	257,0	0,00	0,00	
215	LwK 7.8	264,0	7,00	0,39	
219	LwK 7.8	240,0	-17,00	-0,95	
220	LwK 7.8	233,0	-24,00	-1,35	
221	LwK 7.8	290,0	33,00	1,85	
222	FTIR (direkt)	215,0	-42,00	-2,35	
224	LwK 7.8	212,0	-45,00	-2,52	
228	LwK 7.8	262,3	5,33	0,30	
237	LwK 7.8	243,0	-14,00	-0,78	
238	LwK 7.8	287,0	30,00	1,68	
244	LwK 7.8	248,0	-9,00	-0,50	
249	LwK 7.8	194,0	-63,00	-3,53	
251	LwK 7.8	235,0	-22,00	-1,23	
255	LwK 7.8	254,0	-3,00	-0,17	
262	LwK 7.8	262,7	5,70	0,32	
263	LwK 7.8	262,0	5,00	0,28	
264	LwK 7.8	226,0	-31,00	-1,74	
265	LwK 7.8	278,0	21,00	1,18	
266	LwK 7.8	238,0	-19,00	-1,07	
269	LwK 7.8	204,0	-53,00	-2,97	
275	LwK 7.8	261,0	4,00	0,22	
276	LwK 7.8	189,0	-68,00	-3,81	
277	LwK 7.8	213,0	-44,00	-2,47	
278	LwK 7.8	231,0	-26,00	-1,46	
330	LwK 7.8	193,0	-64,00	-3,59	

6.21.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Bewertung nur zur Information

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	255,0	-32,00	-1,63	-5,97	
17	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	224,0	-63,00	-3,22	-11,76	(**)
23	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	2,00	0,10	0,37	
29	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	276,0	-11,00	-0,56	-2,05	
51	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	2,00	0,10	0,37	
57	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	295,0	8,00	0,41	1,49	
64	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	247,0	-40,00	-2,04	-7,47	(**)
65	LwK 7.5.3 (incl. Red.)	290,0	3,00	0,15	0,56	
70	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	240,0	-47,00	-2,40	-8,77	(**)
77	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	258,0	-29,00	-1,48	-5,41	
81	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	289,0	2,00	0,10	0,37	
82	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	287,0	0,00	0,00	0,00	
85	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	301,0	14,00	0,71	2,61	
144	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	287,0	0,00	0,00	0,00	
148	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	260,0	-27,00	-1,38	-5,04	

6.21.4 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Bewertung nur zur Information

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
21	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	279,0	31,50	1,82	5,88	(**)
24	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	222,0	-25,50	-1,48	-4,76	
27	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	1,50	0,09	0,28	
37	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	266,0	18,50	1,07	3,45	
44	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	233,0	-14,50	-0,84	-2,71	
46	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	261,0	13,50	0,78	2,52	
56	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	267,0	19,50	1,13	3,64	
60	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	265,3	17,76	1,03	3,32	
66	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	222,0	-25,50	-1,48	-4,76	
68	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	242,0	-5,50	-0,32	-1,03	
121	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	1,50	0,09	0,28	
126	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	246,0	-1,50	-0,09	-0,28	
127	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	252,0	4,50	0,26	0,84	
128	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	266,0	18,50	1,07	3,45	
131	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	267,9	20,40	1,18	3,81	
135	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	237,2	-10,31	-0,60	-1,92	
136	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	240,0	-7,50	-0,43	-1,40	
139	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	241,0	-6,50	-0,38	-1,21	
140	LwK 7.5.2 (excl. Red.)	224,0	-23,50	-1,36	-4,39	
142	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	249,0	1,50	0,09	0,28	
146	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	225,0	-22,50	-1,30	-4,20	
149	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	219,0	-28,50	-1,65	-5,32	(**)
150	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	245,0	-2,50	-0,14	-0,47	
151	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	259,0	11,50	0,67	2,15	
153	LwK 7.5.1 (excl. Red.)	217,0	-30,50	-1,77	-5,69	(**)

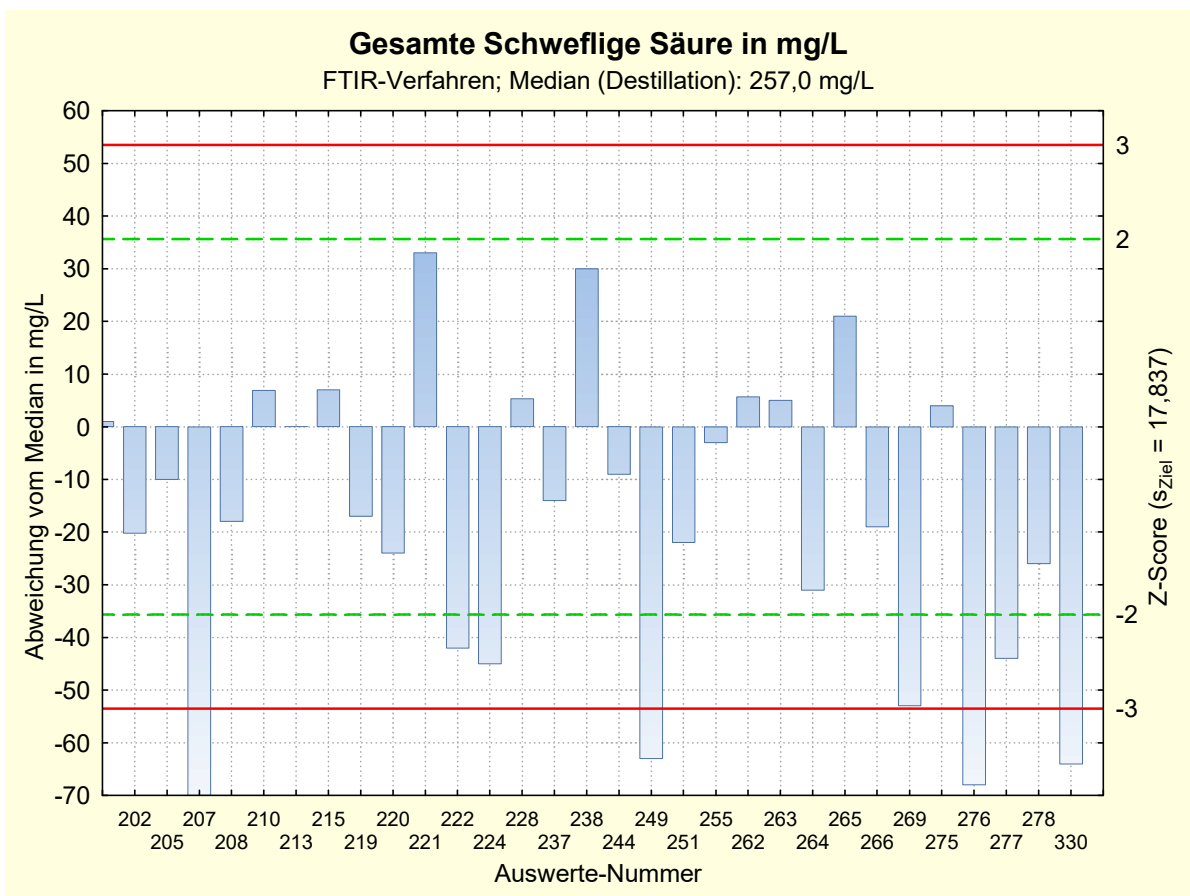
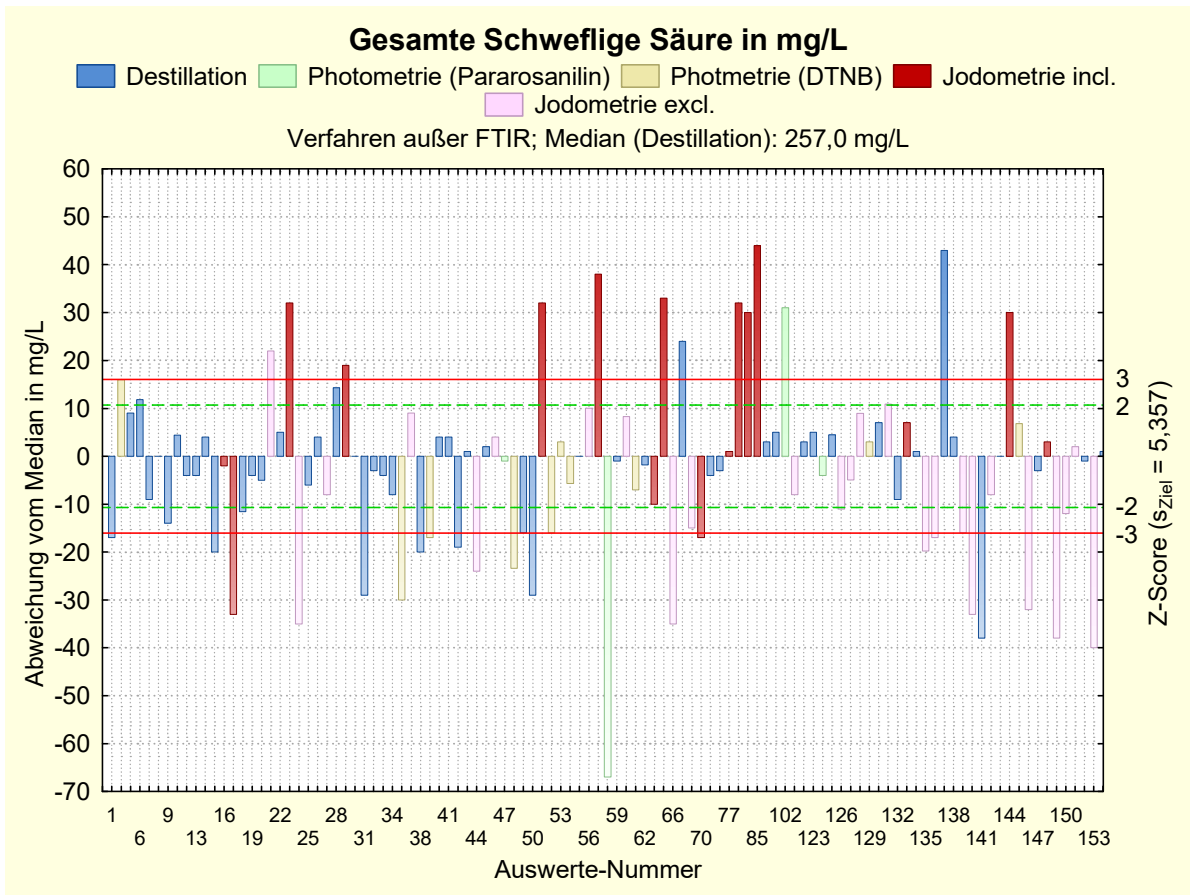
Die mit (**) gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.21.5 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] ber. Daten	Destillation	Jodometrie, Reduktone	
		inclusive	exclusive
Gültige Werte	47	13	22
Minimalwert	237,0	255,0	222,0
Mittelwert	255,78	280,00	246,74
Median	257,00	287,00	247,50
Maximalwert	281,0	301,0	267,9
Standardabweichung (s_L)	8,789	15,513	15,334
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,282	4,303	3,269
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	17,837	19,591	17,275
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,49	0,79	0,89
Quotient (s_L/s_{exp})	1,64	2,90	2,86
Quotient (u_M/s_H)	0,07	0,22	0,19
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,24	0,80	0,61

6.21.6 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	14	258,55	11,623
LwK 7.3m2	Wasserdampfdestillation mit Gerhardt-Apparatur	1	248,00	
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	14	249,69	14,691
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	19	255,54	5,796
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein modifiziert	4	258,51	8,123
	alle Destillationsverfahren (ohne LwK 7.3m2)	51	255,16	9,345
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	10	273,55	23,708
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	4	270,00	28,971
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Reduktonabzug	1	290,00	
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	22	247,16	20,678
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	3	235,41	10,017
LwK 7.6	Pararosanilinverfahren	4	246,75	46,507
LwK 7.7	DTNB-Verfahren (z. B. FOSS FIAStar)	10	250,08	16,267
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	29	239,90	31,458
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Flüssigkeit	1	215,00	



6.22 Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes (wie mitgeteilt)
6	Farbe/Klarheit: Lachsfarben, klar; Geruch: kräuterig, Dill, esterig. Aceton, Lackton, süß-pomadiger/sirupartiger Geruch, nach flüchtiger Säure; Geschmack: belegend, adstringierend, stumpf, scharfe Säureerscheinung, brenzlich, Geruch setzt sich im Geschmack fort. Gesamtbeurteilung: zu beanstanden, keine handelsübliche Beschaffenheit (§16 Abs.1 WeinG); Begründung: mikrobiologisch negativ verändert
12	Harmonisch,Rund, Schönes Erdbeer-Aroma, Zinfandel, leicht gereift, QZ 3,33
13	sensorisch sauber, insgesamt reif, blumige an Erdbeeren und Wassermelone erinnernde Aromatik, allerdings ist auch eine Sorbinsäure-Note wahrnehmbar
15	Fehlerfrei, Aromen nach Dörrobst (Rosinen), Florale Noten (Rosen, Nelke). Ausbalanciertes Süße Säure Verhältnis, gut eingebundene CO2, leicht Gerbend im Geschmack. Stressfreier Sommerwein.
16	Leichte Oxidation, leichte Alterungsnote. Da kein Jahrgang angegeben ist kann eine Aussage über einen UTA Ton nicht genau gemacht werden. Er weist jedoch tendenzen auf.
17	sauber, reif und fruchtig im Geschmack. Ungünstiges Zucker/Säure-Verhältnis
21	Farbe: helles Kupfer Geruch:Weinbergspirsichlikör, Mottenkugel, Schwarze Johannisbeere 1,7 Punkte Geschmack, muffig dumof, leicht bitter 1,6 Punkte Harmonie i.O 1,5 Punkte
22	Sensorischer Befund: Rosé; Farbe: roséfarben, typisch und blank; Bukett: dezentes Aroma, leicht blumig, fehlerfrei; Geschmack: blumig, fruchtig und aromatisch, dezent säurebetont, fehlerfrei; Punktzahl der Sensorik: 3,4 - Mindestpunktzahl 1,5 / ausreichend 1,5 - 1,9 / befriedigend 2,0 - 2,9 / gut 3,0 - 3,9 / sehr gut 4,0 - 5,0
24	2,5 Punkte
26	wenig Aromatik, limonadig, süffig
27	Farbe mittelkräftig mit leicht bräunlichen Nuancen. Intensiver Duft nach Himbeere, etwas Erdbeere, erinnert an Fruchtrops, schon leicht gereift. Im Geschmack fruchtig-süß, mittellanger Abgang mit leichtem Gerbstoffeinfluss. Insgesamt fehlerfrei. Nach 5-Punkte-Schema 2,83P.
28	ohne Beanstandung, evtl. etwas bitter im Geschmack, typisch für Rosé
29	aromatisch, fehlerfrei, fruchtig (Erdbeer- und Himbeeraromen)
31	2,5 o.k.
32	Im Duft zurückhaltend aber würzig, mit einem Anklang von Erdbeeraroma. Im Geschmack wirkt der Wein unharmonisch im Bezug auf Süße/ Säure. Insgesamt ist der Wein jedoch fehlerfrei.
33	SO2 Nase, getrocknete Früchte, Cassis, gealtert, Erdbeere, Rostrot, braune Reflexe, Ascorbinsäure?
36	Erdbeerrosa im Glas. Dezente Nuancen von Erdbeere im Bukett. Harmonisches Süße-Säure-Spiel am Gaumen.
37	im Geruch sehr alt, reif, im Geschmack deutliche Alterungsnote, untypisches Erdbeeraroma
38	keine Fehltöne, schwer, süß und etwas stumpf
39	Etwas SO2-stichig in der Nase, ansonsten in Ordnung.
42	Der Wein ist Reif/oxidativ, leicht muffig/pilzig, bitterer Abgang
43	Nase etwas Himbeere, Geschmack bitter süß, unreich: Qualitätszahl 2,0
44	Der Californische Rose hat eine saubere mittler Frucht. Zinfandel typizität ist gegeben. Der Wein ist beerig, saftig, aber etwas Müde. AP.Gesamtbewertung = 2,83
45	sauber, fruchtig (Wassermelone/Erdbeere), deutlich Fruchtsüße - 3,0 Punkte
46	Aromen nach Beerenfrüchten,frische Art, gute Säure-Süßebalance, 3,5 von 5 Punkten
47	LWK 5 Punkte Schema: 2,0; gekochte Erdbeer, gereift, nussig
49	Im Auge leutend heller klarer Rosewein. In der Nase markante Beerenruchtöne, besonders reife Erdbeerenund leichter Esthernote auf der Zunge leicht belegend und kurz im Abgang
50	Etwas SO2-stichig in der Nase, ansonsten in Ordnung.
51	nicht oxidativ (keine Bräunung), keine Trübung, schöner dunkler Lachston, in der Nase Bee- renaroma, könnte nach persönlichem Geschmack etwas mehr Co2 haben (Lebendigkeit), Erdbeerton schmeckt leicht künstlich, insgesamt vollmundig, lange Präsenz im Mund, keine Fehler
52	Der Wein weißt ein stark fruchtiges Himbeeraroma auf welches den Wein aromatisiert wirken lässt. Geschmacklich sowie geruchlich ist an dem Wein nichts zu beanstanden. Der Wein wirkt Harmonisch und würde (soweit keine unerlaubte Aromatisierung vorgenommen wurde) die amtliche Prüfnummer bekommen.
54	pflanzlich; an reife Feigen erinnernd; geschmacklich ausdruckslos; leicht hängend; unharmonisches Säure-Restzucker-Verhältnis; 1,83 Punkte
55	Lachsfarben, betont süß, unharmonisch, Erdbeeraromen
59	Nase leicht Himbeere, Geschmack bitter-süß, etwas unreif, 2,0
60	Aromatik: verhaltene exotische Frucht; leichte sensorische Wahrnehmung des beginnenden BSA's. Farbe: leicht braune Reflexe. Geschmack: durch die spitz wirkende Säure (evtl. durch Zugabe von Zitronensäure) wird die Restsüße kaschiert
61	In der Nase leichte SO2 Note, deutliche Erdbeerfruchtigkeit. In der Nase sauber, fehlerfrei und Pro- dukttypisch. Am Gaumen deutliche, leicht vordergründige, aber passende Süße. Gute eingebundene Säure. Insgesamt sauber, fehlerfrei und mit gutem Trinkfluss.

Fortsetzung: Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes (wie mitgeteilt)
95	Nichtssagend, aber ohne gravierende Fehler.
122	Farbe; Rosé mit roten Reflexen, lachsfarben, keine Brauntöne (3Pkte) ; Geruch: wenig Frucht dezent Erdbeere, Sorbatton (floral), leichte Reife ; Geschmack: beerig, Erdbeeren; etwas gereift, Sorbinsäure present , Süße Säure harmonisch nicht klebrig, leicht gerbig im Abgang, insgesamt gute Harmonie, Bewertung 3,2 Punkte
125	Durchschnittlicher Wein; Kirscharomen; Schwache Länge
126	Geruch: nach Wildbeeren Geschmack: ausgeglichen Geruch: 2,0 Punkte Geschmack 2,5 Punkte Harmonie: 2,0 Punkte Qualitätszahl:2,17
127	Farbe: blank, hell rosa / lachsfarben; Geruch: ausgeprägter Geruch; rein, ohne Fehler, blumig, fruchtig, wein typisch; Geschmack: lieblich, milde Säure, kaum Gerbstoffe, füllige mit langen Abgang, kräftig fruchtig; 2,7 Punkte
128	Wein ist okay
129	lachsfarben, klar; leicht erdige Note, sauber; einfache Struktur, aromatisch; merkliche Süße, typisch
131	Aufgrund einer Allergie kann z. Zt. keine sensorische Beurteilung vorgenommen werden.
132	Geruch: leicht marmeladig, nach Erdbeere, gereifte rote Früchte; Geschmack: saftig-süß, nach Früchtetee, Beerensaft; Qualitätspunktzahl: 2,33
133	Geruch: sauber; Geschmack: leichter Bitterton
134	Farbe; Rosé mit roten Reflexen, lachsfarben, keine Brauntöne (3Pkte) ; Geruch: wenig Frucht dezent Erdbeere, Sorbatton (floral), leichte Reife ; Geschmack: beerig, Erdbeeren; etwas gereift, Sorbinsäure present , Süße Säure harmonisch nicht klebrig, insgesamt gute Harmonie, Bewertung 3,2 Punkte
136	im abgang leichte bitternote, sonst keine beanstandung
138	Sensorik: intensiver Geruch, etwas künstlich, nach Erdbeeren, ansonst sauber und typisch, mittlerer Nachhall, lieblich,
139	x- unharmonisch, bitter, spitz, leichte blaubeer und Sauerkraut note
140	Fruchtige Note, rund, mild, rote Früchte, lieblich
141	rote Früchte, Erdbeeren, Sauerkirschen, sauber, harmonisch
143	Fruchtig: rote Beerenfrüchte, Litchi; gute Struktur, harmonisch, leicht bitter im Abgang.
146	klar, kupferrötliche Roséfarbe, im Duft tropische Früchte nach Orangenzeste und Blutorangen, florale Noten nach Veilchen. Im Geschmack eine prägende Restsüße mit dezenter, weicher Säure. Fehlerfrei und harmonisch abgerundet.
147	Der Rosé zeigt im Glas orange-kupferfarbene Reflexe. Das Bukett wirkt dezent reif mit Erdbeer-Kirschmarmelade. Mit gereifter Fruchtsüßstruktur und einfacher Säurenote und leichte Kirschsaftaromen im Abgang.
150	QZ: 2,33
152	In Ordnung. Duft nach Erdbeeren. Geschmack fruchtig und harmonisch.
153	Fruchtig-süß , Geschmack von Bitterorange, bitter im Geschmack
154	fehlerhafte Oxidationsnoten im Duft + Geschmack.Farbe mit leichter Verbräunung am Glasrand .

7 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
ABC-Labor GmbH	54486	Mülheim
Adam Müller GmbH & Co. KG	69181	Leimen
Affentaler Winzer eG	77815	Bühl
Ahr-Winzer eG, Betriebslabor	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Amt für Lebensmittelsicherheit und Tiergesundheit, Chemielabor II	CH-7001	Chur
Analytisches Labor Link GmbH, Niederlassung Rheinhessen	67551	Worms-Pfeddersheim
Analytisches Labor Link GmbH, Zweigstelle Weisenheim	67256	Weisenheim am Sand
Andreas Oster Weinkellerei KG	56812	Cochem
Anton Paar Germany GmbH	73760	Ostfildern-Scharnhausen
Anton Paar GmbH	A-8054	Graz
Austria Juice Germany GmbH	55411	Bingen
Badischer Winzerkeller eG	79206	Breisach
Bayerische Landesanstalt für Weinbau und Gartenbau	97209	Veitshöchheim
Bayerisches Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit	97082	Würzburg
Briegel Oenologie e.K.	67146	Deidesheim
Bundesamt für Weinbau	A-7000	Eisenstadt
Carl Klein GmbH – Das Weinlabor	97318	Kitzingen
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Freiburg	79114	Freiburg
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Stuttgart	70736	Stuttgart
Deutsch GmbH	55278	Hahnheim
Deutsches Weintor eG	76831	Ilbesheim
Dienstleistungszentrum Ländlicher Raum Mosel	54470	Bernkastel-Kues
Dienstleistungszentrum Ländlicher Raum Rheinhessen-Nahe-Hunsrück	55276	Oppenheim
Dienstleistungszentrum Ländlicher Raum Rheinpfalz	67435	Neustadt/W.
Einig-Zenzen GmbH & Co. KG	56759	Kaisersesch
Emil Wissing GmbH	76889	Oberrotterbach
Enomarket d.o.o.	SI-5211	Kojsko, Slovenia
Export Union GmbH; c/o Weinlaboratorien Dr. E. M. Kleinknecht	55232	Alzey
Fellbacher Weingärtner eG	70734	Fellbach
Felsengartenkellerei Besigheim eG	74394	Besigheim
Franz Stettner & Sohn GmbH	83059	Kolbermoor
Franz Wilhelm Langguth Erben GmbH & Co. KG	56841	Traben-Trarbach
Genossenschaftskellerei Heilbronn eG	74076	Heilbronn
Heim'sche Privat-Sektkellerei GmbH	67433	Neustadt/W.
Henkell & Co. Sektkellerei KG	65187	Wiesbaden
Hochschule Geisenheim University	65366	Geisenheim
Höhere Bundeslehranstalt und Bundesamt für Wein- und Obstbau	A-3400	Klosterneuburg
Höhere Bundeslehranstalt und Bundesamt für Wein- und Obstbau Abteilung Chemie und Qualitätskontrolle	A-3400	Klosterneuburg
Inoser, Ida.	PT-5050-	Peso da Régua, Portugal
Institut für Hygiene und Umwelt	20539	Hamburg
Institut Heidger KG	54518	Osann-Monzel
Jordan Analytik	97246	Eibelsstadt
Josef Drathen GmbH & Co. KG	56856	Zell
Julius Kimmle GmbH & Co. KG	76889	Kapellen-Drusweiler
Julius Kühn Institut	76833	Sieboldingen
Keller Oenolab GmbH	55278	Dexheim
KGZS - Zavod MB	SI-2000	Maribor, Slovenia
Kost GmbH & Co. KG	55459	Aspishheim
Kost GmbH & Co. KG, Zweigstelle Zell	56856	Zell
Labor Möndel Börtzler	67487	Maikammer
Lacher Laboratorium	79238	Ehrenkirchen
Landesamt für Verbraucherschutz Sachsen-Anhalt	06112	Halle/Saale
Landesbetrieb Hessisches Landeslabor	65203	Wiesbaden
Landesuntersuchungsamt Institut für Lebensmittelchemie und Arzneimittelprüfung	55129	Mainz
Landesuntersuchungsanstalt für das Gesundheits- und Veterinärwesen Sachsen	01099	Dresden
Marco Königer Oenologie	77876	Kappelrodeck
Markgräfler Winzer eG	79588	Efringen-Kirchen
Moselland eG Winzergenossenschaft, Betriebslabor Rhodt	76835	Rhodt
Moselland eG Winzergenossenschaft, Betriebslabor Bernkastel-Kues	54470	Bernkastel-Kues

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
Niedersächsisches Landesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit	38124	Braunschweig
Oberkircher Winzer eG, Winzerkeller Hex vom Dasenstein	77704	Oberkirch
Peter Herres Wein- und Sektkellerei GmbH	54292	Trier
Peter Mertes KG	54470	Bernkastel-Kues
Privatkellerei Rolf Willy GmbH	74226	Nordheim
PSS Weinkellerei GmbH	55450	Langenlonsheim
Reh-Kendermann GmbH	55411	Bingen
Rheinberg-Kellerei GmbH	55411	Bingen
Rimuss & Strada Wein AG	CH 8215	Hallau
Rotkäppchen-Mumm Sektkellereien GmbH	65343	Eltville
Schlosskellerei Affaltrach, Dr. Reinhold Baumann KG	74182	Obersulm
Schmitt Söhne GmbH Weinkellerei	54340	Longuich
Schöller Wein, Analytik & Sensorik	55294	Bodenheim
Sektkellerei Hans Sartor GmbH & Co. KG	56751	Polch
Sektkellerei Schloss Wachenheim AG, Betriebsstätte Trier	54294	Trier
Sektkellerei Schloss Wachenheim AG, Betriebsstätte Wachenheim	67157	Wachenheim
SGS Institut Fresenius GmbH	79108	Freiburg
Staatliches Weinbauinstitut	79100	Freiburg
Tröndlin Önologie GmbH	79418	Schliengen
Vier Jahreszeiten Winzer eG	67098	Bad Dürkheim
Vinocare GmbH & Co. KG	67278	Bockenheim
Wein- und Bodenlabor Dr. Nilles	97332	Volkach
Wein- und Obstbauschule Krems	A-3500	Krems
Wein- und Sektgut Christel Currie	70329	Stuttgart-Uhlbach
Weinberatung Stübinger	76829	Landau
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG, Betrieb Bönningheim	74357	Bönningheim
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG, Betrieb Brackenheim	74336	Brackenheim
Weingut Darting	67098	Bad Dürkheim
Weingut Graf	76835	Weyher/Pfalz
Weingut Kuhnle GbR	71384	WeinStadt-Strümpfelb.
Weinhaus Krauß GmbH	67294	Gauersheim
Weinkellerei Adam Trautwein GmbH & Co. KG	55237	Lonsheim
Weinkellerei Engelstadt GmbH & Co. KG	55270	Engelstadt
Weinkellerei Hechtsheim GmbH	55129	Mainz
Weinkellerei Hohenlohe eG	74626	Bretzfeld-Adolzfurt
Weinlabor Beate Pfitzenmaier	76831	Birkweiler
Weinlabor Braun	67435	Neustadt/W.
Weinlabor Edith Kessler GmbH	76829	Landau
Weinlabor Emmel	67483	Edesheim
Weinlabor Geissel	67169	Kallstadt
Weinlabor Hans-Jürgen Franzen	56814	Bremm
Weinlabor Helmut Frank	55283	Nierstein
Weinlabor Helmut Schmitt	55450	Langenlonsheim
Weinlabor J. Neumann	67278	Bockenheim
Weinlabor Karl Porn	54518	Ossan-Monzel
Weinlabor Karl-Josef Bollig	54349	Trittenheim
Weinlabor Kiefer	67487	Maikammer
Weinlabor Klingler	71336	Waiblingen
Weinlabor Klug	55450	Langenlonsheim
Weinlabor Krauß	55291	Saulheim
Weinlabor Lex	54340	Klüsserath
Weinlabor Peitz	55595	Wallhausen
Weinlabor Porten	56814	Bruttig-Fankel
Weinlabor Schreml	55444	Waldlaubersheim
Weinlabor Sibylle Fischborn-Rößler	55599	Eckelsheim
Weinlabor Thomas Kaufmann	54536	Kröv
Weinlabor Ursula Lieser	56841	Traben-Trarbach
Weinlaboratorien Dr. Kleinknecht	55543	Bad Kreuznach
Weinlaboratorien Dr. Kleinknecht	55232	Alzey
Wine Analytics	54346	Mehring
Winzergemeinschaft Franken eG	97318	Kitzingen
Winzerverein Hagnau eG	88709	Hagnau
WLV Weinanalytik GmbH	65366	Geisenheim
WSB-Labor Ruzycki GbR	55278	Hahnheim
Württembergische Weingärtner-Zentralgenossenschaft eG	71696	Möglingen

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
Zentrallabor Witowski GmbH & Co. KG	55232	Alzey
Zentrallabor Witowski GmbH & Co. KG, Zweigstelle Bechtheim	67595	Bechtheim
Zimmermann-Graeff & Müller GmbH, Weinkellerei	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Graeff & Müller GmbH, Werk 1	56856	Zell
Zimmermann-Graeff & Müller GmbH, Werk 2	56856	Zell