



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2017“

Teil 1

**Durchführung und Ergebnisse der Untersuchungen
insbesondere eines Perlweins (FT17P01)**

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

Stand: 11.09.2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	8
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Auswahl des Untersuchungsmateriales	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 FT17P01	9
2.1.5	Verteilung des Untersuchungsgutes	12
2.2	Informationen zu Behandlung und Untersuchung der Proben	12
2.3	Ergebnisübermittlung und Behandlung	14
2.4	Ergebnisauswertung	16
2.4.1	Bewertung der Laborleistung	17
2.4.2	Untere Grenze des Anwendungsbereiches	18
2.4.3	Spezielle Regelungen für einzelne Parameter	18
2.4.3.1	Vorhandener Alkohol	18
2.4.3.2	Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	19
2.4.3.3	Vergärbare Zucker	19
2.4.3.4	Flüchtige Säure	20
2.4.3.5	Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure	21
2.4.3.6	Kohlensäure und Überdruck	22
3	Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen	23
3.1	Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses	23
3.2	Gesamtergebnis für das Perlweinprüfgut (FT17P01)	26
4	Anmerkungen zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden für einzelne Parameter bei allen Prüfgütern	28
4.1	Flüchtige Säure und Acetat	28
4.1.1	Flüchtige Säure	28
4.1.2	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	29
4.2	Gesamte und L-Äpfelsäure	31
4.3	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure	32
4.4	Schweflige Säure und Reduktone	33
4.4.1	Reduktone	33
4.4.2	Freie Schweflige Säure	35
4.4.3	Gesamte Schweflige Säure	36
5	Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen	37
5.1	Spezielle Gegebenheiten für die FTIR-Ergebnisse einzelner Parameter	37
5.1.1	Codierung der Bestimmungsmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	37
5.1.2	Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter	38
5.1.3	Vergärbare Zucker	38
5.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	39
5.3	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT17P01	42
5.4	Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter	44

6	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern	46
6.1	Berechnete Parameter	46
6.2	Darstellung der analytischen Ergebnisse	46
6.2.1	Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse	47
6.2.2	Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse	47
6.2.3	Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren	47
6.2.4	Aufbau der Graphiken	48
6.3	Relative Dichte 20 °C/20 °C	49
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	49
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	50
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	52
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	52
6.4	Gesamtalkohol [g/L]	54
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	54
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse	55
6.4.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	56
6.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	56
6.5	Vorhandener Alkohol [g/L]	58
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	58
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	60
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	61
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	61
6.6	Gesamtextrakt [g/L]	63
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	63
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	64
6.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	65
6.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	65
6.7	Zuckerfreier Extrakt [g/L]	67
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	67
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	68
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	69
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	69
6.8	Vergärbare Zucker [g/L]	71
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	71
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	72
6.8.3	Reduktometrische Laborergebnisse	74
6.8.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	74
6.8.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	76
6.8.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	77
6.8.7	Angaben zu den Analyseverfahren	77
6.9	Glucose [g/L]	81
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	81
6.9.2	FTIR-Laborergebnisse	82
6.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	83
6.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	83

6.10	Fructose [g/L]	85
6.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	85
6.10.2	FTIR-Laborergebnisse	86
6.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	87
6.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	87
6.11	Glycerin [g/L]	89
6.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	89
6.11.2	FTIR-Laborergebnisse	89
6.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	90
6.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	91
6.12	pH-Wert	93
6.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	93
6.12.2	Angaben zu den Analyseverfahren	93
6.12.3	FTIR-Laborergebnisse	94
6.12.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	95
6.13	Gesamtsäure [g/L]	97
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse	97
6.13.1	FTIR-Laborergebnisse	98
6.13.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	100
6.13.3	Angaben zu den Analyseverfahren	100
6.14	Weinsäure [g/L]	102
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse	102
6.14.2	FTIR-Laborergebnisse	102
6.14.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	104
6.14.4	Angaben zu den Analyseverfahren	104
6.15	Flüchtige Säure [g/L]	106
6.15.1	Herkömmliche Laborergebnisse	106
6.15.2	FTIR-Laborergebnisse	106
6.15.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO ₂ -Korrektur	108
6.15.4	Angaben zu den Analyseverfahren	108
6.16	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	110
6.16.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	110
6.16.2	Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren	110
6.16.3	Angaben zu den Analyseverfahren	111
6.17	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	112
6.17.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	112
6.17.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	112
6.17.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	113
6.17.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	114
6.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	114
6.18	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	117
6.18.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	117
6.18.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	117
6.18.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	118
6.18.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	119
6.18.5	Angaben zu den Analyseverfahren	119

6.19	Reduktone [mg/L]	122
6.19.1	Laborergebnisse	122
6.19.2	Deskriptive Ergebnisse	123
6.19.3	Angaben zu den Analyseverfahren	124
6.20	Freie Schweflige Säure [mg/L]	125
6.20.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	125
6.20.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	125
6.20.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	127
6.20.4	Deskriptive Ergebnisse	129
6.20.5	Angaben zu den Analyseverfahren	129
6.21	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	131
6.21.1	Laborergebnisse	131
6.21.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	132
6.21.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	134
6.21.4	Deskriptive Ergebnisse	135
6.21.5	Angaben zu den Analyseverfahren	135
6.22	Überdruck [bar]	137
6.22.1	Laborergebnisse	137
6.22.2	Deskriptive Ergebnisse	138
6.22.3	Angaben zu den Analyseverfahren	138
6.23	Kohlendioxid (CO ₂) in g/L	139
6.23.1	Laborergebnisse	139
6.23.2	Deskriptive Ergebnisse	139
6.23.3	Angaben zu den Analyseverfahren	139
6.24	Kohlensäure-Überdruck (CO ₂) in bar	140
6.24.1	Laborergebnisse	140
6.24.2	Deskriptive Ergebnisse	140
6.24.3	Angaben zu den Analyseverfahren	140
6.25	Sensorische Befunde	141
7	Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer	143

1 Einleitung

Eine Laborvergleichsuntersuchung dient der Sicherung der Qualität von Analyseergebnissen. Sie ermöglicht es den teilnehmenden Labors, ihre eigenen Analysendaten mit den Analyseergebnissen anderer Labors 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 28. April 2003 zur Durchführung der Qualitätsweinprüfung zugewiesen wurde. Laboratorien mit einer Zulassung zum Einsatz des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR-Verfahren) in der amtlichen Qualitätsweinanalyse ist insbesondere auferlegt, an speziellen Laborvergleichsuntersuchungen mit dieser Methode teilzunehmen. Die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung umfasst über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus die üblicherweise mit diesem Verfahren bestimmten Parameter.

Die Landwirtschaftskammer hat mit Schreiben vom Februar 2017 die bei ihr zugelassenen Laboratorien zur Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung eingeladen, die in dieser lediglich Untersuchungen im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden durchführen. Soweit Laboratorien 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 den Koordinator 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 zusätzlich mit anderen Methoden die üblicherweise mit dem FTIR-Verfahren erfassten Parameter bestimmen.

Von den Laboratorien, die ausschließlich herkömmliche Untersuchungsmethoden einsetzten, wurden die Untersuchungen zwischen dem 04. April und dem 28. April 2017 durchgeführt, während die an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung beteiligten Laboratorien die Untersuchungen bis zum 30. April 2017 durchführten, soweit nicht in Einzelfällen ein späterer Abgabetermin vereinbart wurde. Insgesamt 126 zugelassene und eingeladene Laboratorien, da-

von 84 Laboratorien für die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung, haben sich zur Teilnahme angemeldet. Bis auf ein Labor legten alle angemeldeten Teilnehmer termingerecht Ergebnisreihen vor.

Die Durchführung und die Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung werden in einem mehrteiligen Bericht beschrieben. Der vorliegende Teil 1 umfasst die allgemeinen organisatorischen Angaben zur Durchführung, behandelt für einzelne Parameter prüfgutübergreifende Beobachtungen und dokumentiert die Ergebnisse für das Prüfgut Perlwein (FT17P01) im Detail.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Auswahl des Untersuchungsmateriales

Als Untersuchungsmaterial sollen Weine unterschiedlicher Herkunft, Herstellung und Zusammensetzung verwendet werden, um den Einfluss materialspezifischer Effekte auf die Untersuchungsergebnisse für die Teilnehmer erkennbar zu machen. Das Untersuchungsmaterial soll – zumindest im mehrjährigen Turnus – den üblichen Konzentrationsbereich der Hauptkomponenten wie Alkohol-, Zucker- und Säuregehalt sowie unterschiedliche Herkünfte abdecken.

Nach der obengenannten 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 und ein schäumendes Weinerzeugnis, in der Regel ein Perlwein verwendet. Nachdem im Jahr 2015 ein Weißwein und im Jahr 2016 ein Rotwein als Prüfgut für alle Teilnehmer ausgewählt wurde, war daher in diesem Jahr ein schäumendes Weinerzeugnis auszuwählen.

Der Einsatz mehrerer Prüfgüter für die Durchführung der FTIR-Untersuchungen ermöglicht die gleichzeitige Berücksichtigung verschiedener Auswahlkriterien und macht hierdurch den Einfluss probenspezifischer Matrixeffekte bzw. Mängel einer eventuellen Slope-Intercept-Korrektur für die Teilnehmer besser erkennbar. Die Verwendung von Proben unterschiedlicher Weinarten dient hierbei insbesondere der Abdeckung der aufgrund der Weinart unterschiedlichen Gehalte an Äpfelsäure und Milchsäure. Weiterhin soll, insbesondere im Hinblick auf den Einfluss unterschiedlicher Herkunft und Herstellungsverfahren, mindestens ein Wein ausländischer Herkunft sein.

2.1.2 Angaben zu den Prüfgütern

Für die Durchführung der Untersuchungen wurde das Probenmaterial (Prüfgüter) aus gewerblicher Herstellung bezogen. Auf die Zusammensetzung wurde kein Einfluss genommen. Folgende Prüfgüter wurden eingesetzt:

FT17P01: Deutscher Perlwein; Grundwein: 2016er Weine aus der Pfalz; Vorhandener Alkohol 78,7 g/L, Restzucker 20,5 g/L, Gesamtsäure 6,8 g/L, Kohlensäure (CO₂) 4,8 g/L.

FT17P02: 2015er Qualitätswein Saale-Unstrut, Müller-Thurgau, trocken; Vorhandener Alkohol 96,4 g/L, Restzucker 5,2 g/L, Gesamtsäure 6,7 g/L, Kohlensäure (CO₂) 1,3 g/L.

FT17P03: 2014er Qualitätswein Ahr, Spätburgunder, halbtrocken; Vorhandener Alkohol 92,0 g/L Restzucker, 14,5 g/L bei etwa 5,5 g/L Gesamtsäure, Kohlensäure (CO₂) 0,7 g/L.

FT17P04: 2015er Qualitätswein Württemberg, Samtrot, süß; Vorhandener Alkohol 74,6 g/L, Restzucker 50,9 g/L, Gesamtsäure 5,6 g/L, Kohlensäure (CO₂) 1,25 g/L.

FT17P05: Wein ohne Jahrgang und Rebsorte aus Spanien, Rosé, halbtrocken; Vorhandener Alkohol 88,8 g/L, Restzucker 14,2 g/L, 4,7 g/L Gesamtsäure, Kohlensäure (CO₂) 0,9 g/L.

Die vorstehenden Angaben zur Zusammensetzung entstammen den bei der Produktauswahl vorliegenden bzw. nach der Anlieferung erstellten Analysen. Sie sind als orientierende Angaben zu betrachten. Mit Ausnahme des Prüfgutes FT17P03 haben alle Erzeugnisse während der Herstellung einen Zusatz von Ascorbinsäure erhalten.

2.1.3 Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen

Die Homogenitätsprüfung wurde von den Prüfgütern FT17P01, FT17P04 und FT17P05 ohne Einschränkungen bestanden. Nicht ungewöhnlich für ohne besondere Vorkehrungen "vom Lager" entnommenes Prüfgut ergab sich keine ausreichende Homogenität bei dem Prüfgut FT17P02 für die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure und bei dem Prüfgut FT17P03 für die Parameter Fructose und Gesamte Äpfelsäure. Die Packeinheiten, aus denen die auffälligen Proben stammten, wurden beim Versand an die Teilnehmer ausgeschlossen. Für den Parameter Gesamte Schweflige Säure bei dem Prüfgut FT17P02 und den Parameter Fructose bei dem Prüfgut FT17P03 konnte nach Ausschluss der auffälligen Proben keine Inhomogenität nachgewiesen werden. Dennoch ist für die genannten Kombinationen von Prüfgut und Parameter eine störende Inhomogenität bei dem verbleibenden Prüfgutanteil nicht auszuschließen, da jeweils nur 12 der insgesamt je 20 gelieferten Abpackeinheiten im Homogenitätstest überprüft wurden. Wird nur für die bezeichneten Parameter/Prüfgut-Kombinationen ein unbefriedigender Z-Score erhalten, ist diese Möglichkeit unter Berücksichtigung aller im Gesamtbericht dargestellten Daten bei der abschließenden laboreigenen Würdigung zu berücksichtigen.

2.1.4 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT17P01

Von dem Prüfgut FT17P01 wurden 408 Flaschen a 0,75 L in einer Gitterbox bezogen. Während der Etikettierung zur Vorbereitung für den Versand wurde jede 17. Flasche, insgesamt 24 Flaschen als Basis für die Homogenitätsprüfung entnommen.

Aus den aufsteigend nummerierten Flaschen wurden 12 mittels Zufallsgenerator ausgewählt und zur Prüfung der Homogenität verwendet. In der Reihenfolge der Auswahl wurden an jeder Probe mit dem Verfahren der Mehrfach-Volumenexpansion (CarboQC der Fa. Anton Paar) eine doppelte Bestimmung der Kohlensäure, des Luftgehaltes und des Überdruckes bei 20 °C mit

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P01

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-Säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Flücht. Säure	Freie SO ₂	Ges. SO ₂	CO ₂	Druck
1	7	1,00207	76,28	41,01	18,20	8,55	13,32	6,43	3,39	6,74	2,85	2,83	0,594	38,0	161,0	4,76	2,40
2	22	1,00208	76,12	41,07	18,13	8,56	13,40	6,44	3,39	6,73	2,86	2,83	0,593	38,5	152,5	4,83	2,42
3	16	1,00207	76,47	41,12	18,13	8,56	13,38	6,46	3,39	6,74	2,86	2,82	0,600	39,5	156,5	4,85	2,44
4	18	1,00205	76,37	41,01	18,21	8,45	13,42	6,46	3,39	6,74	2,84	2,82	0,595	39,5	152,5	4,82	2,41
5	10	1,00204	76,30	41,02	18,13	8,59	13,37	6,43	3,39	6,74	2,85	2,83	0,598	40,0	153,5	4,85	2,42
6	4	1,00198	76,22	40,87	18,04	8,58	13,37	6,46	3,39	6,71	2,88	2,79	0,605	39,5	157,0	4,84	2,45
7	15	1,00196	76,46	40,90	18,11	8,55	13,33	6,42	3,39	6,74	2,87	2,80	0,604	39,0	151,5	4,83	2,42
8	5	1,00197	76,34	40,89	18,21	8,57	13,29	6,43	3,39	6,73	2,86	2,78	0,600	40,5	156,0	4,83	2,41
9	19	1,00198	76,40	40,94	18,10	8,52	13,40	6,43	3,39	6,74	2,87	2,80	0,603	40,0	156,0	4,84	2,46
10	12	1,00197	76,30	40,93	18,16	8,69	13,28	6,48	3,39	6,72	2,86	2,79	0,608	39,5	153,5	4,82	2,48
11	2	1,00190	75,46	40,45	17,86	8,46	13,13	6,39	3,39	6,63	2,82	2,75	0,593	39,5	154,5	4,81	2,48
12	11	1,00192	76,70	40,92	18,08	8,56	13,32	6,48	3,39	6,75	2,85	2,79	0,601	39,0	156,5	4,84	2,46
13	4	1,00186	75,65	40,54	18,04	8,61	13,29	6,33	3,38	6,70	2,93	2,78	0,608	40,0	154,5	4,85	2,42
14	11	1,00183	76,32	40,62	17,99	8,57	13,36	6,35	3,39	6,73	2,91	2,78	0,602	40,0	155,5	4,85	2,44
15	7	1,00203	75,52	40,86	18,12	8,62	13,36	6,38	3,39	6,73	2,88	2,80	0,606	39,0	153,5	4,83	2,41
16	19	1,00194	76,13	40,85	18,07	8,50	13,33	6,40	3,39	6,74	2,89	2,78	0,601	40,0	154,5	4,85	2,43
17	15	1,00194	76,26	40,86	17,99	8,54	13,31	6,43	3,39	6,73	2,88	2,77	0,610	39,0	155,0	4,83	2,40
18	18	1,00196	76,16	40,92	18,06	8,61	13,39	6,47	3,39	6,72	2,89	2,76	0,605	40,0	154,5	4,82	2,39
19	12	1,00194	76,24	40,87	18,02	8,53	13,25	6,42	3,39	6,72	2,86	2,78	0,605	40,0	157,0	4,83	2,42
20	2	1,00187	75,20	40,36	17,80	8,47	13,12	6,38	3,39	6,62	2,85	2,75	0,600	38,5	150,0	4,83	2,41
21	16	1,00196	76,16	40,97	18,08	8,55	13,29	6,42	3,39	6,75	2,86	2,81	0,609	39,5	156,0	4,85	2,41
22	10	1,00195	76,04	40,90	17,97	8,60	13,35	6,44	3,39	6,73	2,87	2,80	0,604	40,0	155,5	4,85	2,42
23	5	1,00191	75,97	40,80	17,80	8,42	13,28	6,43	3,39	6,72	2,87	2,78	0,609	39,5	154,5	4,84	2,40
24	22	1,00198	76,01	40,97	18,01	8,61	13,32	6,48	3,40	6,73	2,87	2,79	0,608	39,0	158,0	4,83	2,42

Der Gehalt an Milchsäure lag unter der Bestimmungsgrenze. Die negativen Messergebnisse werden nicht dargestellt und bleiben bei der Auswertung unberücksichtigt.

der Gerätefirmware auf der Basis eines Löslichkeitskoeffizienten von 1,51 g/(L*bar) für Kohlendioxid ermittelt. Anschließend wurden unter Entfernen des gelösten Kohlendioxids durch Filtration über Bentonit zwei Serien von Messproben erstellt. Dabei wurden die Wiederholungen in einer eigenen Zufallsfolge angeordnet. Diese Proben wurden mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie mit einem Gerät (FOSS WineScan FT2 SO₂) untersucht, welches zugleich die Bestimmung der Freien und der Gesamten Schwefligen Säure ohne Störung durch den Ascorbinsäurezusatz ermöglicht. Die weitgehend automatisierten Untersuchungsabläufe begünstigen eine geringe Wiederholstreuung. Die erhaltenen Daten sind in der Tabelle 1 aufgeführt.

Die Messergebnisse wurden graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen oder Proben und in einem Korrelationstest auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge (Lfd.-Nr.) sowie von der Füllreihenfolge (Probe-Nr.) geprüft. Vor allem Korrelationen der Messwerte zum Messverlauf können eine unzureichende Wiederholbarkeit der Messungen vortäuschen. Wie häufig zu beobachten, traten bei mehreren Parametern gesicherte Korrelationen zum Messverlauf aber auch zur Reihenfolge der Entnahme der Proben auf. Die graphischen Darstellungen zeigten einzelne abweichende Messergebnisse vor allem am Übergang zwischen den beiden Messserien aber auch eine bei mehreren Parametern abweichende Probe (Probe Nr. 2). Diese Beobachtungen sind hilfreich bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden varianzanalytischen Untersuchung deren Ergebnisse sind in der Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für Charge FT17P01

	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	1,001965	24	1,9877	0,1267	0,000055	0,000039	0,000132	0,418	0,294	0,0001
Vorh. Alkohol	76,128	24	2,7726	0,0468	0,258	0,243	0,535	0,483	0,455	0,3216
Gesamtextrakt	40,860	24	4,6685	0,0066	0,113	0,153	0,594	0,191	0,258	0,2604
Verg. Zucker	18,053	24	1,1390	0,4112	0,110	0,029	0,530	0,207	0,054	0,2358
Glucose	8,553	24	1,2751	0,3403	0,0580	0,0215	0,274	0,212	0,079	0,1223
Fructose	13,319	24	7,3269	0,0009	0,0370	0,0658	0,403	0,092	0,163	0,1651
Glycerin	6,427	24	0,6178	0,7833	0,0438		0,275	0,160		0,1175
pH-Wert	3,391	24	1,3567	0,3035	0,0024	0,0010	0,0476	0,050	0,021	0,0192
Gesamtsäure	6,722	24	37,0568	0,0000	0,0074	0,0313	0,107	0,069	0,293	0,0435
Weinsäure	2,868	24	1,0092	0,4905	0,0228	0,0015	0,138	0,164	0,011	0,0594
Äpfelsäure	2,793	24	1,7316	0,1796	0,0198	0,0120	0,089	0,223	0,135	0,0401
Flücht. Säure	0,6024	24	0,6888	0,7278	0,0055		0,0368	0,151		0,0156
Freie SO ₂	39,46	24	2,6000	0,0577	0,456	0,408	3,63	0,126	0,112	1,5170
Gesamte SO ₂	154,98	24	0,6219	0,7800	2,510		5,357	0,469		3,1672
CO ₂	4,832	24	2,1630	0,1004	0,0155	0,0119	0,305	0,051	0,039	0,1232
Druck	2,426	24	1,3304	0,3149	0,0229	0,0093	0,215	0,107	0,043	0,0888

Für die Aussagekraft der Varianzanalyse, insbesondere eines nicht signifikanten Testergebnisses, 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. Diese Bedingung ist für alle Parameter erfüllt. Zeigt die Varianzanalyse bei Erfüllung dieser Bedingung keine Signifikanz folgt, dass das Untersuchungsmaterial hinsichtlich dieses Parameters als homogen zu betrachten ist. Diese Doppelbedingung ist für 12 der 16 geprüften Parameter erfüllt. Damit ist für diese Parameter eine ausreichende Homogenität zuverlässig nachgewiesen.

Nur bei den Parametern Vorhandener Alkohol, Gesamtextrakt, Fructose und Gesamtsäure zeigt die Varianzanalyse bei ausreichender Präzision der Wiederholungen einen signifikanten Effekt, d.h. bei diesen Parametern ist die Streuung zwischen den Proben gesichert größer als die Standardabweichung des Messfehlers. In diesem Fall muss geprüft werden, ob die angezeigte Inhomogenität für die Laborvergleichsuntersuchung relevant ist. Hierzu wird die Standardabweichung der Proben (s_{Pr}) mit der Zielstandardabweichung (s_z) verglichen. Liegt der Quotient beider Größen (Spalte "Quotient s_{Pr}/s_z ") unter 0,3, d.h. unter 30 % der Zielstandardabweichung so ist das Material ausreichend homogen. Dies trifft für drei der vier Parameter zu und spricht für ausreichende Homogenität. Letztlich entscheidend ist das Prüfkriterium nach Fearn und Thompson (Analyst 126 (2001), 1414-1417). Dieses berücksichtigt weitere statistische Einflüsse. Hiernach darf die Standardabweichung der Probenahme (Spalte "Proben (s_{Pr})" den in der Spalte "Maximal tolerierter Wert für s_{Pr} " ausgewiesenen Betrag nicht überschreiten. Dieses Prüfkriterium wird bei allen vier Parametern eingehalten. Somit gilt auch für diese die Forderung einer ausreichenden Homogenität als erfüllt.

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

2.1.5 Verteilung des Untersuchungsgutes

Für die bei der Landwirtschaftskammer angemeldeten Teilnehmer wurde das benötigte Untersuchungsgut durch einen Paketdienst oder durch Boten ab dem 20.03.2017 abgesandt. Die zur Abholung der Proben angemeldeten Laboratorien konnten somit ab dem 04.04.2017 das Untersuchungsgut bei der jeweils von ihnen gewählten Prüfstelle in Empfang nehmen. Insgesamt wurde einschließlich einer Reserve bei den Prüfstellen Material für 36 Laboratorien mit je 3 Flaschen à 0,75 L bereitgestellt. Je Labor wurde dieselbe Probenmenge an weitere 14 Laboratorien, die um Zusendung gebeten hatten, am 27.03.2017 abgesandt. Die 84 Teilnehmer an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung erhielten das Prüfmaterial per Paketdienst ebenfalls zu dieser Zeit. An diese Teilnehmer wurden außer dem Perlwein FT17P01 vier weitere Prüfgüter zu je 2 bis 3 Flaschen à 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 Behandlung und Untersuchung der Proben

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

Den Laboratorien, die unter ausschließlicher Anwendung herkömmlicher Untersuchungsverfahren im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse an der Untersuchung des Perlweins FT17P01 teilnahmen, wurden als zu bestimmende Parameter Relative Dichte 20°C/20°C, Vorhandener Alkohol, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Freie und Gesamte Schweflige Säure benannt. Es wurde ausdrücklich darauf hingewiesen, dass im Prüfgut Ascorbinsäure enthalten

ist und daher eine Bestimmung der Reduktone erforderlich war, falls der Gehalt an Schwefliger Säure jodometrisch bestimmt wurde. Der bestimmte Gehalt an Schwefliger Säure sollte nach den Regeln des Labors für die Mitteilung an Kunden (Regel des Qualitätsmanagement) erfolgen und der Gehalt an Reduktonen mitgeteilt werden. Die Bestimmung des Parameters Glucose ist in der amtlichen Qualitätsweinanalytik nicht mehr gefordert. Die Möglichkeit zur Abgabe eines Untersuchungsergebnisses wurde dennoch eingeräumt. Weiterhin wurde auf die Regeln zur Auswahl der anzuwendenden Untersuchungsmethoden hingewiesen, wobei das Untersuchungsgut als "2016er Qualitätsperlwein Pfalz (ohne Rebsortenangabe)" betrachtet und auch einer sensorischen Prüfung unterzogen werden sollte. Den Laboratorien wurde als Regelform zur Mitteilung der Untersuchungsergebnisse eine Exceldatei, die eine Nutzungsanleitung enthielt, per E-Mail zugesandt und auf der Website der Landwirtschaftskammer zum Herunterladen bereitgestellt. Sie erleichtert insbesondere Zusatzangaben, die fachlich für die Bewertung der Untersuchungsergebnisse erforderlich sind. Sofern die Exceldatei nicht genutzt wurde, wurde gebeten das Formblatt für die Amtliche Qualitätsweinprüfung als Standardform der Ergebnismitteilung zu benutzen und hierbei auch die Felder für die berechneten Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt auszufüllen. Außerhalb Rheinland-Pfalz ansässige Laboratorien wurden auf die Fundstelle des Methodenkatalogs der Landwirtschaftskammer und der Kodierungen der Untersuchungsverfahren im Internet (www.lwk-rlp.de) hingewiesen.

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

Die 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 noch keine Slope-Interzept-Korrektur, d.h. der Slope-Wert ist stets 1,0 und der Interzept-Wert Null. In der Regel ist eine Anpassung an die Besonderheiten der einzelnen Geräte und eventuell Weinjahrgänge in den anwendenden Laboratorien erforderlich, um bestmögliche Untersuchungsergebnisse zu erhalten.

Die FTIR-Untersuchung war an 5 Prüfgütern durchzuführen. Das für alle Teilnehmer gemeinsame Prüfgut, das unter dem Code FT17P01 verteilt wurde, war über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus mit anderen als der FTIR-Methode auf Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure zu untersuchen, soweit dies dem jeweiligen Labor aufgegeben und möglich war. Außerdem wurde die Möglichkeit geboten die Ergebnisse der Bestimmung von Acetat (als Essigsäure), L-Äpfelsäure oder L-Milchsäure mitzuteilen. Somit wurde der Umfang der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden zumindest auf die Parameter aufgestockt, die üblicherweise mit FTIR-Spektroskopie ermittelt werden. Der resultierende Untersuchungsumfang galt für alle auf diese Weise zu untersuchenden Proben. Auf die genannten Parameter waren von den Teilnehmern an den FTIR-Untersuchungen jeweils mindestens zwei der fünf Proben zusätzlich mit anderen Methoden zu untersuchen. Die Untersuchung aller Proben war anheimgestellt. Eine ausreichende Anzahl Untersuchungsergebnisse mit anderen Methoden als dem FTIR-Verfahren war für alle fünf Proben erforderlich, weil die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Bezugnahme auf den Median der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen, bevorzugt mit Referenzmethoden, bewertet werden. Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse und der eingesetzten herkömmlichen Methoden wurden als bevorzugte Mitteilungsform eine Exceldatei und alternativ Formblätter zur Verfügung gestellt.

Als Abgabetermin für die Laboratorien, die ausschließlich mit herkömmlichen Methoden im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse untersuchten, wurde der 28.04.2017 und als Ausschlusstermin der 02.05.2017 benannt. Für Laboratorien, die eine umfangreichere Aufgabenstellung zu bearbeiten hatten, wurde der Abgabetermin auf den 30.04.2017, der Ausschlusstermin auf den 05.05.2017 festgesetzt. In begründeten Einzelfällen konnte eine darüber hinaus gehende Abgabefrist vereinbart werden.

2.3 Ergebnisübermittlung und Behandlung

Im Wesentlichen erfolgte die Ergebnisübermittlung termin- und formgerecht, d.h. wie erbeten auf den vorgegebenen Formularen oder als Dateien per E-Mail. Aus dem Kreis der unmittelbar von der Landwirtschaftskammer betreuten Teilnehmer berichteten termingerecht 30 Teilnehmer mit der zugesandten Exceldatei, während 11 Laboratorien ihre Ergebnisse schriftlich an die Landwirtschaftskammer einsandten. Ein Teilnehmer sandte keine Ergebnisse ein, sodass letztlich 41 Laborergebnismitteilungen vorlagen. Alle 84 angemeldeten Teilnehmern der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung übermittelten ihr Ergebnisdateien unmittelbar an den Auswertenden. Vier Teilnehmer waren an dem erweiterten Parameterumfang interessiert und beteiligten sich nur mit Untersuchungen nach anderen Methoden. Ein weiterer Teilnehmer des erweiterten Ringversuchs beschränkte sich vereinbarungsgemäß auf die Parameter der amtlichen Quali-

tätsweinprüfung. Drei Teilnehmer aus Laboratorien, die nur das FTIR-Verfahren einsetzen, konnten keine Ergebnisse mit anderen als der FTIR-Methode mitteilen. 10 Teilnehmer teilten Ergebnisse zu einer oder mehreren Proben mit, die sie mit zwei Kalibrierungen gemessen hatten. Daher konnten insgesamt bis zu 89 FTIR-Messergebnisse vorliegen. Tatsächlich lagen nur bis zu 88 Messergebnisse vor. Insgesamt gingen von 31 Teilnehmern 40 Produktkalibrierungen (PRD-Dateien), davon aus 5 Laboratorien für Rot- und Weißweine unterschiedliche Dateien ein. Rohdaten-Dateien (CSV-Dateien) sandten 38 Teilnehmer ein.

Nach der Produktbezeichnung wurden erweiterte, d.h. alle gängigen Parameter der FTIR-Untersuchung umfassende Produktkalibrierungen auf der Basis der Kalibrierung AP_2011 von 11 Teilnehmern eingesetzt. 3 Teilnehmer beschränkten sich auf die oben genannten vier Parameter der Produktkalibrierung AP_2011. Eine zusätzliche Messung mit dieser Produktkalibrierung ist 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 werden die Untersuchungsergebnisse der Labors unter einer Auswertenummer bearbeitet. Da die Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung zumindest zu einem Teil der Proben sowohl herkömmliche als auch FTIR-Untersuchungsergebnisse einzusenden hatten, wurde für letztere eine zusätzliche Auswertenummer zugeteilt. Diese ergab sich durch die Erhöhung der Auswertenummer für die Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden um 200 bzw. bei Einsendung von Ergebnissen mit einer zweiten Kalibrierung zusätzlich um 300. Somit entsprechen der Auswertenummer 1 bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungen bei den FTIR-Untersuchungsergebnissen die Auswertenummer 201 bzw. 301. Die Erhöhung der Auswertenummer wurde auch bei den Teilnehmern vorgenommen, die keine Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden mitgeteilt haben. Es war ein Messergebnis mit dem FTIR-Verfahren je eingesetzter Kalibrierung für jede Probe einzusenden. Sofern mehrere FTIR-Messergebnisse mit derselben Kalibrierung für ein Untersuchungsgut eingesandt wurden, ist stets der zuerst gemessene Befund ausgewertet worden.

Die Ergebnisübermittlung soll unter Verwendung einer jedem Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung zugesandten, speziellen Exceldatei erfolgen. Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden enthielt diese Datei zwei Registerblätter. Auf jedem Registerblatt kann 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 soll die Bereitstellung von zwei Registerblättern ermöglichen. In der vorgesehenen Weise nutzten nur einzelne Teilnehmer diese Möglichkeit. Stattdessen wurden weitere Untersuchungsergebnisse an derselben Probe mitgeteilt, obwohl die Teilnehmer grundsätzlich nur einen Untersuchungsbebefund für jede mit herkömmlichen Methoden zu untersuchende Probe einsenden sollen. Vor allem Anforderungen aus der Akkreditierung der Labors dürften hierfür auslösend sein. Für alle 18 Teilnehmer, die das zweite Registerblatt zur Mitteilung von Ergebnissen mit anderen Metho-

den als auf dem ersten Registerblatt nutzten, wurden zusätzliche Auswertenummern aus dem Wertebereich 85 bis 102 zugeteilt, während unter den Auswertenummern 103 bis 107 zusätzliche Ergebnisreihen mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie erfasst wurden.

Für die Teilnehmer an der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung wurde in der Datei zur Ergebnismitteilung weiterhin ein Registerblatt zum Eintragen der FTIR-Untersuchungsergebnisse angeboten. Dessen Verwendung gestattet dem Teilnehmer gegenüber der vom Bildschirm exportierten Ergebnisdatei eine Beschränkung der mitgeteilten Ergebnisse auf diejenigen, deren Bewertung gewünscht wird. Außerdem ergibt sich für den Auswerter der Vorteil einer einheitlichen Abfolge der Parameter, wodurch die weitere Verarbeitung erleichtert wird. Wenig über 70 %, d.h. 56 der 79 Einsender von FTIR-Untersuchungsergebnissen, nutzten diese Möglichkeit. Soweit dies der Fall war und zusätzlich eine vom Bildschirm exportierte Ergebnisdatei übermittelt wurde, sind die auf dem FTIR-Ergebnisblatt der Ergebnismappe eingetragenen Werte als maßgebliches Laborergebnis behandelt worden.

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

Der Bitte um Mitteilung des sensorischen Befundes bei der von allen Laboratorien untersuchten Probe entsprachen 75 der 92 bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien. Die sensorischen Befunde sind ohne Bewertung im Abschnitt 6.22 wiedergeben. Überwiegend wurde der Perlwein zufrieden stellend beschrieben und bewertet. In einzelnen Fällen wurden aber widersprüchliche Beschreibungen mitgeteilt oder nicht vorhandene Fehler angegeben. Die Auswertung bleibt den einzelnen Teilnehmern überlassen, da Qualitätszahlen nur unvollständig angegeben wurden und eine standardisierte Bewertung der verbalen Beschreibungen nicht möglich ist.

2.4 Ergebnisauswertung

Die allgemein bei der Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer angewendeten Regeln und Verfahrensweisen zur Aus- und Bewertung der Ergebnisse sind in einer speziellen Ausarbeitung auf der Internetseite Landwirtschaftskammer unter <http://www.lwk-rlp.de/> in der Rubrik „Weinbau/Wein/Qualitätsweinprüfung/Analysemethoden/Labors“ als PDF-Datei hinterlegt. Sie werden auch bei dieser Laborvergleichsuntersuchung angewendet soweit nachstehend bzw. bei der Besprechung der Ergebnisse für einzelne Parameter keine Abweichungen oder Ergänzungen aufgezeigt werden.

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

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

2.4.1 Bewertung der Laborleistung

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

Die Bewertung der Leistung der Laboratorien erfolgt durch einen Vergleich des Laborergebnisses mit dem Median der berücksichtigten Ergebnisse der Laboratorien für den betrachteten Parameter. Hierbei wird als Maßstab der erreichbaren Übereinstimmung, d.h. als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) in der Regel die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet und der Z-Score als Leistungskennzahl errechnet. Die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen werden aber durch Matrixeffekte beeinflusst, die vom einzelnen Laboratorium nicht beherrschbar sind. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss angeregt, zu deren Bewertung experimentell ermittelte Zielstandardabweichungen (Übereinstimmungsstandardabweichung s_{ij}) zu verwenden, die den Einfluss der Matrix auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse um den Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden nach statistischen Regeln berücksichtigen. Für fast alle in dieser Laborvergleichsuntersuchung erfassten Parameter hat er eine Zusammenstellung statistischer Kennzahlen des FTIR-Verfahrens erarbeitet, die in Teil 1 der Berichte über die Laborvergleichsuntersuchung 2010 als Tabelle 5 enthalten ist. Abweichend von dieser Tabelle wird für den Parameter Fructose eine Übereinstimmungsstandardabweichung (s_{ij}) von $\pm 0,330$ g/L und eine Vergleichsstandardabweichung (s_{FTIR}) von $\pm 0,222$ g/L verwendet, die für die seit 2011 empfohlene Kalibrierung dieses Parameters erarbeitet wurde. 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_{ij}). 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 Ergebnis-

se herkömmlicher Verfahren auch zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse anzuwenden, falls ihr Wert gleich oder größer ist als der Wert der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung. Diese Empfehlung wurde bei der Berechnung der Z-Score für die FTIR-Ergebnisse berücksichtigt.

2.4.2 Untere Grenze des Anwendungsbereiches

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

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

2.4.3 Spezielle Regelungen für einzelne Parameter

2.4.3.1 Vorhandener Alkohol

Beurteilungsbasis sind stets die Ergebnisse aus Destillationsverfahren zur Alkoholbestimmung (LwK 2.1 und LwK 2.4), weil eine nähere Betrachtung der Ergebnisse unter Berücksichtigung der Untersuchungsmethoden zeigt, dass insbesondere mittels der Matrix abhängigen Refraktometrie nicht selten systematisch abweichende Ergebnisse erhalten werden. Systematisch abweichende Ergebnisse können auch mittels HPLC erhalten werden, da nur Ethanol nicht aber weitere Nebenalkohole wie bei der Destillation erfasst werden. Schließlich ist weinrechtlich

maßgeblich der mit dem OIV-Destillationsverfahren bestimmte Alkoholgehalt. Als Leistungskriterium war hier für alle Prüfgüter die Vergleichsstandardabweichung von $\pm 0,535$ g/L aus der OIV-Methode (LwK 2.1) zur Ermittlung gültiger Z-Score geeignet.

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

2.4.3.2 Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt

Die berechneten Werte für Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt gehören zu den Standardparametern der amtlichen Qualitätsweinanalyse. Ergebniswerte sind für das Prüfgut FT17P01 durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien mitzuteilen. Daher sind für das Prüfgut FT17P01 auf allen Ergebnis-Registerblättern der Exceldatei zur Ergebnismitteilung entsprechende Eingabefelder für diese Parameter vorgegeben. Dabei wird davon ausgegangen, dass auf den Registerblättern 'herk. Ergebnisse (1)' und 'herk. Ergebnisse (2)' ausschließlich Berechnungsergebnisse auf der Grundlage herkömmlich bestimmter Werte eingetragen werden. Dies ist auch darin begründet, dass insbesondere für den Parameter Gesamtextrakt die Ergebnisse nach herkömmlichen Methoden auch die Grundlage zur Bewertung der mit einer geeigneten Parameterkalibrierung unmittelbar aus den Infrarotspektren abgeleiteten Messergebnisse bilden. Deshalb ist die Mitteilung für alle fünf Prüfgüter vorgesehen. Zu den besonderen Gegebenheiten bei der Berechnung der hier angesprochenen Parameter auf der Grundlage von FTIR-Messergebnissen siehe Abschnitt 5.1.1.

2.4.3.3 Vergärbare Zucker

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

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

Messwertes größer als die zu etwa 2 % des Messwertes kodifizierte Vergleichsstandardabweichung des Verfahrens zur Bestimmung der Reduzierenden Stoffe nach Luff-Schoorl (OIV-MA-AS311-01A, LwK Nr. 4.1).

In der Praxis werden die reduktometrischen Verfahren zur Zuckerbestimmung nach wie vor weit verbreitet eingesetzt, so bei dem Prüfgut FT17P01 bei 36 von insgesamt 98 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.

Schließlich wird hier darauf hingewiesen, dass bei Ergebnismitteilung unter Verwendung des amtlichen Formulars zur Qualitätsweinprüfung bei diesem Parameter der in der Zeile „nach Inversion“ angegebene Wert ausgewertet wird, selbst wenn keine Saccharose enthalten ist. Wird dieser Wert nicht angegeben, so wird die Angabe in der Zeile „vor Inversion“ ausgewertet.

2.4.3.4 Flüchtige Säure

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

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

2.4.3.5 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, mit erfasst werden, ist dies bei den Destillations- bzw. photometrischen Verfahren nicht der Fall. Bei Destillationsverfahren mit anschließender acidimetrischer Titration können aber erhöhte Gehalte an Flüchtigter Säure oder bei bestimmten photometrischen Verfahren die Farbstoffe der Rotweine stören. Dies erschwert sowohl die Ermittlung eines geeigneten Bezugswertes als auch die Anwendung einer sachgerechten Zielstandardabweichung und damit letztlich die Bewertung der Laborleistung durch gültige Z-Score.

Für die Mitteilung der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen wurden in dieser Laborvergleichsuntersuchung die Vorgaben zur Ergebnismitteilung geändert. Um eine einheitliche Datenstruktur zu erhalten, sollten **bisher** bei den Laborvergleichsuntersuchungen die Ergebnisse der Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure mittels jodometrischer Verfahren **einschließlich** des Beitrages der „**Reduktone**“ erfolgen. **Abweichend** von dieser Verfahrensweise wurde im Begleitschreiben in Verbindung mit dessen Anlage 2 vorgegeben, dass die Mitteilung der Ergebnisse stets in einer **fachlich sachgerechten Form** bzw. nach den Regeln des laboreigenen Qualitätsmanagements erfolgen sollte. Dies schließt ein, dass die Ergebnisse hinsichtlich der Berücksichtigung der Reduktone eindeutig zu kennzeichnen sind.

Die Mehrzahl der Prüfgüter dieser Laborvergleichsuntersuchung enthielt **Ascorbinsäure**. Lediglich das Rotwein-Prüfgut FT17P03 hatte keinen derartigen Zusatz erfahren. Da im Fall der jodometrischen Bestimmung der Schwefligen Säure auch bei diesem Prüfgut grundsätzlich eine Bestimmung der Reduktone erforderlich war, wurde bei allen Prüfgütern eine Bestimmung der Reduktone und die Mitteilung des Untersuchungsergebnisses aufgegeben. Wegen der Oxydationsempfindlichkeit der Ascorbinsäure wurde für die Prüfgüter, die diesen Stoff enthielten, eine Reaktionszeit von 5 Minuten zur Bindung der Freien Schwefligen Säure durch einen Aldehyd empfohlen, während für das Rotwein-Prüfgut ohne Ascorbinsäurezusatz die Empfehlung auf 20 Minuten lautete.

Zur Bewertung der Laborergebnisse für **Reduktone** und **Freie Schweflige Säure** wurde das Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) stets nach Horwitz als für ein geeignetes und beherrschtes Analysenverfahren zu erwartende Vergleichsstandardabweichung berechnet. Für die Bewertung der Ergebnisse für Freie Schweflige Säure nach Reduktionabzug wurde 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 diente stets der Median der jeweils betrachteten Ergebnisse, d.h. 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** wurde die gültige Bewertung stets durch den Vergleich mit dem Median der Ergebnisse von Destillationsverfahren durchgeführt, da diese definitionsgemäß den wahren Gehalt an Gesamter Schwefliger Säure ergeben. Lediglich zur Information wurden die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen jeweils einschließlich und ausschließlich des Beitrages 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.

2.4.3.6 Kohlensäure und Überdruck

Nach der Regelung der Methoden, die zur Bestimmung des (Kohlensäure)Überdrucks im Qualitätsweinprüfungsverfahren anzuwenden sind, und der ergänzenden Zulassung des Mehrfachvolumenexpansionsverfahrens zur Bestimmung des Kohlendioxidgehaltes durch die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz wurde erstmals ein von diesen Regelungen erfasstes Prüfgut in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzt. Daher wurden in den Unterlagen zur Ergebnismitteilung und in der Auswertung zusätzliche Differenzierungen erforderlich. Die Ergebnisse konnten sowohl als Kohlensäure in der Einheit [g/L] als auch als (Kohlensäure)Überdruck in der Einheit [bar] mitgeteilt werden. Es war aber ausdrücklich erbeten, keine laboreigenen Umrechnungsformeln zur Errechnung des (Kohlensäure)Überdrucks aus Bestimmungsergebnissen, die ursprünglich als Kohlensäure (CO₂) ermittelt wurden, anzuwenden. Denn für diese Umrechnung ist im Rahmen der amtlichen Qualitätsweinprüfung die Anwendung der Formel nach Agabalianz aus der Methode OIV-MA-AS314-01 vorgegeben. Die Ergebnisse manometrischer Bestimmungen werden als Parameter "Überdruck" und die Ergebnisse der Kohlensäurebestimmungen als Parameter "Kohlensäure (CO₂)" wiedergegeben und besprochen. Soweit Ergebnisse für Kohlensäure in g/L mitgeteilt wurden, erfolgte die Umrechnung nach der vorgegebenen Formel durch den Auswerter. Die Ergebnisse dieser Umrechnung sind als Parameter "CO₂-Überdruck" dargestellt. Diese Bezeichnung wurde gewählt, weil in die Formel nach Agabalianz – soweit bekannt – ausschließlich der bestimmte Gehalt an Kohlendioxid eingeht, während bei der manometrischen Messung ebenso wie bei bestimmten Umrechnungsformeln der Hersteller von Geräten zur Bestimmung des Kohlensäuregehaltes auch der Beitrag der Fremdgase Stickstoff und Sauerstoff berücksichtigt wird.

3 Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen

Die allgemeinen Ausführungen in diesem Abschnitt wie im vorangegangenen Abschnitt gelten für alle in dieser Laborvergleichsuntersuchung bearbeiteten Proben und Parameter. Auf sie wird gegebenenfalls in den weiteren Teilen der Berichterstattung verwiesen. Im Detail wird nachfolgend auf das Gesamtergebnis für das Prüfgut FT17P01 und im folgenden Abschnitt 4 auf prüfgutübergreifenden Ergebnisse für einzelne Parameter eingegangen.

3.1 Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses

Einen laborübergreifenden Überblick über die Untersuchungsergebnisse belegt für jedes Prüfgut eine Zusammenstellung deskriptiv-statistischer Ergebnisse wie hier für die Probe FT17P01 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 für das jeweilige Prüfgut und dienen dessen Bewertung.

Für die Entscheidung über die Eignung der Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung zur Bewertung der Laborleistung sind vorrangig die Ergebnisse der herkömmlichen Untersuchungsverfahren maßgeblich. Die Bewertung der einzelnen Laborleistung durch die Z-Score nimmt sowohl für die Ergebnisse herkömmlicher als auch der FTIR-Untersuchungen Bezug auf den Median dieser Ergebnisse als 'wahren Wert'. Die Berechnung der Z-Score erfolgt jedoch in der Regel für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse mit unterschiedlichen Zielstandardabweichungen. Daher enthält Tabelle 3 wie die entsprechenden Tabellen für die weiteren Prüfgüter für Parameter, die mit dem FTIR-Verfahren bestimmt wurden, in jeder der beiden Spalten „Zielstdabw. exp. herk. s_{exp} “ und „Zielstdabw. exp. FTIR $s_{\bar{U}}$ “ einen Eintrag. Dies berücksichtigt die Empfehlungen des „Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinanalytik“ (siehe auch Abschnitt 2.4.1).

Grundlagen der Bewertung des Gesamtergebnisses sind bei allen Proben:

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

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

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

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

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

Erläuterungen zur Tabelle 3:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für die Perlweinprobe (FT17P01)

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. S _L	Zielstdabw	Zielstdabw	Zielstdabw	S _L /S _H	S _L /S _{exp}	Quotienten		
						n. Horwitz S _H	exp. herk. S _{exp}	exp. FTIR S _Ü			S _L /S _Ü	u _M /s _{Ziel}	u _M /s _Ü
Relative Dichte 20 °C/20 °C	105	104	1,00243	1,00240	0,000140		0,000132	0,000190		1,06	0,74	0,10	0,07
Gesamtalkohol (g/L)	90	90	88,218	88,300	0,758	2,545	1,063	1,063	0,30	0,71	0,71	0,08	0,08
Vorhandener Alkohol (g/L)	41	41	78,224	78,200	0,668	2,295	0,535	0,886	0,29	1,25	0,75	0,19	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	95	94	40,90	40,90	0,438	1,323	0,594	0,594	0,33	0,74	0,74	0,08	0,08
Zuckerfreier Extrakt (g/L)	93	93	19,97	19,90	0,893	0,718	1,048	1,048	1,24	0,85	0,85	0,09	0,09
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch + HPLC	62	62	21,13	21,19	0,484	0,757	0,615	0,615	0,64	0,79	0,79	0,10	0,10
- (reduktom.) (g/L)	36	36	20,54	20,52	0,748	0,737	0,597	0,597	1,02	1,25	1,25	0,21	0,21
Glucose (g/L)	60	60	6,234	6,265	0,182	0,269	0,212	0,408	0,68	0,86	0,45	0,11	0,06
Fructose (g/L)	59	59	14,86	14,92	0,381	0,562	0,446	0,446	0,68	0,85	0,85	0,11	0,11
Glycerin (g/L)	24	24	5,037	5,015	0,247	0,223		0,348	1,11		0,71	0,23	0,15
pH-Wert	51	50	3,155	3,160	0,0810		0,0476	0,0493		1,70	1,64	0,24	0,23
Gesamtsäure (g/L)	100	92	6,778	6,800	0,150	0,288	0,107	0,145	0,52	1,40	1,04	0,15	0,11
Weinsäure (g/L)													
- HPLC + IC	13	13	2,741	2,700	0,124	0,132		0,227	0,95		0,55	0,26	0,15
- alle herkömmlichen Verfahren	34	34	2,724	2,700	0,223	0,132	0,227	0,227	1,70		0,98	0,17	0,17
Flüchtige Säure (g/L)	24 (2)	20	0,414	0,429	0,0601	0,0276	0,0286	0,0891	2,18	2,11	0,68	0,47	0,15
Acetat als Essigsäure (g/L)	28	27	0,396	0,400	0,0492	0,0260			1,90			0,36	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)													
- herkömmliche Verfahren	14	14	2,835	2,840	0,175	0,137	0,0900	0,218	1,28	1,95	0,80	0,52	0,21
- herk. Verfahren + ¹ H-NMR	18	18	2,843	2,850	0,155	0,138	0,0903	0,218	1,13	1,72	0,71	0,40	0,17
L-Äpfelsäure (g/L)	30	28	2,833	2,803	0,136	0,136	0,0891		1,00	1,52		0,29	
Gesamte Milchsäure (g/L)	15 (1)	12	0,143	0,144	0,0308	0,0109		0,209	2,83		0,15	0,82	0,04
L-Milchsäure (g/L)	21 (1)	21	0,0718	0,0700	0,0271	0,0059	0,0207		4,59	1,31		0,29	
Reduktone (mg/L)	100 (4)	100	47,05	47,50	6,16	4,25			1,45			0,14	
Freie Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillation + Photometrie	19	19	56,06	56,00	5,04	4,89			1,03			0,24	
- wie vorstehend+FTIR	37	37	53,12	53,90	5,80	4,73			1,23			0,20	
- jodometrisch incl. Reduktone	95 (1)	94	100,19	100,00	8,38	8,00			1,05			0,11	
- jodometrisch excl. Reduktone	95 (1)	95	53,80	54,00	6,36	4,74	8,00		1,34	0,79		0,08	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillationsverfahren	50	48	153,24	153,00	7,95	11,48	5,36		0,69	1,48		0,21	
- jodometrisch incl. Reduktone	64	58	198,64	197,00	11,49	14,23	5,36		0,81	2,14		0,28	
- jodometrisch excl. Reduktone	64	60	152,93	155,00	10,957	11,61	5,36		0,94	2,05		0,26	
Kohlensäure(CO ₂) (g/L)	17	16	4,750	4,785	0,250	0,214			1,17	0,82		0,20	
Überdruck (bar)	75 (1)	75	2,381	2,410	0,232		0,215			1,08		0,12	
CO ₂ -Überdruck (bar)	16	15	2,296	2,317	0,177		0,215			0,82		0,21	

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

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

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

3.2 Gesamtergebnis für das Perlweinprüfgut (FT17P01)

Bei dem Prüfgut FT17P01 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 auszuschließender Laborergebnisse ergaben sich für die Parameter Gesamtsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Milchsäure, Reduktone und den hiervon abhängigen Parameter jodometrische bestimmte Gesamte Schweflige Säure. Lediglich beim Parameter Reduktone wichen alle unberücksichtigt bleibenden Ergebnisse um mehr als 50 % vom Median ab, während bei dem Parameter **Gesamtsäure** alle ausgeschlossenen Laborergebnisse einen positiven Wert des Z-Score über 5 aufwiesen. Der Höchstanteil von 22 % wurde bei Einschluß der Ausreißer bei den Parametern **Flüchtige Säure** und **Gesamte Milchsäure** überschritten bzw. bei deren Nichtberücksichtigung zumindest erreicht.

Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} wurde bei den Ergebnissen herkömmlicher Analytik ganz überwiegend eingehalten. Dies gilt insbesondere für die Parameter **Kohlensäure (CO₂)**, **Überdruck** und **CO₂-Überdruck**, für die nahe bei eins liegende Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der Zielstandardabweichung erhalten wurden. Es sollte allerdings nicht unbeachtet bleiben, dass die Vergleichsstandardabweichung für Perlweine aus der Methode OIV-MA-AS341-01 die nach Horwitz zu erwartende Vergleichsstandardabweichung etwa um den Faktor 1,5 übersteigt und ihre Verwendung als Zielstandardabweichung daher keine besondere Leistungen fordert.

Im Toleranzbereich erhöhte Werte für den Quotienten s_L/s_{Ziel} ergaben sich bei den Parametern pH-Wert, Acetat und Gesamte Äpfelsäure. Der Höchstwert von 2,0 wurde bei den Parametern Flüchtige Säure, Gesamte Milchsäure sowie jodometrisch bestimmten Gehalten an Gesamter Schwefliger Säure bei Bewertung mit der Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens überschritten.

Während bei den Parametern pH-Wert und jodometrisch bestimmter Gesamter Schwefliger Säure bedingt durch die große Anzahl vorliegender Laborergebnisse unauffällige Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " resultieren und die Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben ist, weisen die Parameter Flüchtige Säure, Acetat, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure auch erhöhte Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " auf. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist beeinträchtigt sowie bei den Ergebnissen der Bestimmung der Gesamten Milchsäure nicht mehr gegeben. Eine mangelnde Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist bei einer kritischen Betrachtung der Z-Score zugunsten des einzelnen Teilnehmers zu berücksichtigen.

Das Gesamtergebnis für die Parameter **Flüchtige Säure** und **Gesamte Milchsäure** ist durch eine über dem Höchstwert von 22 % liegende Ausschlussquote von Laborergebnissen und selbst danach über den Höchstwert von 2,0 erhöhter Quotienten s_L/s_{Ziel} sowie erheblich erhöhter Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " gekennzeichnet. Daher kann für diese Parameter **keine gültige Bewertung der Laborleistung durch die Z-Score** erreicht werden. Dabei ist die Situation im Detail durchaus unterschiedlich. Bei dem Parameter **Flüchtige Säure** war mit 0,43 g/L ein Median gegeben, der nahe bei dem Mittelwert von 0,45 g/L liegt, den die im methodenprüfenden Ringversuch zur OIV-Methode eingesetzten Prüfgüter aufwiesen. Es kann daher erwartet werden, dass die Vergleichsstandardabweichung aus diesem Ringversuch mit 0,029 g/L eine geeignete Zielstandardabweichung darstellt. Die Standardabweichung der Laborergebnisse überschritt diesen Betrag jedoch hoch signifikant und zeigt damit eine unzureichende Beherrschung des begriffbestimmenden Referenzverfahrens an. Dahingegen lag bei dem Parameter **Gesamte Milchsäure** mit einem Median von 0,144 g/L der **Gehalt sehr niedrig**. Es ist anzunehmen, dass dieser Gehalt im Bereich der Bestimmungsgrenze für die überwiegend eingesetzte Bestimmungsmethode der Hochleistungsflüssigkeitschromatographie liegt. Zwei Teilnehmer haben ein Unterschreiten der Bestimmungsgrenze mitgeteilt. Im Bereich der Bestimmungsgrenze wird die nach Horwitz berechnete Zielstandardabweichung häufig deutlich überschritten. Daher ist das unbefriedigende Gesamtergebnis für diesen Parameter nicht überraschend und gibt **keinen Hinweis** auf eine **generell unbefriedigende** Leistung der überwiegend eingesetzten Methode oder der Labors.

Für jodometrisch bestimmte **Gesamte Schweflige Säure** ergibt sich die **gültige** Bewertung der Laborleistung aus dem **Z-Score**, der nach Abzug des Reduktonwertes im Vergleich zum Median der Ergebnisse aus **Destillationsverfahren** berechnet wird. Die Überschreitung des Höchstwertes 2,0 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} zeigt daher vor allem an, dass bei jodometrisch bestimmten Werten mit einer erhöhten Streuung der Laborergebnisse zu rechnen und der Einsatz des Destillationsverfahrens zur Ermittlung präziser Werte in Grenzbereichen erforderlich ist.

Bei zusammenfassender Betrachtung aller Kriterien zur Ermittlung **gültige Z-Score** ergibt sich, dass für die **verbleibenden der Parameter** – mit Ausnahme der Parameter Acetat und Gesamte Äpfelsäure, zu denen eine prüfgutübergreifende Diskussion der Ergebnisse im Abschnitt 4 erfolgt – **eine aussagekräftige Bewertung** der Laborleistung **ohne Beachtung zusätzlicher Gesichtspunkte** gegeben ist.

Von den 92 teilnehmenden Laboratorien, die durch die Landwirtschaftskammer zugelassen sind, wurden die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden zwischen einmal (Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Freie Schweflige Säure) und zwölfmal (Gesamte Schweflige Säure) nicht erfolgreich bestimmt, d.h. der Absolutbetrag des Z-Score überschritt den Wert 3 ($|Z| > 3$). Dazwischen lagen die Laborergebnisse für Gesamtsäure (neun falsche Ergebnisse) und Vergärbare Zucker (zwei falsche Ergebnisse). Die Laborergebnisse für Gesamte Schweflige Säure bei jodometrischer Bestimmung wurden nach Abzug der Reduktone mit der Zielstandardabweichung des Referenzverfahrens bewertet. Da die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen eine größere Streubreite aufweisen als für das Destillationsverfahren vorgegeben, werden jodometrische Laborergebnisse häufiger als falsch bewertet, während die erhöhte Anzahl fehlerhaft bestimmter Gesamtsäurewerte typisch für kohlenensäurehaltige Erzeugnisse ist und bei positivem Wert des Z-Score mangelnde Sorgfalt bei der Entfernung der Kohlensäure vor der Titration anzeigt.

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

Bei einigen Parametern sind zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden weitergehende Anmerkungen unter Berücksichtigung der Ergebnisse an allen Prüfgütern sinnvoll. Sind nur einzelne Prüfgüter betroffen, erfolgen die Ausführungen in den weiteren Teilen des Berichtes.

4.1 Flüchtige Säure und Acetat

4.1.1 Flüchtige Säure

Die Auswertung der Laborergebnisse für diesen in der Regel nicht unproblematischen Parameter erfolgte gemäß den im Abschnitt 2.4.3.4 dargestellten Regeln. Diesen folgend wurde die Zielstandardabweichung $\pm 0,029$ g/L angewandt. Ausgenommen war das Prüfgut FT17P03, für das der Median der Laborergebnisse über 0,45 g/L lag. Für dieses wurde die Zielstandardabweichung nach Horwitz zu $\pm 0,0339$ g/L ermittelt. Weiterhin blieb der Gehalt an Sorbinsäure bei dem Prüfgut **FT17P05** unberücksichtigt. Allerdings ist das Vorhandensein der **Sorbinsäure** unbedingt zu beachten, wenn für dieses Prüfgut die Ergebnisse für Flüchtige Säure mit den Ergebnissen der Acetatbestimmung verglichen werden.

Eine Zusammenfassung der Gesamtergebnisse zu diesem Parameter für alle Prüfgüter gibt die Tabelle 4, in der die Anzahl der berücksichtigten Laborergebnisse, der jeweilige Mittelwert, die Standardabweichung der Laborergebnisse (StdAbw s_L) und die Kenndaten zur Methodenbe-

herrschaft (Quotient s_L/s_{Ziel}) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel}) zusammengefasst sind.

Tabelle 4: Ergebnisse der Bestimmung der Flüchtigen Säure [g/L]

Probe	Gültige Werte (*)	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	20 (6)	0,414	0,0601	2,11	0,47
FT17P02	18 (1)	0,334	0,0672	2,35	0,55
FT17P03	19 (2)	0,590	0,0594	1,68	0,39
FT17P04	21 (0)	0,287	0,0416	1,45	0,32
FT17P05	19 (3)	0,268	0,0638	2,23	0,51

(*) Hier und in den weiteren Tabellen zusätzlich ausgeschlossene Laborergebnisse

Wegen Abweichung vom Median über 50 % oder eines Z-Score über dem absoluten Betrag 5 wurde die in der Spalte 'Gültige Werte' jeweils in Klammern angegebene Anzahl an (zusätzlichen) Laborergebnissen zwischen Null (FT17P04) und sechs (FT17P01) Laborergebnissen wegen eines absoluten Betrages des Z-Score über 5 ausgeschlossen. Der Richtwert 1,5 für den Quotienten aus Laborstandardabweichung und Zielstandardabweichung s_L/s_Z wurde mit Ausnahme des Prüfgutes FT17P04 stets und der Höchstwert 2,0 bei drei der fünf Prüfgüter überschritten. Gleiches gilt für die Zuverlässigkeit der Bezugswerte, die bei zwei Prüfgütern eingeschränkt und zwei weiteren nicht gegeben ist. Gültige Z-Score wurden daher nur für die Prüfgüter FT17P03 und FT17P04 erhalten. Bei den übrigen Prüfgütern sind sie nur von informativischer Bedeutung. Es gilt also weiterhin, dass die Bestimmungsmethode nicht befriedigend beherrscht wird. Eine Ursache hierfür kann sein, dass im Bereich der vorliegenden önologisch unauffälligen Gehalte die gegebene Ergebnisqualität als ausreichend betrachtet wird.

4.1.2 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

Zum Parameter Acetat wurden Untersuchungsergebnisse mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) sowie automatisierter und manueller enzymatischer Bestimmung eingesandt. Zusätzlich wurden Ergebnisse mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie (^1H -NMR) mitgeteilt. Zur Beschreibung wurden die robusten statistischen Kennzahlen gewählt, weil bei der meist geringen Anzahl der Laborergebnisse je Prüfgut und Methode die im Rahmen der Laborvergleichsuntersuchung angewendeten Regeln für den Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse nicht sinnvoll anwendbar sind und durch die Festlegung der Zielstandardabweichung in die Datenstruktur stark eingreifen können. Die Tabelle 5 fasst die ermittelten deskriptiven Daten nach Methoden zusammen.

Tabelle 5: Robuste deskriptive Ergebnisse der Bestimmung von Acetat [g/L]

Probe	HPLC			enzymat., automat.			enzymat., manuell			^1H -NMR		
	Zahl	Mittel	Std.Abw.	Zahl	Mittel	Std.Abw.	Zahl	Mittel	Std.Abw.	Zahl	Mittel	Std.Abw.
FT17P01	4	0,392	0,0714	22	0,408	0,0440	2	0,302	0,0300	6	0,314	0,0246
FT17P02	3	0,301	0,1314	17	0,310	0,0411	2	0,222	0,0281	7	0,232	0,0189
FT17P03	4	0,597	0,1162	19	0,568	0,0629	2	0,463	0,0321	7	0,513	0,0447
FT17P04	2	0,265	0,1363	18	0,210	0,0309	2	0,177	0,0112	7	0,189	0,0193
FT17P05	3	0,237	0,1182	18	0,172	0,0239	2	0,119	0,0104	7	0,139	0,0156

In Abhängigkeit von der Untersuchungsmethode zeigen die Ergebnisse ein Muster dahingehend auf, dass die Ergebnisse der manuell enzymatischen und der Bestimmung mit ^1H -NMR

geringere Mittelwerte und Standardabweichungen aufweisen als die Ergebnisse der automatisierten enzymatischen und der Bestimmung mit HPLC. Die mittels HPLC erhaltenen Ergebnisse wiesen für alle Prüfgüter die größte Streuung auf, wobei zu berücksichtigen ist, dass zumindest für die Prüfgüter FT1P04 und FT17P05 der Acetatgehalt im Bereich der Bestimmungsgrenze dieses Verfahrens liegt. Zusammenfassend bestätigen diese Ergebnisse gleichartige Beobachtungen an den Ergebnissen anderer Laborvergleichsuntersuchungen. Systematische methodenprüfende Untersuchungen zur Ursache der nach unterschiedlichen Reaktionsketten bestimmten manuellen und automatisierten enzymatischen Bestimmungen erscheinen angezeigt.

Analog zur Zusammenfassung aller Ergebnisse für Flüchtige Säure in Tabelle 4 sind in der Tabelle 6 die Gesamtergebnisse der Bestimmungen des Acetats als Essigsäure zusammengestellt. Hierbei blieben die Untersuchungsergebnisse mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie unberücksichtigt, d.h. es wurden nur die Ergebnisse herkömmlicher Methoden berücksichtigt. Die automatisiert enzymatisch erhaltenen Werte prägen wegen ihres großen Anteiles an den Laborergebnissen den Bezugswert, während die Streuung der Laborergebnisse durch die Streuung der HPLC-Ergebnisse und den systematischen Unterschied zwischen den Ergebnissen der manuellen und der automatisierten enzymatischen Bestimmungen verstärkt wird. Zur Bewertung der Laborergebnisse steht bei diesem Parameter keine experimentell ermittelte Vergleichsstandardabweichung zur Verfügung. Die Zielstandardabweichung wurde daher nach Horwitz berechnet. Bei den vorliegenden Gehalten liegt deren Betrag zwischen $\pm 0,013$ und $\pm 0,034$ und stellt damit bei der Mehrzahl der Prüfgüter höhere Anforderungen als die für Flüchtige Säure angewandte Zielstandardabweichung. Dies trägt dazu bei, dass die Werte der Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der Zielstandardabweichung s_L/s_H sowie der Unsicherheit des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung u_M/s_H hoch sind.

Tabelle 6: Ergebnisse der Bestimmung von Acetat (als Essigsäure) [g/L]

Probe	Gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	27 (1)	0,396	0,0492	1,90	0,36
FT17P02	21 (1)	0,296	0,0502	2,47	0,54
FT17P03	24 (1)	0,557	0,0645	1,90	0,39
FT17P04	21 (1)	0,207	0,0302	2,02	0,44
FT17P05	21 (2)	0,164	0,0284	2,26	0,49

Die Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der Zielstandardabweichung lagen bei den Prüfgütern FT17P01, FT17P03 und FT17P04 zwischen 1,9 und 2,0 und waren mit der Folge eingeschränkter Zuverlässigkeit der Bezugswerte (Quotient $u_M/s_{Ziel} > 0,3$) stark erhöht. Bei den Prüfgütern **FT17P02** und **FT17P05** lagen die Quotienten aus der Standardabweichung der Laborergebnisse über 2,0 und der Bezugswert war nicht ausreichend sicher. Während für diese Prüfgüter **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden konnten, war dies formal für die Prüfgüter **FT17P01, FT17P03 und FT17P04 noch möglich**. Bei deren abschließender laborinterner Bewertung ist aber die eingeschränkte Zuverlässigkeit der Bezugswerte zu berücksichtigen.

Das Gesamtergebnis für diesen Parameter ist in Anbetracht der ausgenscheinlichen systematischen Unterschiede zwischen den eingesetzten Methoden nicht befriedigend.

4.2 Gesamte und L-Äpfelsäure

Bei Prüfgütern, die wie im vorliegenden Fall keinen Zusatz von D-Äpfelsäure erfahren haben, ist für die Parameter Gesamte und L-Äpfelsäure eine weitgehende Übereinstimmung der Bezugswerte bzw. Mittelwerte zu erwarten. Dies belegen die in Tabelle 7 und in Tabelle 8 zusammengestellten statistischen Kennzahlen für die laborübergreifenden Gesamtergebnisse aller Prüfgüter. Zugleich ist gemessen an der Zielstandardabweichung die Vergleichbarkeit der Laborergebnisse für beide Parameter nicht befriedigend.

Tabelle 7: Ergebnisse der Bestimmung von Gesamter Äpfelsäure [g/L]

Probe	Anzahl Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	14 (0)	2,835	0,175	1,95	0,52
FT17P02	12 (0)	3,089	0,148	1,54	0,44
FT17P03	10 (2)	0,636	0,122	3,59	1,13
FT17P04	10 (1)	2,188	0,127	1,74	0,55
FT17P05	13 (0)	1,331	0,093	1,83	0,51

Für den Parameter Gesamte Äpfelsäure, der überwiegend mittels Hochleistungsflüssigkeitschromatographie bestimmt wurde, liegen bei einer je Prüfgut relativ geringen Anzahl gültiger Laborergebnisse die Quotienten s_L/s_{Ziel} alle über dem Richtwert und im Falle des Prüfgutes **FT17P03** mit einem Gehalt von 0,6 g/L mit 3,6 erheblich über dem Höchstwert 2,0 für die Ermittlung gültiger Z-Score. Zugleich ist keine Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben. Mit hin können für dieses Prüfgut **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Die Zuverlässigkeit der Bezugswerte ist für die Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden auch bei den Prüfgütern **FT17P01**, **FT17P04** und **FT17P05** nicht gegeben. Doch wird dies bei den von D-Äpfelsäure freien Prüfgütern durch die praktisch übereinstimmenden Bezugswerte für L-Äpfelsäure ausgeglichen, sodass die für diese Prüfgüter ausgewiesenen Z-Score **formal als gültig** behandelt werden können. Lediglich für das Prüfgut **FT17P02** mit dem höchsten Gehalt an Gesamter Äpfelsäure wurden **uneingeschränkt gültige Z-Score** erhalten. Für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse ist die gegebene Unsicherheit des Bezugswertes in Anbetracht der angewandten, Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung ausreichend.

Obwohl bei enzymatischen Bestimmungsmethoden in der Regel eher eine geringere Streuung der Laborergebnisse als bei der Anwendung der HPLC beobachtet wird, sind die Gesamtergebnisse für den Parameter L-Äpfelsäure, wie Tabelle 8 verdeutlicht, nur wenig befriedigender als für den Parameter Gesamte Äpfelsäure.

Tabelle 8: Ergebnisse der Bestimmung von L-Äpfelsäure [g/L]

Probe	Anzahl Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	28 (2)	2,833	0,156	1,52	0,29
FT17P02	22 (1)	3,074	0,150	1,57	0,34
FT17P03	21 (6)	0,538	0,066	2,11	0,46
FT17P04	25 (1)	2,101	0,119	1,62	0,32
FT17P05	26 (1)	1,301	0,084	1,66	0,33

Auch bei diesem Parameter liegt für alle Prüfgüter der Quotient s_L/s_{Ziel} über dem Richtwert und überschreitet bei dem Prüfgut **FT17P03** den zulässigen Höchstwert, wobei zugleich der Anteil

ausgeschlossener Laborergebnisse den Höchstert von 22,2 % einstellt. Auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist stark beeinträchtigt. Daher können für dieses Prüfgut **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden.

Für beide Parameter wird die Zielstandardabweichung aus der Vergleichsstandardabweichung des enzymatischen Bestimmungsverfahrens nach Methode OIV-MA-AS313-11 abgeleitet. Für die Bestimmung mittels HPLC ist keine aus einem methodprüfenden Ringversuch abgeleitete Vergleichsstandardabweichung bekannt. Zusammenfassend stellt sich daher für beide Parameter die fachliche Frage, ob die 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 ein **geeignetes Leistungskriterium** in Form einer Standardabweichung **entwickelt werden sollte**.

4.3 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure

Bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfgütern ergab sich zufällig eine Häufung geringer Gehalte an Milchsäure. Für den Parameter Gesamte Milchsäure gibt Tabelle 9 eine Übersicht der Gesamtergebnisse für alle Prüfgüter.

Tabelle 9: Ergebnisse der Bestimmung von Gesamter Milchsäure [g/L]

Probe	Anzahl Werte		Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient	
	gültige	< BG			s_L/s_{Ziel}	u_M/s_{Ziel}
FT17P01	12 (4)	2	0,143	0,0308	2,93	0,82
FT17P02	12 (3)	2	0,178	0,0346	2,61	0,75
FT17P03	17 (2)	0	3,270	0,2040	1,31	0,32
FT17P04	14 (1)	1	0,665	0,0653	1,60	0,43
FT17P05	14 (3)	1	0,191	0,0270	1,84	0,49

Nur das Prüfgut **FT17P03** wies einen hohen Gehalt von 3,3 g/L auf, der bei einem unauffälligen Quotienten s_L/s_{Ziel} von 1,3 und einen zuverlässigen Bezugswert im Gesamtergebnis sicher bestimmt wurde, sodass uneingeschränkt **gültige Z-Score** erhalten wurden. Bereits bei dem Prüfgut **FT17P04** mit einem Gehalt von 0,68 g/L war der Quotient s_L/s_{Ziel} mit 1,6 mäßig erhöht und die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt. Bei den Prüfgütern **FT17P01**, **FT17P02** und **FT17P05** lagen die Medianwerte der Laborergebnisse unter 0,2 g/L und damit wohl im Bereich der Bestimmungsgrenze der überwiegend zur Bestimmung eingesetzten Hochleistungsflüssigkeitschromatographie. Das ergibt sich auch daraus, dass zu diesen Prüfgütern, wenn auch nur vereinzelt, eine entsprechende Mitteilung erfolgte. Bei den Prüfgütern **FT17P01** und **FT17P02** konnten **keine gültigen Z-Score** erhalten werden und auch bei dem Prüfgut **FT17P05** ist die Zuverlässigkeit des Bezugswertes nicht gegeben und damit die Gültigkeit der **Z-Score eingeschränkt**.

Zu dem Parameter **L-Milchsäure** teilten wie Tabelle 10 ausweist bei den Prüfgütern FT17P01, FT17P02 und FT17P05 bis zu 6 Teilnehmer – vor allem als Ergebnis der automatisierten enzymatischen Analytik und damit in Abhängigkeit von den gewählten standardisierten Arbeitsbedingungen – ein Unterschreiten ihrer Bestimmungsgrenze mit. Dies geschah allerdings überwiegend nicht normgerecht durch die Mitteilung des Wertes Null als Untersuchungsergebnis.

Tabelle 10: Ergebnisse der Bestimmung von L-Milchsäure [g/L]

Probe	Anzahl Werte		Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient	
	gültige	< BG			s_L/s_{Ziel}	u_M/s_{Ziel}
FT17P01	21 (1)	6	0,0718	0,0271	1,31	0,29
FT17P02	17 (1)	5	0,0699	0,0315	1,53	0,37
FT17P03	24 (2)	0	2,709	0,2064	1,49	0,30
FT17P04	23 (1)	0	0,533	0,0563	1,36	0,28
FT17P05	19 (1)	6	0,0677	0,0312	1,54	0,35

Danach liegen, wenn auch auf niedrigerem Niveau als bei dem Parameter Gesamte Milchsäure, bei diesen Prüfgütern die Gehalte im Bereich der Bestimmungsgrenze. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass Im methodenprüfenden Ringversuch, dessen Ergebnissen die Zielstandardabweichung entommen ist, keine Proben aus dem vorliegenden Konzentrationsbereich untersucht wurden. Die ermittelte Vergleichsstandardabweichung sinkt nicht unter einen Betrag von 0,02 und beträgt bei diesen Prüfgütern ein Vielfaches der nach Horwitz für ein geeignetes und beherrschtes Analyseverfahren zu erwartenden Vergleichsstandardabweichung. Dennoch können die erhaltenen **Z-Score** zumindest als **formal gültig** betrachtet werden, da bei allen Prüfgütern für die als Zahlenwert mitgeteilten Laborergebnisse ein Quotient s_L/s_{Ziel} zwischen 1,3 und 1,5 erhalten und eine ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes erreicht wurde.

4.4 Schweflige Säure und Reduktone

Die im Rahmen dieser Laborvergleichsuntersuchung zum Erhalt vergleichbarer und bewertbarer Ergebnisse für die Parameter Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure zu beachtenden Regeln wurden im Abschnitt 2.4.3.5 behandelt. Nachfolgend werden deren Einhaltung sowie das laborübergreifende Gesamtergebnis für diese Parameter besprochen.

4.4.1 Reduktone

Die Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone sind in Laborvergleichsuntersuchungen in der Regel wenig befriedigend. Im vorliegenden Fall war im Falle jodometrischer Bestimmung der Schwefligen Säure für alle fünf Prüfgüter die Bestimmung der Reduktone und die Mitteilung des Ergebnisses erforderlich. Diese Auflage wurde nur von wenigen Teilnehmern, teils durch Unterlassen der Reduktonbestimmung und teils durch fehlende Mitteilung des Reduktonwertes nicht beachtet. Das Gesamtergebnis ist für alle fünf Prüfgüter in der Tabelle 11 durch beschreibende statistische Kennzahlen zusammengefasst.

Tabelle 11: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone

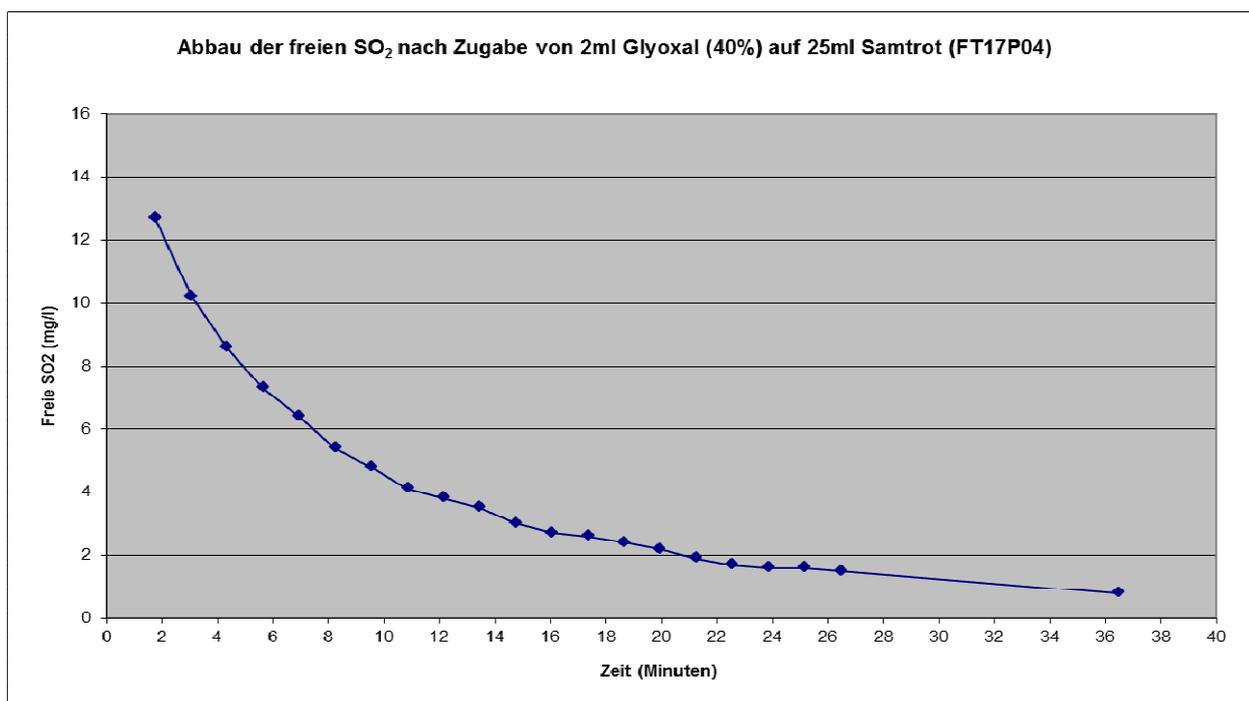
	Alle Werte	Ausreißer	Gültige Werte	Mittelwert	Labor-	Zielstdabw	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
					Stdabw. s_L	n. Horwitz s_H		
FT17P01	104	4	100	47,05	6,16	4,25	1,45	0,14
FT17P02	47	5	42	29,56	4,34	2,80	1,55	0,24
FT17P03	49	14	35	12,63	3,28	1,14	2,33	0,39
FT17P04	44	2	42	47,26	8,16	4,29	1,90	0,29
FT17P05	49	4	45	20,83	3,52	2,13	1,66	0,25

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

Es ist ersichtlich, dass – anders als bei Vorliegen natürlicher Reduktion wie bei dem Prüfgut FT17P03 – der Anteil stark abweichender Laborergebnisse bei den Ascorbinsäure enthaltenden Prüfgütern mit 4% bis 10 % unauffällig ist, während bei dem Prüfgut FT17P03 mit 28,6 % der Höchstanteil von 22,2 % ausgeschlossenen Laborergebnissen überschritten ist. Ebenso sind die Quotienten s_L/s_{Ziel} bei den Ascorbinsäure enthaltenden Prüfgütern mit Werten zwischen rund 1,5 und 1,9 nur mäßig erhöht, wobei sich ein Einfluss der Weinfarbe auf die Streuung der Laborergebnisse andeutet, wenn man – bei vergleichbaren Reduktonwerten – die Unterschiede der Quotienten s_L/s_{Ziel} bei den Prüfgütern FT17P01 und FT17P04 betrachtet. In allen Fällen war infolge der großen Zahl an Laborergebnissen eine ausreichende Sicherheit des Bezugswertes gegeben. Mit **Ausnahme** des Prüfgutes **FT17P03**, bei dem auch der Quotient s_L/s_{Ziel} den Höchstwert überschritt, resultierte somit eine **gültige Bewertung** durch Z-Score.

Eine wesentliche Voraussetzung für vergleichbare Ergebnisse der Reduktonbestimmung ist die Einhaltung sachgerechter Reaktionszeiten zur Abbindung der Freien Schwefligen Säure. Die insbesondere im Hinblick auf die Oxydationsempfindlichkeit der Ascorbinsäure bzw. die vorliegende Weinart gegebenen Empfehlungen, wurde bei den Ascorbinsäure enthaltenden Prüfgütern von jeweils 50 % bis 60 % der Teilnehmer beachtet, während die verlängerte Reaktionszeit von 20 Minuten für das Rotweinprüfgut FT17P03 nur von 40 % der Teilnehmer befolgt wurde. Eine gesicherte Abhängigkeit der Reduktonwerte von der Reaktionszeit war, auch infolge des Grades der Beachtung der Empfehlungen, bei keinem Prüfgut nachweisbar.

Für das Ascorbinsäure enthaltende Rotweinprüfgut FT17P04 bedeutete die Empfehlung einer Reaktionszeit von 5 Minuten einen Kompromiss zugunsten einer möglichst vollständigen Erfassung der Ascorbinsäure mit dem Risiko der Miterfassung Freier Schwefli-ger Säure. Dies veranschaulicht die nachfolgende graphische Darstellung der Ergebnisse einer von Dr. Nilles, Volkach, am diesem Prüfgut durchgeführten Bestimmung des Restgehaltes an Freier Schwefli-ger Säure in Abhängigkeit von der Reaktionszeit.



Danach ist bei Einhalten der empfohlenen Reaktionszeit ein Restanteil von etwa 8 mg/L Freier Schwefliger Säure im ermittelten Reduktonwert zu erwarten, während bei einem Weißwein nach dieser Reaktionszeit der Restanteil im Bereich der Bestimmungsgrenze liegt.

Zusammenfassend bewertet ist die Vergleichbarkeit der Ergebnisse der Reduktonbestimmung bei den durch Ascorbinsäure erhöhten Reduktonwerten zwar gegenüber den Befunden im Vorjahr zwar etwas verbessert, eine weitergehende Präzisierung und Vereinheitlichung der Methodik der Reduktonbestimmung bleibt aber erforderlich.

4.4.2 Freie Schweflige Säure

Die Bewertung aller Ergebnisse der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure erfolgte in Anbetracht der durch die Bestimmungsverfahren geprägten Unterschiede getrennt für die Laborergebnisse von Destillations- oder photometrischen Verfahren bzw. jodometrischer Bestimmungen, wobei letztere sowohl einschließlich der Reduktone als auch nach Abzug der Reduktone bewertet wurden.

Die mit **Destillations- oder photometrischen Verfahren** ermittelten Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure** sind vom Gehalt an Reduktonen unabhängig. Sie wurden auf der Basis ihres gemeinsamen Median und der daraus nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung bewertet. In der Tabelle 12 sind für alle Proben der jeweilige Median und die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_H) zusammengefasst.

Tabelle 12: Gesamtergebnis von Destillations- und photometrische Verfahren zur Bestimmung der Freien Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Anzahl Werte	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_H
FT17P01	19	56,00	1,03	0,24
FT17P02	14	8,00	2,03	0,54
FT17P03	15	23,36	1,40	0,36
FT17P04	15	27,40	1,60	0,41
FT17P05	15	17,00	1,20	0,31

Für die Prüfgüter **FT17P01**, **FT17P03** und **FT17P05** konnten für die Laborergebnisse **uneingeschränkt gültige Z-Score** ermittelt werden. Bei dem Prüfgut **FT17P02** wurden die Z-Score formal noch als gültig behandelt, weil bei Rundung auf eine Nachkommastelle der Höchstwert 2,0 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} gerade erreicht wurde. Jedoch ist **keine ausreichende Zuverlässigkeit** des Bezugswertes gegeben. Als Ursache ist sowohl der geringe wohl im Bereich der Bestimmungsgrenze liegende Gehalt von etwa 8 mg/L als auch die für einen Teil des Prüfgutes nachgewiesene Inhomogenität in Betracht zu ziehen. Auch bei dem Prüfgut **FT17P04** ist bei der vorliegenden relativ geringen Ergebnisanzahl infolge des über die Warnschranke von 1,5 erhöhten Wertes des Quotienten s_L/s_{Ziel} die **Zuverlässigkeit des Bezugswertes beeinträchtigt**.

Die Auswertung der jodometrischen Laborergebnisse erfolgte jeweils einschließlich und ausschließlich des Beitrages der Reduktone.

Tabelle 13: Gesamtergebnis der jodometrischen Bestimmungen der Freien Schwefligen Säure [mg/L]

Probe	einschließlich Reduktone			ausschließlich Reduktone		
	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	100,00	1,05	0,11	54,00	0,79	0,08
FT17P02	38,00	1,75	0,27	9,00	1,09	0,17
FT17P03	31,00	1,76	0,26	20,30	1,62	0,24
FT17P04	71,61	0,87	0,14	22,50	1,60	0,25
FT17P05	38,00	1,14	0,17	17,00	1,05	0,16

Die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel}) sind mit dem jeweiligen Median in der Tabelle 13 für alle Proben zusammengefasst. Es wurden stets aussagekräftige Z-Score erhalten, weil infolge der relativ großen Anzahl an Laborergebnissen auch im Falle der bei den Prüfgütern FT17P02 und FT17P03 bzw. FT17P03 und FT17P04 mäßig über die Warnschranke von 1,5 erhöhten Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} die Zuverlässigkeit des Bezugswertes gewährleistet ist. Letzlich **gültiger Z-Score** eines Laborergebnisses kann aus fachlicher Sicht – und damit auch im Sinne des Qualitätsmanagements – bei **jodometrischer** Bestimmung der **Freien Schweflige Säure** bei den vorliegenden Prüfgütern **nur** der Wert **nach Abzug der Reduktone** sein.

4.4.3 Gesamte Schweflige Säure

Wie im Abschnitt 2.4.3.5 ausgeführt, ergibt sich die für Laborleistung maßgebliche Bewertung der Laborergebnisse für den Parameter Gesamte Schweflige Säure stets aus dem Vergleich mit dem Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren und der Vergleichsstandardabweichung für das Referenzverfahren. Die Gesamtergebnisse sind in der Tabelle 14 zusammengefasst.

Tabelle 14: Gesamtergebnis von Destillationsverfahren zur Bestimmung der Gesamten Schweflige Säure [mg/L]

Probe	Anzahl Werte	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_H
FT17P01	48	153,00	1,48	0,21
FT17P02	31	91,50	1,89	0,34
FT17P03	36	68,37	1,44	0,24
FT17P04	29	121,00	1,38	0,26
FT17P05	31	94,00	1,07	0,19

Es ist ersichtlich, dass lediglich bei dem Prüfgut FT17P02 ein Quotient s_L/s_{Ziel} über 1,5 auftrat. Somit wurden auf dieser Bewertungsgrundlage für alle Prüfgüter **gültige Z-Score** erhalten. Allerdings sollte bei dem Prüfgut FT17P02 bei der abschließenden Bewertung der eigenen Laborergebnisse – vor allem, wenn nur das Ergebnis an diesem Prüfgut nicht befriedigt – die für dieses Prüfgut und diesen Parameter nachgewiesene Inhomogenität berücksichtigt werden.

Aus dem Vergleich mit dem Median der Destillationsergebnisse folgende Z-Score für jodometrische bestimmte und einschließlich des Beitrages der Reduktone mitgeteilte Laborergebnisse blieben in den Laborergebnismitteilungen unberücksichtigt, weil dieser Vergleich bei den Ascorbinsäure enthaltenden Prüfgütern keinesfalls sinnvoll ist und die Mitteilung dieser Werte lediglich auf die bisher erbetene Form der Ergebnismitteilung zurückzuführen sein dürfte.

Zusätzlich und vor allem als eine fachliche Orientierung, z.B. im Rahmen einer Fehlerursachensuche, wurde für die **jodometrisch bestimmten** Gehalte an Gesamter Schwefliger Säure eine Bewertung der Laborergebnisse unter Einschluss bzw. unter Ausschluss der Reduktone und Bezug auf den Median der jeweiligen Datengruppe durchgeführt und in die Laborergebnismittelung aufgenommen. Im Falle der fachlich korrekten Mitteilung dieser Werte unter Ausschluss der Reduktone führte dies dazu, dass diese Werte in den Laborergebnismitteilungen doppelt, d.h. sowohl verglichen mit dem Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren als auch mit dem Median der jodometrisch ermittelten Werte nach Abzug der Reduktone bewertet wurden. Die jeweiligen Gesamtergebnisse sind für alle Prüfgüter in der Tabelle 15 zusammengefasst.

Tabelle 15: Gesamtergebnis der jodometrischen Bestimmungen der Gesamten Schwefligen Säure [mg/L]

Probe	einschließlich Reduktone			ausschließlich Reduktone		
	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}	Median	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT17P01	197,00	2,14	0,28	155,00	2,05	0,26
FT17P02	119,60	2,60	0,52	87,00	2,21	0,45
FT17P03	80,00	1,69	0,31	68,00	1,83	0,34
FT17P04	162,00	2,14	0,49	109,00	2,76	0,60
FT17P05	112,60	2,07	0,38	94,00	2,09	0,38

Anders als für die Ergebnisse aus Destillationsverfahren wurden für die Laborergebnisse **jodometrischer** Bestimmungen der Gesamten Schwefligen Säure sowohl bei Einschluss als auch bei Ausschluss der Reduktone **stets erhöhte Werte** des Quotienten s_L/s_{Ziel} mit der Folge erhalten, dass mit Ausnahme des Prüfgutes FT17P03 auf der Grundlage der hier eingesetzten Zielstandardabweichung **keine gültigen Z-Score** erhalten werden. Dies zeigt, insbesondere im Falle der hier vorliegenden Ascorbinsäuregehalte, eine eingeschränkte Präzision der Ergebnisse der jodometrischen Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure an. Darüber hinaus besteht für die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen dieses Parameters bei dem Prüfgut FT17P01 die Besonderheit, dass der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der verwendeten Zielstandardabweichung bei Einschluss der Reduktone über dem auf eine Nachkommastelle gerundeten Höchstwert von 2,0 liegt, während er nach Abzug der Reduktone diesen Höchstwert gerade noch nicht überschreitet. Daher wurden in diesem Fall die Ergebnisse in den Laborergebnismitteilungen nicht nur in der Tabelle aufgeführt sondern auch in der Graphik dargestellt.

5 Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen

5.1 Spezielle Gegebenheiten für die FTIR-Ergebnisse einzelner Parameter

5.1.1 Codierung der Bestimmungsmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt

Neben der Ermittlung von Messwerten für die Parameter Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt mit Hilfe geeigneter Parameterkalibrierungen unmittelbar aus dem Infrarotspektrum (Weg 1) können entsprechende Werte auch aus den Ergebnissen der FTIR-Messungen für Relative Dichte, Alkohol und Vergärbare Zucker (Weg 2) oder aus einer Kombination von

herkömmlichen Messwerten, z.B. für die Relative Dichte, und mittels FTIR bestimmten Alkoholgehalt (Weg 3) berechnet werden. Von der Möglichkeit Extrakt-Parameter aus den Infrarotspektren zu ermitteln, wird nach Kenntnis des Auswerter für den Parameter Gesamtextrakt von etwa der Hälfte der teilnehmenden Laboratorien Gebrauch gemacht, während für den Parameter Zuckerfreier Extrakt nur von ein oder zwei Teilnehmern spezielle Kalibrierungen zur Ermittlung aus den Spektren eingesetzt werden. Auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' wurden im Vergleich hierzu auffällig viele Ergebnisse für beide Extrakt-Parameter mitgeteilt. Es ist daher anzunehmen, dass anders als in früheren Jahren erheblich mehr Teilnehmer aus den Ergebnissen für andere mit FTIR bestimmte Parameter Werte für Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt berechnet haben. Um die verschiedenen Wege bei der Auswertung unterscheiden zu können, war in der Auswahlliste ausdrücklich für Weg 1 der Kurzbegriff 'FTIR (gemessen)' vorgeschlagen, während für Weg 2 in Übereinstimmung mit der Beschreibung dieses Codes in der Methodenbibel der Landwirtschaftskammer der Code LwK 3.3 zu verwenden ist und im Fall von Weg 3 eine Beschreibung des eigenen Vorgehens nach Auswahl des Kurzbegriffes 'Sonstiges' aus der Vorschlagsliste erfolgen sollte. Da die aufgezeigten Möglichkeiten unzureichend genutzt wurden, ist keine Aussage möglich, ob sich bei Anwendung der verschiedenen Ermittlungswege wesentliche Unterschiede der erhaltenen Werte ergeben.

5.1.2 Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter

Die Grundregel zur Bewertung der FTIR-Laborergebnisse mit einer Zielstandardabweichung, die den Matrixeinfluss auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse berücksichtigt als Leistungskriterium (siehe Abschnitt 2.4.1) war generell bei dem Parameter **Gesamtextrakt** sowie bei den Prüfgütern **FT17P01** und **FT17P04** für die Parameter **Vergärbare Zucker** und **Fructose** nicht erfüllt. Daher erfolgten die Berechnung der Z-Score und damit die Bewertung der Laborleistung mit der im Betrag größeren Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden.

Die FTIR-Messergebnisse für die Parameter **Acetat**, **Freie** und **Gesamte Schweflige Säure** wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Laborergebnisse der herkömmlichen Bestimmungsmethoden, da keine die eventuellen Einflüsse der Matrix berücksichtigenden Zielstandardabweichungen bekannt sind. Bei der Bewertung der Z-Score für den Parameter **Gesamte Schweflige Säure** ist allerdings zu beachten, dass die eingesetzte Zielstandardabweichung bei Gehalten über etwa 100 mg/L sehr hohe Anforderungen stellt. Im methodenprüfenden Ringversuch wurde für diesen Parameter lediglich die Einhaltung der nach Horwitz zu erwartenden Vergleichsstandardabweichung nachgewiesen. Deren Betrag ist jedoch bereits bei Gehalten von 100 mg/L um etwa den Faktor 1,5 und bei Gehalten um 150 mg/L um den Faktor 2 größer als die benutzte Zielstandardabweichung.

5.1.3 Vergärbare Zucker

Als Bezugswert diente 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. Zusätzlich wird – nur in dem Gesamtbericht zu den einzelnen Prüfgütern – unter der Parameter-

bezeichnung Vergärbare Zucker (S) ein Z-Score für die vom Auswerter berechnete Summe aus den FTIR-Laborergebnissen für Glucose und Fructose ausgewiesen. Diese Vorgehensweise ist im Falle der Verwendung des FTIR-Verfahrens zur Bestimmung des Vergärbaren Zuckers für die amtliche Qualitätsweinanalyse durch die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz vorgeschrieben. Aus den Ergebnismitteilungen der Teilnehmer ist teilweise ersichtlich, dass der zum Parameter Vergärbare Zucker mitgeteilte Wert auf diese Weise 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)", abgekürzt "Verg. Zucker(r)", zu bezeichnen sind. Unter primär analytischen Gesichtspunkten kann, insbesondere bei Rotwein, ein Vergleich mit dem Median der Ergebnisse reduktometrischer Bestimmungen sachgerechter sein. 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. Die diesbezügliche Abfrage in der Ergebnismitteilung wurde wiederum nur unvollständig beantwortet. Dennoch ist erkennbar, dass alle denkbaren Varianten von einer der Basiskalibrierung entsprechenden Verwendung reduktometrisch ermittelter Zuckergehalte über die Verwendung der Ergebnisse spezifischer Zuckerbestimmungen bis zu Mischungen von Ergebnissen reduktometrischer und spezifischer Zuckerbestimmungen zur Slope-Interzept-Korrektur angewendet wurden. Diese unterschiedliche Verfahrensweise ist sicher ebenso wie die Verwendung unterschiedlicher Basiskalibrierungen nicht geeignet zwischen den Laboratorien die bestmögliche Übereinstimmung der FTIR-Bestimmungsergebnisse für den Parameter Vergärbare Zucker zu erreichen.

5.2 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 ($s_{\bar{u}}$) verwendet, die Matrixeffekte statistisch, d.h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Liegt kein ausgeprägter Matrixeffekt vor, charakterisieren die erhaltenen Z-Score unmittelbar die Leistungsfähigkeit der eigenen Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Bei ausgeprägten Matrixeffekten wird diese Aussage, gegebenenfalls nur für einzelne Parameter, beeinträchtigt.

Diese Prüfung kann grundsätzlich verbessert werden, wenn die mit dieser Methode erhaltenen Ergebnisse untereinander verglichen werden und eine einheitliche Kalibrierung verwendet wird, weil dann die Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens (s_{FTIR}) als Leistungskriterium

herangezogen werden kann. Ihr Betrag ist für die Mehrzahl der Parameter deutlich kleiner als die zusätzliche Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung $s_{\bar{y}}$. Wird keine einheitliche Kalibrierung vorausgesetzt, so zeigt sich das Maß der Ausschöpfung der erreichbaren Vergleichbarkeit von FTIR-Ergebnissen untereinander.

Für jedes Prüfgut werden daher in einer eigenen Tabelle, z.B. für das Prüfgut FT17P01 in der nachfolgenden Tabelle 16, die wesentlichen beschreibenden Daten einer ausschließlich die FTIR-Ergebnisse berücksichtigenden Auswertung zusammengefasst. Diese wurden nicht unter Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse, wie bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren, sondern vereinfacht durch ein robustes Verfahren zur Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung erhalten. Hierbei werden Ausreißer nicht ausgeschlossen. Der Median aller Messergebnisse einschließlich der Ausreißer bleibt erhalten aber der Einfluss von Ausreißern auf Mittelwert und Standardabweichung wird vermindert.

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-Score für einzelne Laborergebnisse zu beeinträchtigen. Bei dieser Auswertung wird der Parameter Essigsäure nicht berücksichtigt, weil die Anzahl der Laborergebnisse zu diesem Parameter für eine aussagekräftige Bewertung zu gering ist.

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-Score für den Vergleich der FTIR-Ergebnisse untereinander nach der Formel „Z-Score = (Messwert – Medianwert)/ s_{FTIR} “ berechnen. Diese werden daher im Abschnitt 6 dieses Berichtes nicht wiedergeben und sind in den Ergebnismitteilungen für die einzelnen Laboratorien ebenfalls nicht enthalten.

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.

Tabelle 16: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Perlweinprüfgut (FT17P01)

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw	Zielstdabw	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
					n. Horwitz s_H	exp. FTIR s_{FTIR}			
Relative Dichte 20 °C/20 °C	84	1,00236	1,002355	0,000257		0,000146		1,76	0,19
Vorhandener Alkohol (g/L)	88	78,816	78,900	0,893	2,313	0,739	0,39	1,21	0,13
Gesamtextrakt (g/L)	55	40,886	40,900	0,669	1,323	0,415	0,51	1,61	0,22
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	81	20,904	21,000	0,882	0,751	0,354	1,17	2,49	0,28
Vergärbare Zucker(S) (g/L)	83	20,730	20,770	0,745	0,744	0,354	1,00	2,10	0,23
Glucose (g/L)	82	6,042	5,959	0,523	0,258	0,288	2,03	1,81	0,20
Fructose (g/L)	82	14,649	14,750	0,569	0,556	0,222	1,02	2,56	0,28
Glycerin (g/L)	70	4,902	4,870	0,482	0,217	0,265	2,22	1,82	0,22
pH-Wert	81	3,224	3,230	0,063		0,0188		3,35	0,37
Gesamtsäure (g/L)	88	6,672	6,700	0,150	0,285	0,0816	0,53	1,83	0,20
Weinsäure (g/L)	75	2,700	2,740	0,243	0,133	0,132	1,83	1,84	0,21
Flüchtige Säure (g/L)	78	0,400	0,410	0,079	0,0265	0,0427	2,99	1,86	0,21
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	75	2,863	2,890	0,306	0,1393	0,0975	2,19	3,14	0,36
Gesamte Milchsäure (g/L)	54	0,178	0,170	0,198	0,0126	0,0805	15,74	2,46	0,33
Freie Schweflige Säure (mg/L)	18	50,23	50,25	4,97	4,46	4,46	1,12	1,12	0,26
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	18	161,44	164,25	13,92	12,19	5,36	1,14	2,60	0,61

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

Erläuterungen zur Tabelle 16:

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

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

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

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

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

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

5.3 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT17P01

Für das Prüfgut FT17P01 zeigt der in Tabelle 16 durchgeführte Vergleich der in dieser Laborvergleichsuntersuchung gefundenen 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 für etwa die Hälfte der Parameter ein vergleichbarer Wert, d.h. $s_L/s_H < 1,5$, erreicht wurde. Dabei zeigt ein Vergleich der Standardabweichungen nach Horwitz mit den experimentell erhaltenen Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw exp. FTIR, s_{FTIR} "), dass für die Mehrzahl der Parameter Quotienten unter 1,5 erreichbar sind. Das Ergebnis ist noch ungünstiger bei einem Vergleich der Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit den Vergleichsstandardabweichungen (s_{FTIR}). Wie die Daten in Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR} " zeigen, wurde nur bei den Parametern Relative Dichte, Vorhandener Alkohol und Freie Schweflige Säure der Wert 1,5 eingehalten sowie bei dem Parameter Gesamtextrakt nur geringfügig überschritten, während bei den übrigen Parametern der Höchstwert von 2,0 fast erreicht bzw. überschritten wurde. Daraus folgt, dass bei den FTIR-Untersuchungen die Leistungsfähigkeit des Verfahrens bei weitem nicht erreicht wurde. Da nach den Erfahrungen bei Nachberechnungen aus den Laborrohdaten mit einer einheitlichen Kalibrierung die Quotienten in der Regel niedriger ausfallen, kommen als Ursache der größeren Streuung unzureichende Slope-Interzept-Korrekturen und vor allem weniger geeignete Parameterkalibrierungen in Betracht. Es kann sich allerdings auch ein schlechterer Pflegezustand des Gerätes auswirken.

Zu mehreren Parametern werden nachstehend ausführlichere Anmerkungen gemacht, die sich in der Regel nicht nur auf das Prüfgut FT17P01 beziehen, sondern auch auf die Ergebnisse bei den weiteren Prüfgütern übertragbar sind.

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

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

Die erhöhten Werte des Quotienten s_L/s_{FTIR} für die Parameter **Gesamtsäure**, **Weinsäure** und **Flüchtige Säure**, und der sehr hohe Wert für den Parameter **Äpfelsäure** spiegeln die kumulierten Einflüsse qualitätsmindernder Einflüsse wieder. Insbesondere dürfte sich auswirken, dass die FTIR-Messergebnisse für die Mehrzahl der genannten Parameter häufig nur als orientierende Größe betrachtet werden, für die eine sorgfältige Auswahl der Basiskalibrierung und der Aufwand einer Slope-Interzept-Korrektur nicht erforderlich erscheint. Dabei wird übersehen, dass FTIR-Messungen und ihre Auswertung im Konzentrationsbereich unter 5 g/L grundsätzlich schwieriger sind als bei den in hohen Konzentrationen vorliegenden Weinbestandteilen.

Dahingegen ist das unbefriedigende Gesamtergebnis für den Parameter **Milchsäure** nicht beachtlich, weil der vorliegende Gehalt unter der Bestimmungsgrenze liegt und daher keine zuverlässige Bestimmung möglich ist. Schließlich ist für eine sachgerechte Bewertung des Quotienten s_L/s_{FTIR} für **Gesamte Schweflige Säure** der Hinweis im Abschnitt 5.1.2 zu beachten, dass im methodenprüfenden Ringversuch für diesen Parameter nur die Einhaltung der nach Horwitz berechneten Vergleichsstandardabweichung bestätigt wurde. Damit ist der hier für das Prüfgut FT17P01 erhaltene Wert des Quotienten s_L/s_H gut vereinbar. In der Konsequenz bedeutet dies, dass die Laborergebnisse für **Gesamte Schweflige Säure** sehr streng beurteilt werden. **Mäßig erhöhte Z-Score** sollten daher **nicht zu Lasten** des Labors gewertet, sondern unter Verwendung der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung nachberechnet bzw. der Datentabelle im Abschnitt 6.21.1 entnommen werden.

Durch die Verwendung der Zielstandardabweichung $s_{\bar{u}}$ zur Bewertung der Laborergebnisse werden Effekte der Matrix der Proben nur "statistisch", d.h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Bei jeder Probe liegt aber ein konkreter Matrixeffekt vor, der – auch abhängig von der im einzelnen Labor verwendeten Kalibrierung – im Einzelfall zu einem erheblichen systematischen Unterschied der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Ergebnissen der herkömmlichen Analytik führen kann. Für die Gesamtheit bzw. den "Durchschnitt" und geprägt von der jeweils am häufigsten eingesetzten Parameterkalibrierung gibt ein Vergleich der Mediane der FTIR-Ergebnisse und der herkömmlichen Ergebnisse einen Hinweis auf einen möglichen besonderen Matrixeffekt bei dem jeweils betrachteten Prüfgut, hier FT17P01.

Tabelle 17: Vergleich herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT17P01

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $s_{\bar{u}}$	$Z_{\bar{u}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,002355	1,00240	-0,000045	0,000190	-0,24
Vorhandener Alkohol [g/L]	78,900	78,200	0,700	0,886	0,79
Gesamtextrakt [g/L]	40,900	40,900	0,000	0,594	0,00
Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') [g/L]	21,000	20,525	0,475	0,597	0,80
Vergärbare Zucker (Summe) [g/L]	20,770	21,190	-0,420	0,615	-0,68
Glucose [g/L]	6,700	6,800	-0,100	0,145	-0,69
Fructose [g/L]	5,959	6,265	-0,306	0,408	-0,75
Glycerin [g/L]	14,750	14,922	-0,172	0,446	-0,39
pH-Wert	4,870	5,015	-0,145	0,348	-0,42
Gesamtsäure [g/L]	3,230	3,160	0,070	0,049	1,42
Weinsäure [g/L]	2,740	2,700	0,040	0,227	0,18
Flüchtige Säure [g/L]	0,410	0,429	-0,019	0,089	-0,21
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	2,890	2,850	0,040	0,218	0,18
Gesamte Milchsäure [g/L]	0,170	0,144	0,026	0,209	0,12
Freie Schweflige Säure [mg/L]	50,250	56,000	-5,75	4,889	-1,18
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	164,250	153,000	11,25	5,357	2,10

Hierzu sind in Tabelle 17 die Abweichung des Median der FTIR-Ergebnisse vom Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden sowie die Z-Score zusammengestellt, die nach Division der Differenz durch die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung ($s_{\bar{u}}$) 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.

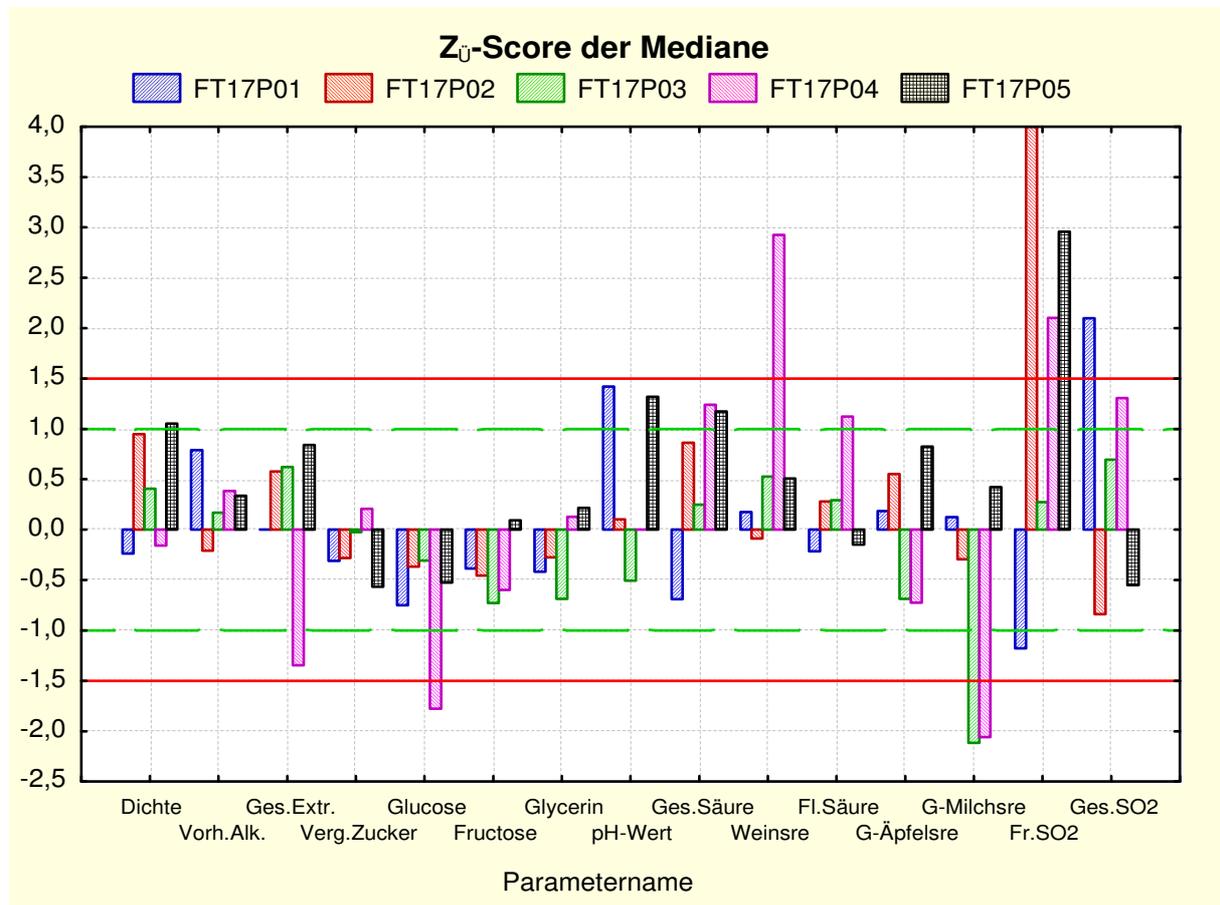
Bei dem vorliegenden Prüfgut FT17P01 stimmen die Mediane der FTIR-Ergebnisse mit denen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren gut überein, d.h. der absolute Betrag des Z-Score der Differenz der Mediane liegt deutlich unter eins. Derartige Differenzen werden auch zwischen den Ergebnissen verschiedener herkömmlicher Verfahren beobachtet. Sie sind nicht signifikant bzw. für die praktische Nutzung der Untersuchungsergebnisse nicht relevant. Die **Z_ü-Score** der FTIR-Laborergebnisse sind daher **gültig** und sehr gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen geeignet, zumal die Unsicherheit der Bezugswerte in Relation zur Zielstandardabweichung $s_{\bar{u}}$ stets eine ausreichende Zuverlässigkeit ergibt. Nur für den Parameter **Gesamte Schweflige Säure** ergibt sich ein Z_ü-Score, der erheblich über 1,5 liegt. Bei diesem Parameter ist zu berücksichtigen, dass bei einer Wertung der Differenz auf der Basis der bei der Methodenprüfung belegten Einhaltung einer Zielstandardabweichung nach Horwitz von hier $\pm 11,48$ mg/L der Z-Score ebenfalls (knapp) unter 1 liegt.

5.4 Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter

Einen – an dieser Stelle vorausschauenden – und zugleich zusammenfassenden Überblick über die Eignung der FTIR-Untersuchungsergebnisse zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen gibt auf der Grundlage von Gegenüberstellungen aller herkömmlichen und FTIR-Untersuchungsergebnisse analog zur Tabelle 17 für alle Prüfgüter die nachstehende Abbildung. Sie zeigt für die Gesamtheit der eingesetzten Kalibrierungen die Z_ü-Score der Mediane der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Medianen der herkömmlichen Ergebnisse und gibt eine Orientierung über das Ausmaß der (mittleren) Matrixeffekte für jeden Parameter bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfmaterialien. Die kritischen Grenzen für die Z_ü-Score sind in der Graphik durch grüne bzw. rote Linien markiert. Liegt der absolute Betrag der dargestellten Z_ü-Score über 1, ist ein erhöhter Anteil von FTIR-Untersuchungsergebnissen mit unbefriedigendem, d.h. über dem Absolutbetrag von 2 (d.h. mit über + 2 bzw. unter -2) liegenden Z-Score zu erwarten. Wenn der Z_ü-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 für die Mehrzahl der Parameter/Prüfgut-Kombinationen vernachlässigbare Matrixeffekte vorliegen. Bei zusammenfassender Betrachtung der Ergebnisse aller fünf Prüfgüter zeigen sich für die Parameter Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Vergärbare Zucker, Fructose, Glycerin und Gesamte Äpfelsäure keine Hinweise auf wesentliche systematische Unterschiede zwischen den mit herkömmlichen Methoden und den mit der Fourier-Transform-Spektroskopie erhaltenen Ergebnissen. Damit charakterisieren die bei diesen Proben und Parametern erhaltenen Z-Score unmittelbar und aussa-

gekräftigt die Leistungsfähigkeit der eigenen FTIR-Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Bei diesen Kombinationen weisen erhöhte Z-Scorebeträge der eigenen Ergebnisse eindeutig auf Schwächen der eigenen Parameterkalibrierung oder des Gerätezustandes hin.



Dahingegen zeigen, wie bei der vorjährigen Laborvergleichsuntersuchung, beide Prüfgüter, die eine malo-laktische Vergärung erfahren und herkömmlich zuverlässig bestimmbare Gehalte an **Gesamter Milchsäure** aufweisen, im Betrag unter minus Eins liegende Z₀-Score der Mediane. Daraus ist zu schließen, dass die das Gesamtergebnis prägenden Parameterkalibrierungen gegenüber den Ergebnissen herkömmlicher Analytik zu niedrige Werte liefern. Deutlich negative Z-Score bei diesem Parameter zeigen also nicht sicher Mängel des Gerätes oder der Arbeitsweise, wohl aber der Parameterkalibrierung an.

Eine auffällige Häufung im absoluten Betrag über Eins liegender Z₀-Score zeigt sich bei dem Parameter **Freie Schweflige Säure**. Dies überrascht, weil bei den bisherigen Auswertungen für diesen Parameter in den Laborvergleichsuntersuchungen seit 2014 nur in einzelnen Fällen ein erhöhter Z₀-Score und in der Regel eine gute Übereinstimmung mit dem Median der Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren beobachtet wurde. Allerdings sollte berücksichtigt werden, dass es bei dem Prüfgut **FT17P01** durch die notwendige sorgfältige Entfernung der Kohlensäure zu Verlusten an Freier Schweflicher Säure gekommen sein kann, während bei dem Prüfgut FT17P02 mit etwa 8 mg/L ein sehr geringer, wohl im Bereich der Bestimmungsgrenze liegender Gehalt vorlag.

Dahingegen ist bei den erhöhten $Z_{\bar{0}}$ -Score der Prüfgüter **FT17P01** und **FT17P04** für den Parameter **Gesamte Schweflige Säure** (Median 153,0 mg/L bzw. 121,0 mg/L), wie bereits oben erwähnt, zu berücksichtigen, dass die verwendete Zielstandardabweichung sehr hohe Anforderungen stellt, die beobachteten $Z_{\bar{0}}$ -Score den festgestellten Gehalten proportional erscheinen und bei Anwendung einer nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung unter Eins liegen.

Schließlich fällt auf, dass sich bei dem Prüfgut **FT17P04**, einem aus kurzzeiterhitzten Most fructosesüß vergorenen Samtrot eine Häufung erhöhter Beträge der $z_{\bar{0}}$ -Score ergibt. Es liegt nahe anzunehmen, dass hierfür Unterschiede in der Matrix ursächlich sind, die in der Technik der Weinbereitung begründet sind. War derartiges Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen nicht ausreichend vertreten, so werden sie durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen. Unbefriedigende Z-Score der FTIR-Laborergebnisse sind bei diesem Prüfgut unter Berücksichtigung dieser Möglichkeit zu bewerten.

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

6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern

6.1 Berechnete Parameter

Bei dem Prüfgut Perlwein (FT17P01) wurden von allen Laboratorien die Angaben zu den berechneten Parametern gefordert. Diese Angaben erfolgten vollständig. Die mitgeteilten Daten wurden bei von der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien rechnerisch nachgeprüft. Abweichungen, die über eine Rundungstoleranz hinausgehen, wurden in keinem Fall festgestellt. Damit zeigen die berechneten Daten der Erfahrung entsprechend insgesamt eine gute Qualität. Grundsätzlich erscheint eine eigene Bewertung der berechneten Parameter mittels Z-Score nicht erforderlich, da dieser erfahrungsgemäß durch systematische Abweichungen bei den Ausgangsgrößen geprägt wird. Aus den bereits im Abschnitt 2.4.3.2 näher dargelegten Gründen wurde für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt bei dem Prüfgut FT17P01 dennoch eine solche Bewertung durchgeführt.

6.2 Darstellung der analytischen Ergebnisse

Die analytischen Ergebnisse werden je Prüfgut und Parameter in der Regel in vier Tabellen und drei Graphiken dargestellt. Die erste und die zweite Tabelle 'Laborergebnisse' enthalten anonymisiert und getrennt für die Ergebnisse der Untersuchung mit herkömmlichen Methoden sowie für die FTIR-Ergebnisse alle Angaben, die einzelne Laboratorien betreffen. Es werden nur Zeilen aufgenommen, für die Ergebnisse vorliegen. In der Tabelle 'Angaben zu den Analyseverfahren' werden die Kodierungen der Analyseverfahren durch eine Kurzbeschreibung erläutert, die Häufigkeit ihrer Verwendung sowie der robuste Mittelwert und die robuste Standardabwei-

chung der Laborergebnisse zusammengefasst. Schließlich werden in der Tabelle 'Deskriptive Ergebnisse' die beschreibenden statistischen Werte angegeben, die aus allen einbezogenen, mit herkömmlichen Methoden erhaltenen Laborwerten (Spalte: alle Daten) bzw. den nach Ausschluss stark abweichender Ergebnisse verbleibenden Daten (Spalte: ber. Daten) berechnet wurden. Sie beschreiben die Grundlage der Bewertung der Laborleistungen.

6.2.1 Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse

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

6.2.2 Aufbau der Tabelle der 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 Vergleichsstandardabweichung ($s_{exp\ herk.}$)		
Zeile 10:	Zielstandardabweichung: Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)		
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 ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 10		
Zeile 14:	Quotient (u_M/s_H): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 8		
Zeile 15:	Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 9		
Zeile 16:	Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 10		

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

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 Kauf genommen, dass bei erheblichen Abweichungen einzelner Laboratorien geringe Abweichungen vom Median nicht bestmöglich dargestellt werden. Wie in den Ergebnistabellen werden nur Auswertenummern berücksichtigt, zu denen Ergebnisse vorliegen.

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

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

6.3 Relative Dichte 20 °C/20 °C

6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 8.1	1,00247	0,000070	0,53	
04	LwK 8.4	1,00251	0,000110	0,83	
05	LwK 8.4	1,00234	-0,000060	-0,45	
06	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
07	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
09	LwK 8.1	1,00240	0,000000	0,00	
10	LwK 8.4	1,00237	-0,000030	-0,23	
11	LwK 8.4	1,00256	0,000160	1,21	
12	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
13	LwK 8.4	1,00241	0,000010	0,08	
14	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
15	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
17	LwK 8.4	1,00232	-0,000080	-0,61	
18	LwK 8.4	1,00235	-0,000050	-0,38	
19	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
20	LwK 8.4	1,00245	0,000050	0,38	
21	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
22	LwK 8.4	1,00263	0,000230	1,74	
23	LwK 8.4	1,00227	-0,000130	-0,98	
24	LwK 8.4	1,00215	-0,000250	-1,89	
25	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
26	LwK 8.4	1,00210	-0,000300	-2,27	
27	LwK 8.4	1,00238	-0,000020	-0,15	
28	LwK 8.1	1,00270	0,000300	2,27	
29	LwK 8.4	1,00241	0,000010	0,08	
30	LwK 8.4	1,00232	-0,000080	-0,61	
31	LwK 8.4	1,00238	-0,000020	-0,15	
32	LwK 8.1	1,00220	-0,000200	-1,52	
33	LwK 8.4	1,00251	0,000110	0,83	
34	LwK 8.4	1,00255	0,000150	1,14	
36	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
37	LwK 8.3	1,00277	0,000370	2,80	
38	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	1,00246	0,000060	0,45	
40	LwK 8.4	1,00237	-0,000030	-0,23	
41	LwK 8.4	1,00245	0,000050	0,38	
42	LwK 8.4	1,00248	0,000080	0,61	
43	LwK 8.4	1,00220	-0,000200	-1,52	
44	LwK 8.1	1,00234	-0,000060	-0,45	
45	LwK 8.4	1,00254	0,000140	1,06	
46	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
47	LwK 8.4	1,00264	0,000240	1,82	
48	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
49	LwK 8.4	1,00245	0,000050	0,38	
50	LwK 8.4	1,00257	0,000170	1,29	
51	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
52	LwK 8.4	1,00243	0,000031	0,23	
53	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
54	LwK 8.4	1,00220	-0,000200	-1,52	
55	LwK 8.4	1,00251	0,000110	0,83	
56	LwK 8.4	1,00232	-0,000080	-0,61	
57	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
58	LwK 8.4	1,00238	-0,000020	-0,15	
59	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
60	LwK 8.4	1,00210	-0,000300	-2,27	
61	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
62	LwK 8.3	1,00270	0,000300	2,27	
63	LwK 8.4	1,00270	0,000300	2,27	
64	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
65	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
69	LwK 8.4	0,98669	-0,015710	-119,02	(**)
81	LwK 8.1	1,00224	-0,000160	-1,21	
101	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
102	LwK 8.4	1,00262	0,000220	1,67	
110	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
111	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
112	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
113	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
114	LwK 8.4	1,00245	0,000050	0,38	
115	LwK 8.4	1,00248	0,000080	0,61	
116	LwK 8.1	1,00260	0,000200	1,52	
117	LwK 8.4	1,00235	-0,000050	-0,38	
118	LwK 8.4	1,00224	-0,000160	-1,21	
119	LwK 8.4	1,00244	0,000040	0,30	
120	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
121	LwK 8.4	1,00247	0,000066	0,50	
122	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
123	LwK 8.1	1,00240	0,000000	0,00	
124	LwK 8.1	1,00240	0,000000	0,00	
125	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
126	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
127	LwK 8.4	1,00254	0,000140	1,06	
128	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
129	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
130	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
131	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
132	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
133	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
134	LwK 8.4	1,00254	0,000140	1,06	
135	LwK 8.4	1,00260	0,000200	1,52	
136	LwK 8.4	1,00248	0,000080	0,61	
137	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
138	LwK 8.1	1,00218	-0,000222	-1,68	
139	LwK 8.1	1,00200	-0,000400	-3,03	
140	LwK 8.4	1,00230	-0,000100	-0,76	
141	LwK 8.4	1,00250	0,000100	0,76	
142	LwK 8.1	1,00270	0,000300	2,27	
143	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
144	LwK 8.4	1,00241	0,000010	0,08	
145	LwK 8.4	1,00220	-0,000200	-1,52	
146	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	
147	LwK 8.2	1,00260	0,000200	1,52	
148	LwK 8.4	1,00249	0,000090	0,68	
149	LwK 8.1	1,00250	0,000100	0,76	
150	LwK 8.4	1,00240	0,000000	0,00	

6.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
202	FTIR	1,00245	0,000050	0,26	
203	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
204	FTIR	1,00237	-0,000030	-0,16	
205	FTIR	1,00200	-0,000400	-2,11	
206	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
207	FTIR	1,00228	-0,000120	-0,63	
208	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
209	FTIR	1,00254	0,000140	0,74	
210	FTIR	1,00221	-0,000190	-1,00	
211	FTIR	1,00269	0,000290	1,53	
212	FTIR	1,00210	-0,000300	-1,58	
214	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
215	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
216	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
217	FTIR	1,00210	-0,000300	-1,58	
218	FTIR	1,00203	-0,000370	-1,95	
219	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

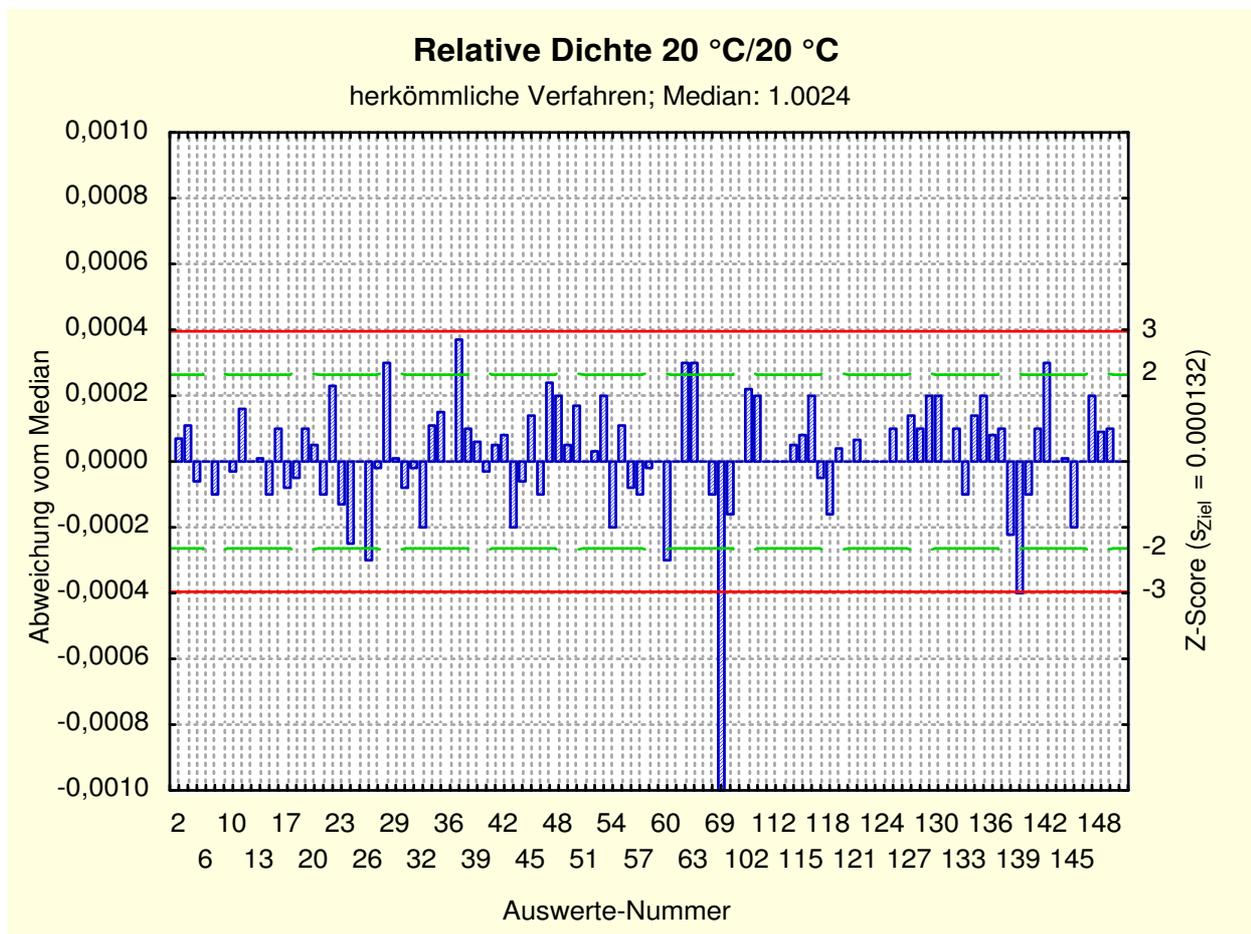
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	1,00210	-0,000300	-1,58	
221	FTIR	1,00232	-0,000080	-0,42	
222	FTIR	1,00257	0,000170	0,89	
223	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
224	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
225	FTIR	1,00226	-0,000140	-0,74	
226	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
227	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
228	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
229	FTIR	1,00201	-0,000390	-2,05	
231	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
232	FTIR	1,00280	0,000400	2,11	
234	FTIR	1,00224	-0,000160	-0,84	
235	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
236	FTIR	1,00234	-0,000060	-0,32	
237	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
240	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
241	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
242	FTIR	1,00241	0,000010	0,05	
243	FTIR	1,00280	0,000400	2,11	
244	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
245	FTIR	1,00270	0,000300	1,58	
246	FTIR	1,00210	-0,000300	-1,58	
247	FTIR	1,00270	0,000300	1,58	
248	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
249	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
250	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
251	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
252	FTIR	1,00244	0,000040	0,21	
254	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
255	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
256	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
257	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
258	FTIR	1,00300	0,000600	3,16	
259	FTIR	1,00205	-0,000350	-1,84	
260	FTIR	1,00220	-0,000200	-1,05	
261	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
262	FTIR	1,00290	0,000500	2,63	
263	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
264	FTIR	1,00190	-0,000500	-2,63	
265	FTIR	1,00210	-0,000300	-1,58	
266	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
267	FTIR	1,00262	0,000220	1,16	
268	FTIR	1,00215	-0,000250	-1,32	
269	FTIR	1,00262	0,000220	1,16	
270	FTIR	1,00180	-0,000600	-3,16	
271	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
272	FTIR	1,00230	-0,000100	-0,53	
273	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
274	FTIR	1,00278	0,000383	2,02	
275	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
276	FTIR	1,00180	-0,000600	-3,16	
277	FTIR	1,00200	-0,000400	-2,11	
278	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
279	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
280	FTIR	1,00190	-0,000500	-2,63	
281	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
282	FTIR	1,00240	0,000000	0,00	
283	FTIR	1,00310	0,000700	3,68	
319	FTIR	1,00260	0,000200	1,05	
320	FTIR	1,00200	-0,000400	-2,11	
336	FTIR	1,00234	-0,000060	-0,32	
337	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
349	FTIR	1,00250	0,000100	0,53	
364	FTIR	1,00200	-0,000400	-2,11	
368	FTIR	1,00200	-0,000400	-2,11	

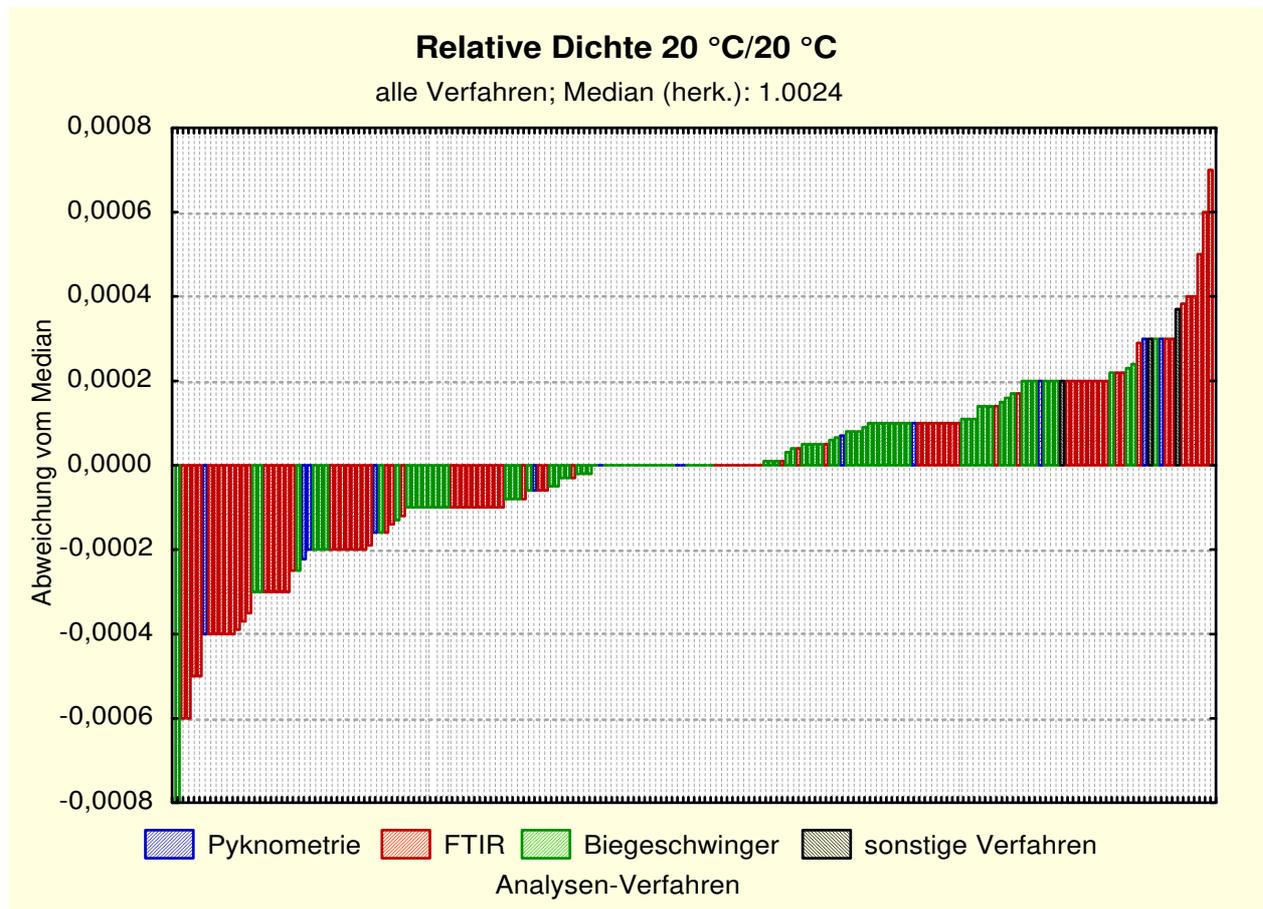
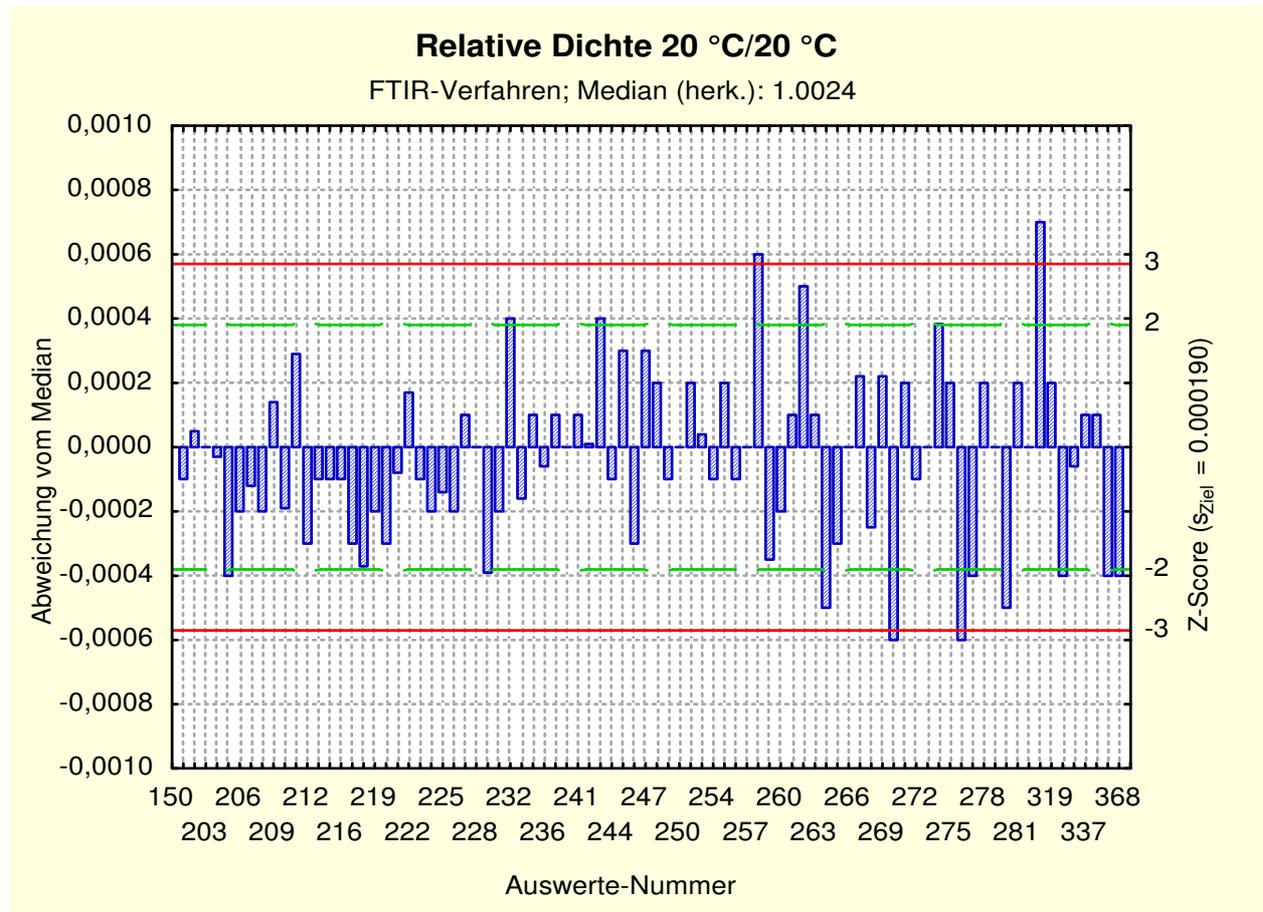
6.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	105	104
Minimalwert	0,98669	1,00200
Mittelwert	1,002276	1,002426
Median	1,002400	1,002400
Maximalwert	1,00277	1,00277
Standardabweichung (s_L)	0,001542	0,000140
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000150	0,000014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horvat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	11,68	1,06
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	8,12	0,74
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	1,14	0,10
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,79	0,07

6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	13	1,00240	0,000224
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00260	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	2	1,00273	0,000056
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	89	1,00242	0,000119
	herkömmliche Verfahren	105	1,00243	0,000135
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	1,00236	0,000257





6.4 Gesamtalkohol [g/L]

6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	Spezialberechnung	88,94	0,640	0,25	0,60	
04	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,19	0,891	0,35	0,84	
06	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,52	0,220	0,09	0,21	
07	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,30	-1,000	-0,39	-0,94	
09	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,42	-0,880	-0,35	-0,83	
10	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	86,83	-1,466	-0,58	-1,38	
11	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
12	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,50	0,200	0,08	0,19	
13	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,80	-0,500	-0,20	-0,47	
14	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,90	0,600	0,24	0,56	
15	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,30	0,000	0,00	0,00	
17	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,20	0,900	0,35	0,85	
18	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,29	-0,010	-0,00	-0,01	
19	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,30	-1,000	-0,39	-0,94	
20	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,80	0,500	0,20	0,47	
21	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,42	0,120	0,05	0,11	
22	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,70	0,400	0,16	0,38	
23	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,80	0,500	0,20	0,47	
24	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,40	0,100	0,04	0,09	
25	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,30	0,000	0,00	0,00	
26	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,70	0,400	0,16	0,38	
27	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
28	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,40	-0,900	-0,35	-0,85	
30	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,23	0,930	0,37	0,87	
31	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,60	0,300	0,12	0,28	
32	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,36	0,060	0,02	0,06	
33	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	86,50	-1,800	-0,71	-1,69	
34	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,70	-0,600	-0,24	-0,56	
37	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,60	0,300	0,12	0,28	
38	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,10	0,800	0,31	0,75	
39	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,50	-0,800	-0,31	-0,75	
40	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,40	0,100	0,04	0,09	
41	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,98	-0,320	-0,13	-0,30	
42	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,60	-0,700	-0,28	-0,66	
43	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,10	-0,200	-0,08	-0,19	
44	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,10	-0,200	-0,08	-0,19	
45	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
46	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,90	0,600	0,24	0,56	
47	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,20	0,900	0,35	0,85	
48	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,50	0,200	0,08	0,19	
49	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,00	-1,300	-0,51	-1,22	
50	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,08	0,780	0,31	0,73	
51	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,30	-1,000	-0,39	-0,94	
52	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,35	0,050	0,02	0,05	
53	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,30	0,000	0,00	0,00	
56	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,03	0,730	0,29	0,69	
57	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,60	-0,700	-0,28	-0,66	
58	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,48	0,180	0,07	0,17	
59	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,10	-0,200	-0,08	-0,19	
60	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	89,93	1,629	0,64	1,53	
61	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,50	1,200	0,47	1,13	
62	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	86,50	-1,800	-0,71	-1,69	
63	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,50	-0,800	-0,31	-0,75	
77	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	86,10	-2,195	-0,86	-2,07	
81	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,96	0,660	0,26	0,62	
110	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,90	0,600	0,24	0,56	
111	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,00	0,700	0,28	0,66	
112	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,70	0,400	0,16	0,38	
113	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,50	0,200	0,08	0,19	
114	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,60	-0,700	-0,28	-0,66	
115	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,68	0,380	0,15	0,36	
116	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	89,20	0,900	0,35	0,85	
117	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,93	-0,370	-0,15	-0,35	
118	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,27	-0,030	-0,01	-0,03	

Rote Methodenangabe: als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollten keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden.

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
119	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,50	0,200	0,08	0,19	
120	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,20	-0,100	-0,04	-0,09	
121	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,40	-0,900	-0,35	-0,85	
122	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,50	0,200	0,08	0,19	
123	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,30	0,000	0,00	0,00	
124	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
125	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,30	0,000	0,00	0,00	
126	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,10	-1,200	-0,47	-1,13	
127	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	86,92	-1,380	-0,54	-1,30	
128	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
129	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,00	-1,300	-0,51	-1,22	
130	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,90	0,600	0,24	0,56	
131	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,50	-0,800	-0,31	-0,75	
132	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,40	0,100	0,04	0,09	
133	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,40	0,100	0,04	0,09	
134	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,20	-0,100	-0,04	-0,09	
135	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,80	-0,500	-0,20	-0,47	
136	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,30	0,000	0,00	0,00	
137	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,00	-1,300	-0,51	-1,22	
138	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	89,05	0,750	0,29	0,71	
139	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,81	-0,490	-0,19	-0,46	
140	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,40	0,100	0,04	0,09	
141	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	89,30	1,000	0,39	0,94	
142	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	90,20	1,900	0,75	1,79	
143	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,90	-0,400	-0,16	-0,38	
144	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,20	-0,100	-0,04	-0,09	
145	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,40	0,100	0,04	0,09	
146	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	87,40	-0,900	-0,35	-0,85	
147	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,80	0,500	0,20	0,47	
148	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	88,70	0,400	0,16	0,38	
149	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	88,10	-0,200	-0,08	-0,19	
150	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	87,30	-1,000	-0,39	-0,94	

6.4.2 FTIR-Laborergebnisse

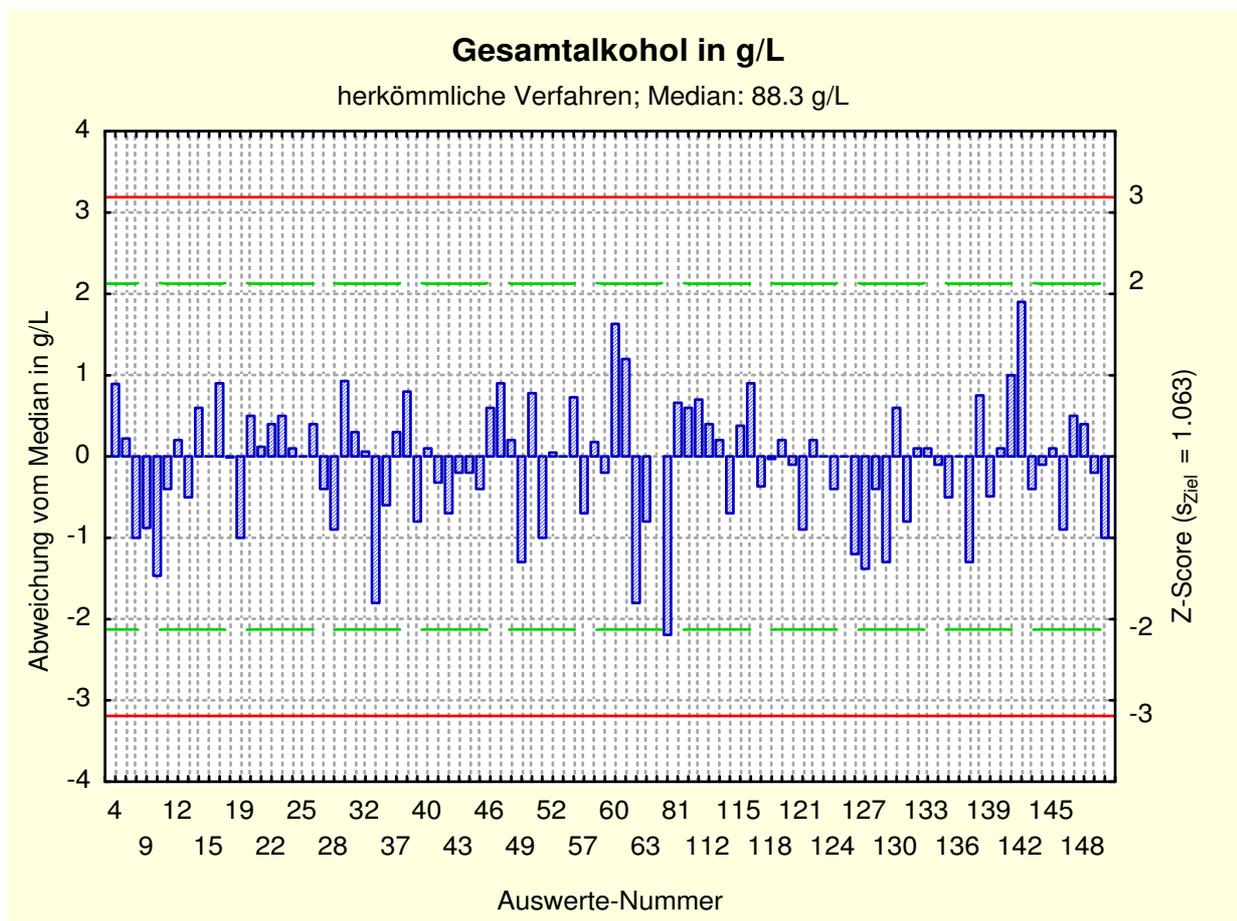
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,73	0,430	0,17	0,40	
204	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,13	0,830	0,33	0,78	
206	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,89	0,590	0,23	0,56	
209	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,84	0,540	0,21	0,51	
211	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,62	1,320	0,52	1,24	
215	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,10	-0,200	-0,08	-0,19	
216	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,47	0,170	0,07	0,16	
218	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,30	1,000	0,39	0,94	
222	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,34	0,040	0,02	0,04	
223	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,40	0,100	0,04	0,09	
226	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,92	0,617	0,24	0,58	
228	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,55	0,250	0,10	0,24	
232	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,47	-0,830	-0,33	-0,78	
236	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,61	0,310	0,12	0,29	
246	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,24	-0,060	-0,02	-0,06	
254	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	90,38	2,080	0,82	1,96	
256	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	90,11	1,810	0,71	1,70	
259	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	91,40	3,100	1,22	2,92	
260	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,18	-0,124	-0,05	-0,12	
262	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,70	-0,600	-0,24	-0,56	
263	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,38	-0,920	-0,36	-0,87	
267	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,63	0,330	0,13	0,31	
268	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,34	1,044	0,41	0,98	
270	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	86,70	-1,600	-0,63	-1,51	
278	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,05	-1,253	-0,49	-1,18	
279	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,54	0,243	0,10	0,23	
280	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	89,40	1,100	0,43	1,03	
281	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	87,21	-1,090	-0,43	-1,03	
282	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	88,30	0,000	0,00	0,00	

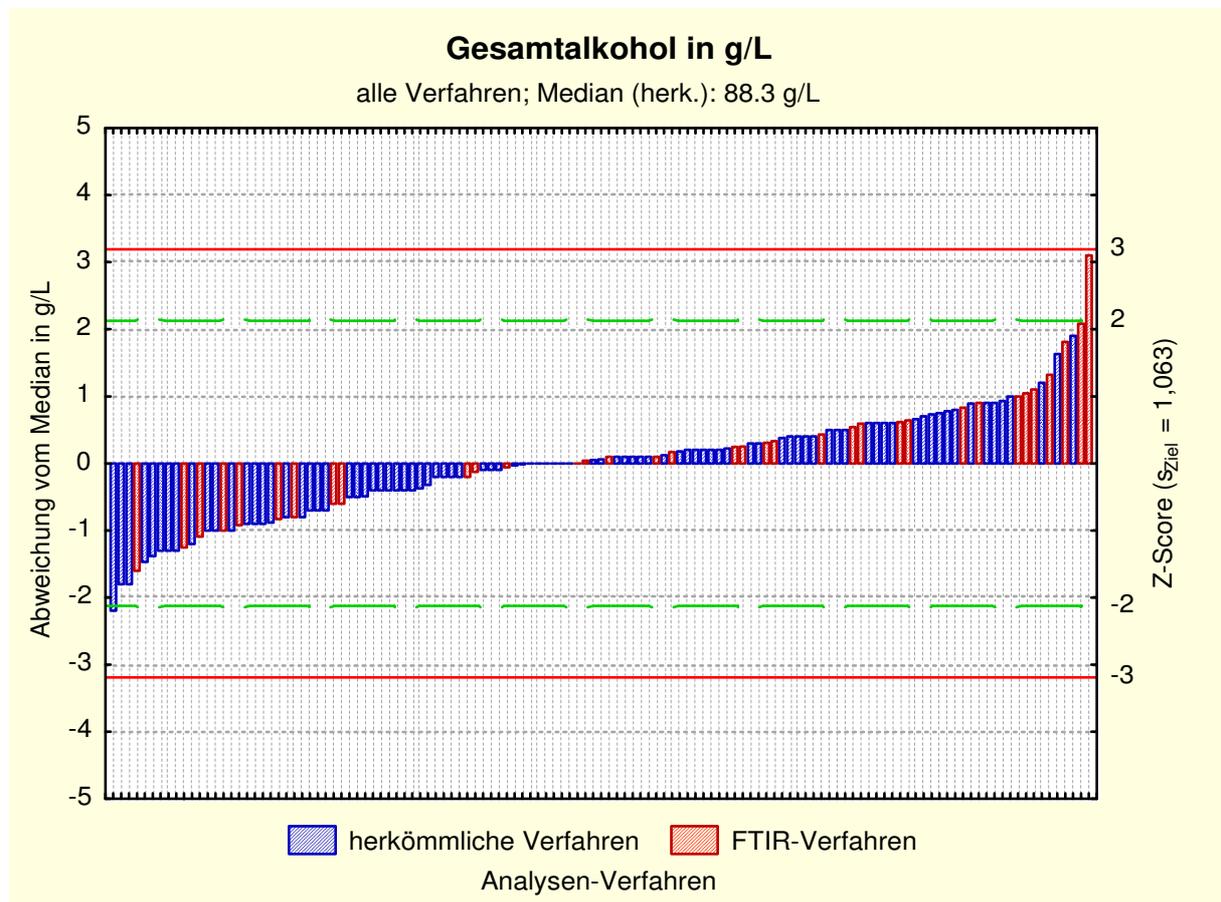
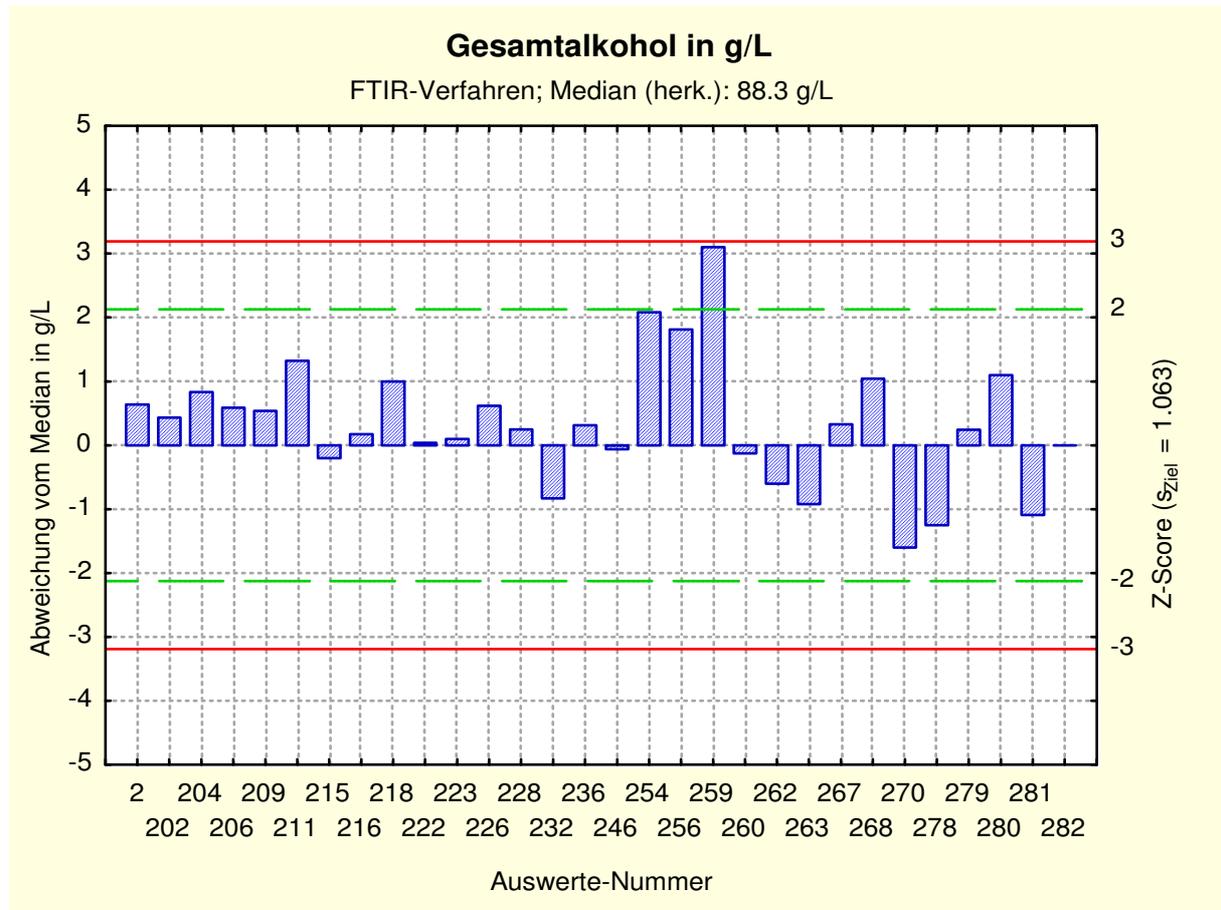
6.4.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamten Alkohol in g/L	alle Daten
Gültige Werte	90
Minimalwert	86,10
Mittelwert	88,218
Median	88,300
Maximalwert	90,20
Standardabweichung (s_L)	0,758
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,080
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,545
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,063
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,30
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,71
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,03
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,08
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	

6.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (Zucker enz./HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose, enzymat. oder HPLC] * 0,47)+Vorh. Alkohol [g/L]	59	88,39	0,620
LwK 1.1 (Zucker reduktometrisch)	((Gesamtzucker [reduktometrisch] - 1) * 0,47) + Vorh. Alkohol [g/L]	31	87,90	0,899
	herkömmliche Verfahren	90	88,24	0,731
LwK 1.1 (FTIR Alkohol + Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR-Glucose + FTIR-Fructose]*0,47)+Vorh. Alkohol [FTIR] [g/L]	34	88,48	0,945
Spezialberechnung	Alkohol pyknometrisch, Zucker FTIR	1	88,94	





6.5 Vorhandener Alkohol [g/L]

6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 2.1	79,59	1,390	0,61	2,60	
04	LwK 2.9	78,95	0,750	0,33	1,40	
05	LwK 2.1	78,06	-0,144	-0,06	-0,27	
06	LwK 2.4	78,40	0,200	0,09	0,37	
07	LwK 2.4	77,55	-0,650	-0,28	-1,21	
09	LwK 2.4	77,60	-0,600	-0,26	-1,12	
10	LwK 2.1	77,77	-0,430	-0,19	-0,80	
11	LwK 2.4	78,20	0,000	0,00	0,00	
12	LwK 2.1	78,60	0,400	0,17	0,75	
13	LwK 2.1	77,98	-0,220	-0,10	-0,41	
14	LwK 2.9	78,61	0,410	0,18	0,77	
15	LwK 2.1	78,40	0,200	0,09	0,37	
17	LwK 2.9	79,50	1,300	0,57	2,43	
18	LwK 2.7	78,09	-0,110	-0,05	-0,21	
19	LwK 2.9	78,20	0,000	0,00	0,00	
20	LwK 2.7	78,75	0,550	0,24	1,03	
21	LwK 2.7	78,48	0,280	0,12	0,52	
22	LwK 2.9	78,80	0,600	0,26	1,12	
23	LwK 2.5	78,90	0,700	0,30	1,31	
24	LwK 2.9	78,60	0,400	0,17	0,75	
25	LwK 2.1	78,30	0,100	0,04	0,19	
26	LwK 2.4	78,90	0,700	0,30	1,31	
27	LwK 2.5	77,30	-0,900	-0,39	-1,68	
28	LwK 2.4	77,80	-0,400	-0,17	-0,75	
29	LwK 2.1	78,37	0,170	0,07	0,32	
30	LwK 2.4	78,87	0,670	0,29	1,25	
31	LwK 2.9	78,40	0,200	0,09	0,37	
32	LwK 2.4	78,72	0,520	0,23	0,97	
33	LwK 2.1	76,80	-1,400	-0,61	-2,62	
34	LwK 2.8	77,60	-0,600	-0,26	-1,12	
37	LwK 2.2	79,20	1,000	0,44	1,87	
38	LwK 2.9	78,90	0,700	0,30	1,31	
39	LwK 2.4	78,00	-0,200	-0,09	-0,37	
40	LwK 2.4	78,50	0,300	0,13	0,56	
41	LwK 2.5	78,15	-0,050	-0,02	-0,09	
42	LwK 2.4	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
43	LwK 2.9	78,90	0,700	0,30	1,31	
44	LwK 2.1	78,20	0,000	0,00	0,00	
45	LwK 2.9	78,50	0,300	0,13	0,56	
46	LwK 2.5	78,50	0,300	0,13	0,56	
47	LwK 2.1	79,20	1,000	0,44	1,87	
48	LwK 2.5	78,40	0,200	0,09	0,37	
49	LwK 2.4	77,80	-0,400	-0,17	-0,75	
50	LwK 2.9	78,90	0,700	0,30	1,31	
51	LwK 2.9	77,50	-0,700	-0,30	-1,31	
52	LwK 2.9	78,75	0,550	0,24	1,03	
53	LwK 2.9	78,40	0,200	0,09	0,37	
55	LwK 2.1	78,00	-0,200	-0,09	-0,37	
56	LwK 2.9	79,09	0,890	0,39	1,66	
57	LwK 2.5	78,30	0,100	0,04	0,19	
58	LwK 2.9	78,70	0,500	0,22	0,93	
59	LwK 2.9	78,95	0,750	0,33	1,40	
60	LwK 2.1	79,80	1,600	0,70	2,99	
61	LwK 2.7	79,80	1,600	0,70	2,99	
62	LwK 2.1	77,00	-1,200	-0,52	-2,24	
63	LwK 2.1	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
64	LwK 2.5	78,30	0,100	0,04	0,19	
65	LwK 2.5	78,90	0,700	0,30	1,31	
69	LwK 2.4	78,39	0,190	0,08	0,36	
77	LwK 2.4	76,90	-1,303	-0,57	-2,43	
81	LwK 2.1	79,00	0,800	0,35	1,50	
89	LwK 2.9	78,80	0,600	0,26	1,12	
90	LwK 2.5	78,11	-0,090	-0,04	-0,17	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
91	LwK 2.9	78,20	0,000	0,00	0,00	
92	LwK 2.1	78,78	0,580	0,25	1,08	
94	LwK 2.5	78,10	-0,100	-0,04	-0,19	
95	LwK 2.9	78,90	0,700	0,30	1,31	
98	LwK 2.9	78,60	0,400	0,17	0,75	
99	LwK 2.4	78,20	0,000	0,00	0,00	
101	LwK 2.5	78,59	0,390	0,17	0,73	
102	LwK 2.9	78,39	0,190	0,08	0,36	
104	NMR	75,42	-2,784	-1,21	-5,20	(**)
105	NMR	78,25	0,050	0,02	0,09	
106	NMR	76,46	-1,743	-0,76	-3,26	
107	NMR	77,47	-0,728	-0,32	-1,36	
110	LwK 2.9	78,90	0,700	0,30	1,31	
111	LwK 2.9	79,00	0,800	0,35	1,50	
112	LwK 2.7	78,70	0,500	0,22	0,93	
113	LwK 2.9	78,60	0,400	0,17	0,75	
114	LwK 2.1	77,90	-0,300	-0,13	-0,56	
115	LwK 2.7	78,74	0,540	0,24	1,01	
116	LwK 2.3	78,60	0,400	0,17	0,75	
117	LwK 2.9	77,92	-0,280	-0,12	-0,52	
118	LwK 2.5	78,24	0,040	0,02	0,07	
119	LwK 2.9	78,50	0,300	0,13	0,56	
120	LwK 2.5	78,80	0,600	0,26	1,12	
121	LwK 2.5	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
122	LwK 2.9	78,40	0,200	0,09	0,37	
123	LwK 2.3	78,80	0,600	0,26	1,12	
124	LwK 2.4	78,50	0,300	0,13	0,56	
125	LwK 2.5	78,40	0,200	0,09	0,37	
126	LwK 2.5	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
127	LwK 2.5	77,10	-1,100	-0,48	-2,06	
128	LwK 2.5	78,20	0,000	0,00	0,00	
129	LwK 2.5	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
130	LwK 2.1	78,80	0,600	0,26	1,12	
131	LwK 2.4	77,70	-0,500	-0,22	-0,93	
132	LwK 2.7	78,50	0,300	0,13	0,56	
133	LwK 2.5	78,40	0,200	0,09	0,37	
134	LwK 2.4	78,20	0,000	0,00	0,00	
135	LwK 2.9	78,10	-0,100	-0,04	-0,19	
136	LwK 2.7	78,40	0,200	0,09	0,37	
137	LwK 2.5	77,40	-0,800	-0,35	-1,50	
138	LwK 2.1	79,10	0,900	0,39	1,68	
139	LwK 2.2	78,38	0,180	0,08	0,34	
140	LwK 2.7	78,40	0,200	0,09	0,37	
141	LwK 2.9	79,30	1,100	0,48	2,06	
142	LwK 2.3	80,20	2,000	0,87	3,74	
143	LwK 2.5	78,70	0,500	0,22	0,93	
144	LwK 2.4	78,50	0,300	0,13	0,56	
145	LwK 2.9	78,50	0,300	0,13	0,56	
146	LwK 2.4	77,20	-1,000	-0,44	-1,87	
147	LwK 2.2	79,30	1,100	0,48	2,06	
148	LwK 2.7	78,90	0,700	0,30	1,31	
149	LwK 2.4	78,50	0,300	0,13	0,56	
150	LwK 2.1	78,10	-0,100	-0,04	-0,19	

(**) Der Messwert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

6.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	78,16	-0,040	-0,02	-0,05	
202	LwK 2.8	79,40	1,200	0,52	1,35	
203	LwK 2.8	79,10	0,900	0,39	1,02	
204	LwK 2.8	79,30	1,100	0,48	1,24	
205	LwK 2.8	78,13	-0,065	-0,03	-0,07	
206	LwK 2.8	79,49	1,290	0,56	1,46	
207	LwK 2.8	79,16	0,960	0,42	1,08	
208	LwK 2.8	75,10	-3,100	-1,35	-3,50	
209	LwK 2.8	79,60	1,400	0,61	1,58	
210	LwK 2.8	80,36	2,160	0,94	2,44	
211	LwK 2.8	79,90	1,700	0,74	1,92	
212	LwK 2.8	79,50	1,300	0,57	1,47	
214	LwK 2.8	79,40	1,200	0,52	1,35	
215	LwK 2.8	78,20	0,000	0,00	0,00	
216	LwK 2.8	79,80	1,600	0,70	1,81	
217	LwK 2.8	79,90	1,700	0,74	1,92	
218	LwK 2.8	79,60	1,400	0,61	1,58	
219	LwK 2.8	77,70	-0,500	-0,22	-0,56	
220	LwK 2.8	79,00	0,800	0,35	0,90	
221	LwK 2.8	78,90	0,700	0,30	0,79	
222	LwK 2.8	78,30	0,100	0,04	0,11	
223	LwK 2.8	78,50	0,300	0,13	0,34	
224	LwK 2.8	78,20	0,000	0,00	0,00	
225	LwK 2.8	78,90	0,700	0,30	0,79	
226	LwK 2.8	79,00	0,800	0,35	0,90	
227	LwK 2.8	79,50	1,300	0,57	1,47	
228	LwK 2.8	78,40	0,200	0,09	0,23	
229	LwK 2.8	78,38	0,180	0,08	0,20	
231	LwK 2.8	79,50	1,300	0,57	1,47	
232	LwK 2.8	78,20	0,000	0,00	0,00	
234	LwK 2.8	77,60	-0,600	-0,26	-0,68	
235	LwK 2.8	78,50	0,300	0,13	0,34	
236	LwK 2.8	79,10	0,900	0,39	1,02	
237	LwK 2.8	78,20	0,000	0,00	0,00	
240	LwK 2.8	79,80	1,600	0,70	1,81	
241	LwK 2.8	77,90	-0,300	-0,13	-0,34	
242	LwK 2.8	78,93	0,730	0,32	0,82	
243	LwK 2.8	79,20	1,000	0,44	1,13	
244	LwK 2.8	78,34	0,140	0,06	0,16	
245	LwK 2.8	78,40	0,200	0,09	0,23	
246	LwK 2.8	78,00	-0,200	-0,09	-0,23	
247	LwK 2.8	78,30	0,100	0,04	0,11	
248	LwK 2.8	79,82	1,620	0,71	1,83	
249	LwK 2.8	78,10	-0,100	-0,04	-0,11	
250	LwK 2.8	78,64	0,440	0,19	0,50	
251	LwK 2.8	78,40	0,200	0,09	0,23	
252	LwK 2.8	79,85	1,650	0,72	1,86	
254	LwK 2.8	80,00	1,800	0,78	2,03	
255	LwK 2.8	78,20	0,000	0,00	0,00	
256	LwK 2.8	80,00	1,800	0,78	2,03	
257	LwK 2.8	79,30	1,100	0,48	1,24	
258	LwK 2.8	78,80	0,600	0,26	0,68	
259	LwK 2.8	80,52	2,320	1,01	2,62	
260	LwK 2.8	78,40	0,200	0,09	0,23	
261	LwK 2.8	78,80	0,600	0,26	0,68	
262	LwK 2.8	77,30	-0,900	-0,39	-1,02	
263	LwK 2.8	77,70	-0,500	-0,22	-0,56	
264	LwK 2.8	79,90	1,700	0,74	1,92	
265	LwK 2.8	79,06	0,860	0,37	0,97	
266	LwK 2.8	79,53	1,330	0,58	1,50	
267	LwK 2.8	78,74	0,540	0,24	0,61	
268	LwK 2.8	79,30	1,100	0,48	1,24	
269	LwK 2.8	77,44	-0,760	-0,33	-0,86	
270	LwK 2.8	77,18	-1,020	-0,44	-1,15	
271	LwK 2.8	79,71	1,510	0,66	1,70	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 2.8	79,60	1,400	0,61	1,58	
273	LwK 2.8	77,89	-0,310	-0,14	-0,35	
274	LwK 2.8	76,79	-1,407	-0,61	-1,59	
275	LwK 2.8	79,50	1,300	0,57	1,47	
276	LwK 2.8	79,40	1,200	0,52	1,35	
277	LwK 2.8	79,27	1,066	0,46	1,20	
278	LwK 2.8	76,82	-1,380	-0,60	-1,56	
279	LwK 2.8	77,94	-0,260	-0,11	-0,29	
280	LwK 2.8	80,10	1,900	0,83	2,14	
281	LwK 2.8	77,96	-0,240	-0,10	-0,27	
282	LwK 2.8	79,00	0,800	0,35	0,90	
283	LwK 2.8	75,10	-3,100	-1,35	-3,50	
312	LwK 2.8	79,20	1,000	0,44	1,13	
319	LwK 2.8	78,90	0,700	0,30	0,79	
320	LwK 2.8	78,60	0,400	0,17	0,45	
323	LwK 2.8	80,00	1,800	0,78	2,03	
336	LwK 2.8	78,60	0,400	0,17	0,45	
337	LwK 2.8	77,70	-0,500	-0,22	-0,56	
343	LwK 2.8	79,24	1,040	0,45	1,17	
349	LwK 2.8	78,80	0,600	0,26	0,68	
364	LwK 2.8	79,30	1,100	0,48	1,24	
368	LwK 2.8	78,90	0,700	0,30	0,79	

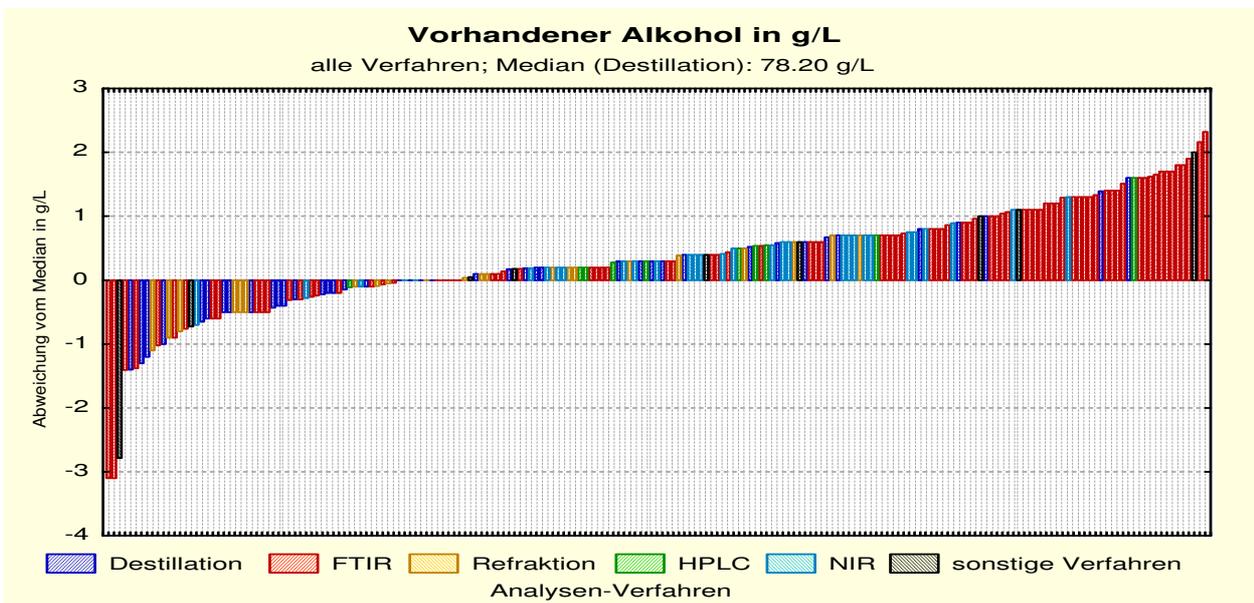
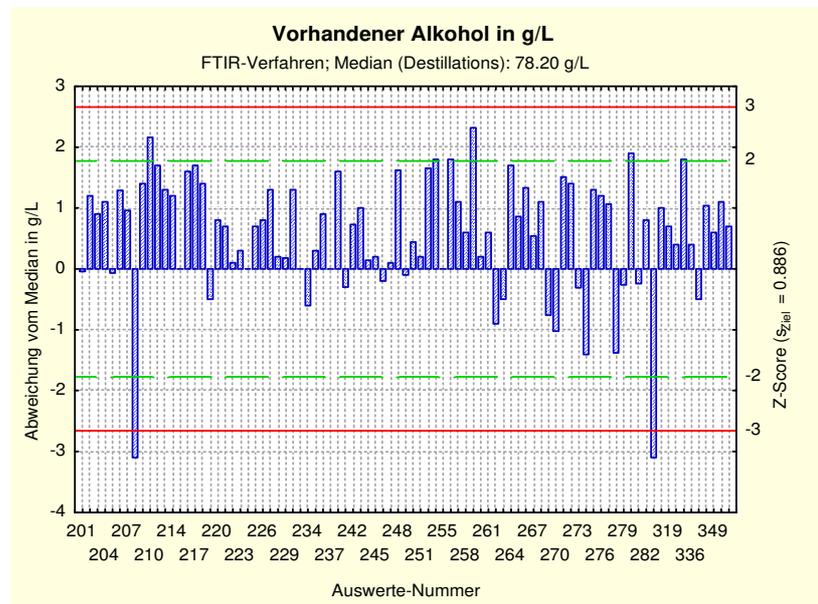
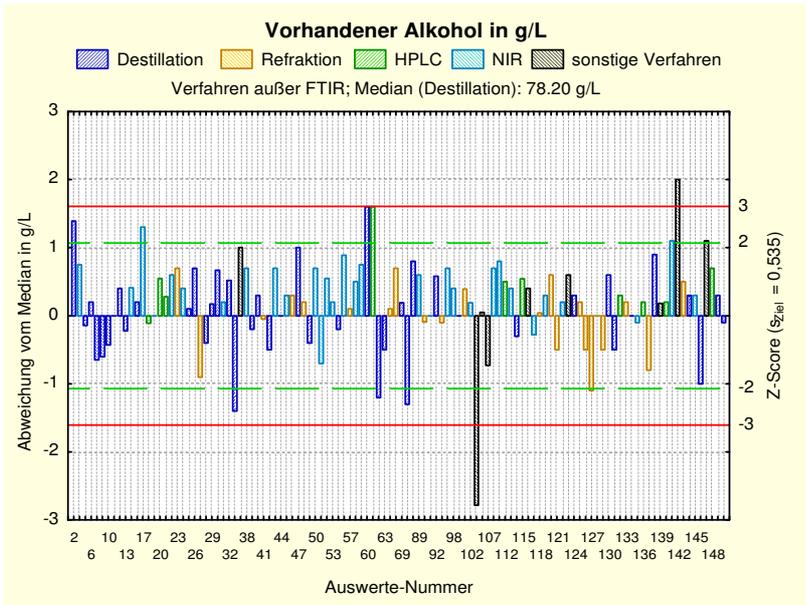
Der Messwert in **roter** Schrift wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

6.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	41
Minimalwert	76,80
Mittelwert	78,224
Median	78,200
Maximalwert	79,80
Standardabweichung (s _L)	0,668
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,104
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,295
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,886
Horrrat-Wert (s _L /s _H)	0,29
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,25
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,75
Quotient (u _M /s _H)	0,05
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,19
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,12

6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	21	78,368	0,735
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	21	78,124	0,557
	Destillationsverfahren	42	78,228	0,634
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	3	79,029	0,438
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	3	79,142	0,876
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	22	78,193	0,532
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	78,609	0,313
	herkömmliche Verfahren	80	78,331	0,586
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	78,816	0,893
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	31	78,650	0,365
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	3	77,154	1,457



6.6 Gesamtextrakt [g/L]

6.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	spezial	40,77	-0,13	-0,10	-0,22	
04	LwK 3.3	41,40	0,50	0,38	0,84	
06	LwK 3.3	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
07	LwK 3.3	40,24	-0,66	-0,50	-1,11	
09	LwK 3.1	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
10	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
11	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
12	LwK 3.2	40,90	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 3.2	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
14	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
15	LwK 3.2	41,10	0,20	0,15	0,34	
17	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
18	LwK 3.2	40,20	-0,70	-0,53	-1,18	
19	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
20	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
21	LwK 3.3	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
22	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
23	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
24	LwK 3.3	40,30	-0,60	-0,45	-1,01	
25	LwK 3.2	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
26	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
27	LwK 3.3	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
28	LwK 3.1	41,40	0,50	0,38	0,84	
29	LwK 3.2	40,90	0,00	0,00	0,00	
30	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
31	LwK 3.3	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
32	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
33	LwK 3.3	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
34	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
37	LwK 3.3	42,10	1,20	0,91	2,02	
38	LwK 3.3	41,30	0,40	0,30	0,67	
39	LwK 3.3	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
40	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
41	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
42	LwK 3.3	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
43	LwK 3.2	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
44	LwK 3.3	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
45	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
46	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
47	LwK 3.3	41,80	0,90	0,68	1,52	
48	LwK 3.3	41,30	0,40	0,30	0,67	
49	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
50	LwK 3.3	41,50	0,60	0,45	1,01	
51	LwK 3.3	40,40	-0,50	-0,38	-0,84	
52	LwK 3.1	41,05	0,15	0,11	0,25	
53	LwK 3.3	41,40	0,50	0,38	0,84	
56	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
57	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
58	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
60	LwK 3.2	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
61	LwK 3.3	41,50	0,60	0,45	1,01	
62	LwK 3.2	41,00	0,10	0,08	0,17	
63	LwK 3.2	41,30	0,40	0,30	0,67	
81	LwK 3.1	39,60	-1,30	-0,98	-2,19	
110	LwK 3.3	41,50	0,60	0,45	1,01	
111	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
112	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
113	LwK 3.2	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
114	LwK 3.2	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
115	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
116	LwK 3.3	42,00	1,10	0,83	1,85	
117	LwK 3.3	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
118	LwK 3.3	40,40	-0,50	-0,38	-0,84	
119	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
120	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
121	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
122	LwK 3.3	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
123	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
124	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
125	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
126	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
127	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
128	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
129	LwK 3.3	40,90	0,00	0,00	0,00	
130	LwK 3.2	41,40	0,50	0,38	0,84	
131	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
132	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
133	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
134	LwK 3.3	41,10	0,20	0,15	0,34	
135	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
136	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
137	LwK 3.3	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
138	LwK 3.2	37,00	-3,90	-2,95	-6,57	(**)
139	LwK 3.3	39,80	-1,10	-0,83	-1,85	
140	LwK 3.3	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
141	LwK 3.3	41,50	0,60	0,45	1,01	
142	LwK 3.3	42,20	1,30	0,98	2,19	
143	LwK 3.3	41,00	0,10	0,08	0,17	
144	LwK 3.2	40,90	0,00	0,00	0,00	
145	LwK 3.3	40,30	-0,60	-0,45	-1,01	
146	LwK 3.3	40,40	-0,50	-0,38	-0,84	
147	LwK 3.3	41,80	0,90	0,68	1,52	
148	LwK 3.3	41,30	0,40	0,30	0,67	
149	LwK 3.3	41,20	0,30	0,23	0,51	
150	LwK 3.2	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	

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

6.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	39,20	-1,70	-1,28	-2,86	
202	FTIR	41,27	0,37	0,28	0,62	
203	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
204	FTIR	41,70	0,80	0,60	1,35	
206	FTIR	40,20	-0,70	-0,53	-1,18	
209	FTIR	40,40	-0,50	-0,38	-0,84	
211	FTIR	41,70	0,80	0,60	1,35	
215	FTIR	40,50	-0,40	-0,30	-0,67	
216	FTIR	41,29	0,39	0,29	0,66	
217	FTIR	40,70	-0,20	-0,15	-0,34	
218	FTIR	40,20	-0,70	-0,53	-1,18	
219	FTIR	41,20	0,30	0,23	0,51	
220	FTIR	40,10	-0,80	-0,60	-1,35	
221	FTIR	43,50	2,60	1,96	4,38	
223	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
225	FTIR	40,34	-0,56	-0,42	-0,94	
226	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
227	FTIR	40,88	-0,02	-0,02	-0,03	
228	FTIR	42,00	1,10	0,83	1,85	
232	FTIR	41,30	0,40	0,30	0,67	
235	FTIR	40,40	-0,50	-0,38	-0,84	
236	FTIR	41,55	0,65	0,49	1,09	
237	FTIR	41,20	0,30	0,23	0,51	
240	FTIR	41,20	0,30	0,23	0,51	
246	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
247	FTIR	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
249	FTIR	40,90	0,00	0,00	0,00	
251	FTIR	41,50	0,60	0,45	1,01	
252	FTIR	40,77	-0,13	-0,10	-0,22	
254	FTIR	40,90	0,00	0,00	0,00	
258	FTIR	40,90	0,00	0,00	0,00	
259	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
260	LwK 3.2	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
261	FTIR	40,30	-0,60	-0,45	-1,01	
262	FTIR	40,80	-0,10	-0,08	-0,17	
263	FTIR	40,60	-0,30	-0,23	-0,51	
264	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
266	FTIR	40,30	-0,60	-0,45	-1,01	
267	FTIR	41,48	0,58	0,44	0,98	
268	FTIR	40,20	-0,70	-0,53	-1,18	
269	FTIR	41,41	0,51	0,38	0,85	
270	FTIR	39,90	-1,00	-0,76	-1,68	
271	FTIR	42,37	1,47	1,11	2,47	
272	FTIR	40,10	-0,80	-0,60	-1,35	
273	FTIR	40,37	-0,53	-0,40	-0,89	
275	FTIR	41,60	0,70	0,53	1,18	
276	FTIR	62,40	21,50	16,25	36,20	(*)
278	FTIR	40,11	-0,79	-0,60	-1,33	
279	FTIR	39,98	-0,92	-0,70	-1,55	
280	FTIR	40,30	-0,60	-0,45	-1,01	
281	FTIR	40,73	-0,17	-0,13	-0,29	
282	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	
283	FTIR	41,80	0,90	0,68	1,52	
320	FTIR	39,90	-1,00	-0,76	-1,68	
336	FTIR	41,50	0,60	0,45	1,01	
337	FTIR	41,00	0,10	0,08	0,17	

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

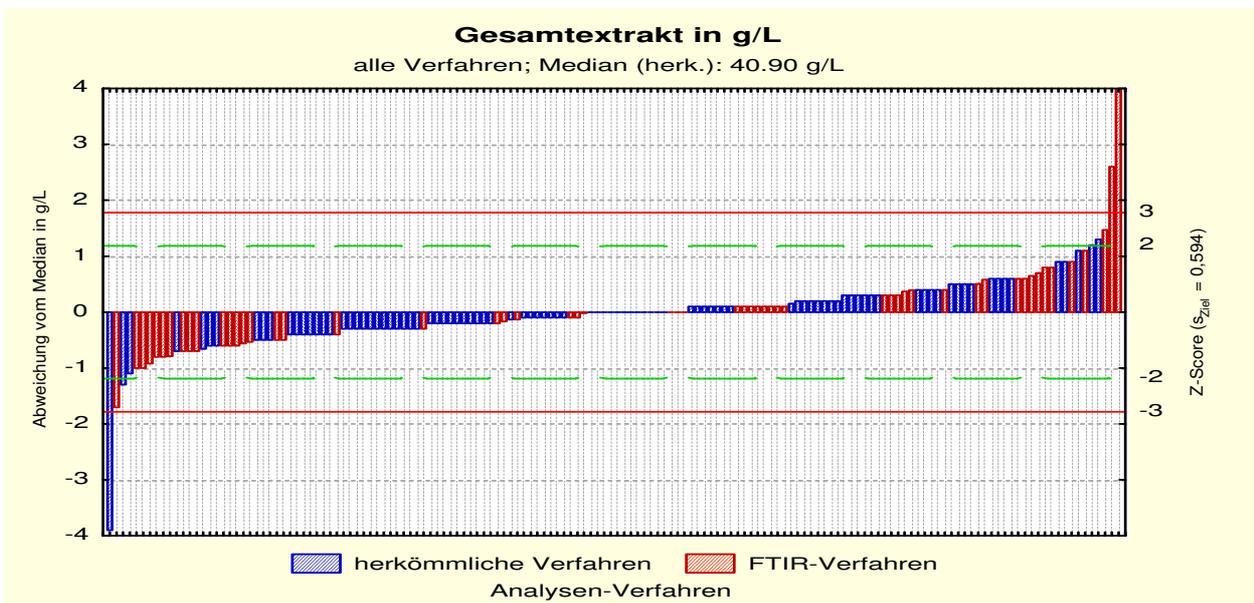
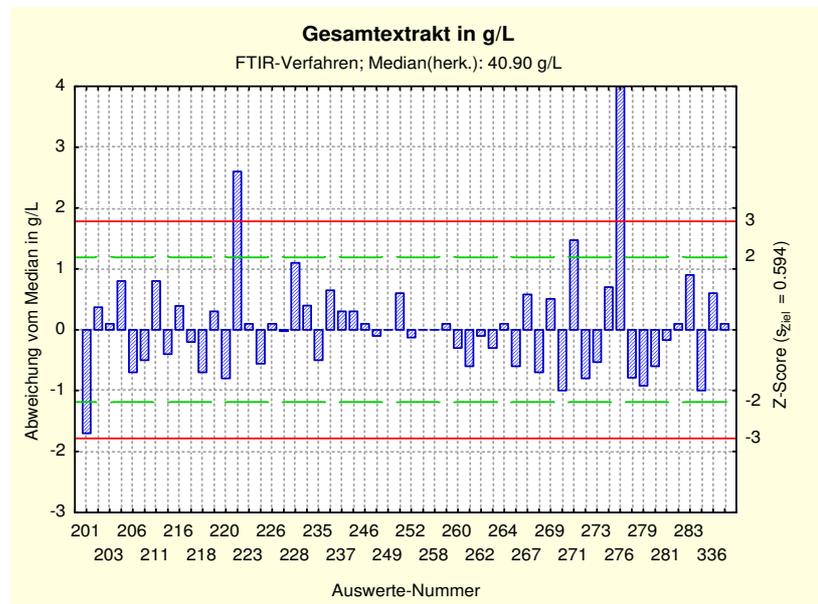
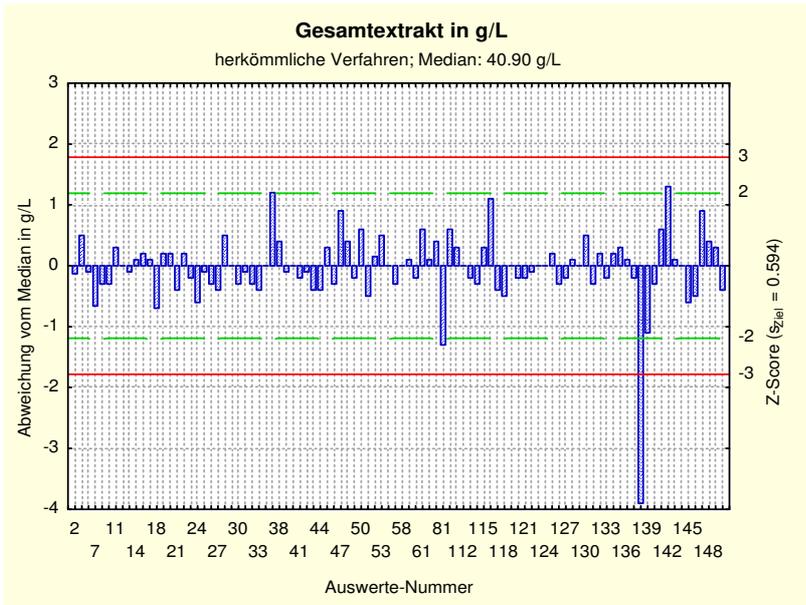
6.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	95	94
Minimalwert	37,0	39,6
Mittelwert	40,86	40,90
Median	40,90	40,90
Maximalwert	42,2	42,2
Standardabweichung (s _L)	0,592	0,438
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,061	0,045
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,323	1,323
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,565) *)	(0,565) *)
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,45	0,33
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,00	0,74
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(1,05)	(0,78)
Quotient (u _M /s _H)	0,05	0,03
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,10	0,08
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,11)	(0,08)

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

6.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	4	40,680	0,849
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n.LwK 2.1	16	40,780	0,364
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	75	40,908	0,401
	herkömmliche Verfahren	95	40,882	0,395
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	55	40,886	0,669
spezial	Berechnung nach Tabarie, Messung mit DR Gerät	1	40,770	



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	LwK 3.3	19,61	-0,29	-0,40	-0,28	
06	LwK 3.3	19,30	-0,60	-0,84	-0,57	
07	LwK 3.3	19,44	-0,46	-0,64	-0,44	
10	LwK 3.3	20,90	1,00	1,39	0,95	
11	LwK 3.3	20,40	0,50	0,70	0,48	
12	LwK 3.2	19,90	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 3.2	19,90	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 3.3	19,10	-0,80	-1,11	-0,76	
15	LwK 3.2	19,90	0,00	0,00	0,00	
17	LwK 3.3	20,50	0,60	0,84	0,57	
18	LwK 3.2	18,10	-1,80	-2,51	-1,72	
19	LwK 3.3	21,80	1,90	2,65	1,81	
20	LwK 3.3	19,80	-0,10	-0,14	-0,10	
21	LwK 3.3	19,40	-0,50	-0,70	-0,48	
22	LwK 3.3	20,00	0,10	0,14	0,10	
23	LwK 3.3	19,60	-0,30	-0,42	-0,29	
24	LwK 3.3	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
25	LwK 3.2	19,60	-0,30	-0,42	-0,29	
26	LwK 3.3	19,70	-0,20	-0,28	-0,19	
27	LwK 3.3	18,00	-1,90	-2,65	-1,81	
28	LwK 3.1	20,90	1,00	1,39	0,95	
29	LwK 3.2	19,20	-0,70	-0,98	-0,67	
30	LwK 3.2	18,80	-1,10	-1,53	-1,05	
31	LwK 3.3	19,20	-0,70	-0,98	-0,67	
32	LwK 3.3	20,10	0,20	0,28	0,19	
33	LwK 3.3	20,00	0,10	0,14	0,10	
34	LwK 3.3	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
37	LwK 3.3	22,04	2,14	2,98	2,04	
38	LwK 3.3	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
39	LwK 3.3	20,60	0,70	0,98	0,67	
40	LwK 3.3	19,90	0,00	0,00	0,00	
41	LwK 3.3	19,60	-0,30	-0,42	-0,29	
42	LwK 3.3	19,70	-0,20	-0,28	-0,19	
43	LwK 3.3	21,00	1,10	1,53	1,05	
44	LwK 3.3	19,30	-0,60	-0,84	-0,57	
45	LwK 3.3	21,10	1,20	1,67	1,14	
46	LwK 3.3	18,50	-1,40	-1,95	-1,34	
47	LwK 3.3	20,50	0,60	0,84	0,57	
48	LwK 3.3	19,70	-0,20	-0,28	-0,19	
49	LwK 3.3	21,50	1,60	2,23	1,53	
50	LwK 3.3	19,90	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
52	LwK 3.1	20,50	0,60	0,84	0,57	
53	LwK 3.3	20,20	0,30	0,42	0,29	
56	LwK 3.3	19,80	-0,10	-0,14	-0,10	
57	LwK 3.3	20,90	1,00	1,39	0,95	
58	LwK 3.3	20,10	0,20	0,28	0,19	
59	LwK 3.3	21,00	1,10	1,53	1,05	
60	LwK 3.2	20,15	0,25	0,35	0,24	
61	LwK 3.3	21,00	1,10	1,53	1,05	
62	LwK 3.2	20,60	0,70	0,98	0,67	
81	LwK 3.2	18,40	-1,50	-2,09	-1,43	
110	LwK 3.3	20,30	0,40	0,56	0,38	
111	LwK 3.3	19,90	0,00	0,00	0,00	
112	LwK 3.3	19,60	-0,30	-0,42	-0,29	
113	LwK 3.2	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
114	LwK 3.2	20,00	0,10	0,14	0,10	
115	LwK 3.3	21,10	1,20	1,67	1,14	
116	LwK 3.3	19,40	-0,50	-0,70	-0,48	
117	LwK 3.3	19,20	-0,70	-0,98	-0,67	
118	LwK 3.3	19,00	-0,90	-1,25	-0,86	
119	LwK 3.3	19,50	-0,40	-0,56	-0,38	
120	LwK 3.3	20,60	0,70	0,98	0,67	
121	LwK 3.3	19,90	0,00	0,00	0,00	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
122	LwK 3.3	19,40	-0,50	-0,70	-0,48	
123	LwK 3.3	20,60	0,70	0,98	0,67	
124	LwK 3.3	21,00	1,10	1,53	1,05	
125	LwK 3.3	20,00	0,10	0,14	0,10	
126	LwK 3.3	20,50	0,60	0,84	0,57	
127	LwK 3.3	19,80	-0,10	-0,14	-0,10	
128	LwK 3.3	20,40	0,50	0,70	0,48	
129	LwK 3.3	21,00	1,10	1,53	1,05	
130	LwK 3.2	19,90	0,00	0,00	0,00	
131	LwK 3.3	19,80	-0,10	-0,14	-0,10	
132	LwK 3.3	20,10	0,20	0,28	0,19	
133	LwK 3.3	19,30	-0,60	-0,84	-0,57	
134	LwK 3.3	19,90	0,00	0,00	0,00	
135	LwK 3.3	20,70	0,80	1,11	0,76	
136	LwK 3.3	20,10	0,20	0,28	0,19	
137	LwK 3.3	20,30	0,40	0,56	0,38	
138	LwK 3.2	15,82	-4,08	-5,68	-3,89	
139	LwK 3.3	19,74	-0,16	-0,22	-0,15	
140	LwK 3.3	19,30	-0,60	-0,84	-0,57	
141	LwK 3.3	20,20	0,30	0,42	0,29	
142	LwK 3.3	20,70	0,80	1,11	0,76	
143	LwK 3.3	21,43	1,53	2,13	1,46	
144	LwK 3.2	20,40	0,50	0,70	0,48	
145	LwK 3.3	19,20	-0,70	-0,98	-0,67	
146	LwK 3.3	18,70	-1,20	-1,67	-1,14	
147	LwK 3.3	21,70	1,80	2,51	1,72	
148	LwK 3.3	20,40	0,50	0,70	0,48	
149	LwK 3.3	20,60	0,70	0,98	0,67	
150	LwK 3.2	20,80	0,90	1,25	0,86	

6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR	20,44	0,54	0,75	0,52	
204	LwK 3.3F	20,79	0,89	1,23	0,84	
206	FTIR	20,20	0,30	0,42	0,29	
209	FTIR	19,10	-0,80	-1,11	-0,76	
215	FTIR	18,20	-1,70	-2,37	-1,62	
216	FTIR	21,58	1,68	2,34	1,60	
218	FTIR	19,30	-0,60	-0,84	-0,57	
223	FTIR	19,90	0,00	0,00	0,00	
226	LwK 3.3F	20,39	0,49	0,68	0,47	
228	FTIR	20,40	0,50	0,70	0,48	
229	FTIR	40,93	21,03	29,30	20,06	(*)
236	LwK 3.3F	20,30	0,40	0,56	0,38	
246	FTIR	19,20	-0,70	-0,98	-0,67	
252	FTIR	19,09	-0,81	-1,13	-0,77	
254	FTIR	18,80	-1,10	-1,53	-1,05	
259	FTIR	17,00	-2,90	-4,04	-2,77	
260	LwK 3.2F	19,80	-0,10	-0,14	-0,10	
267	FTIR	20,50	0,60	0,84	0,57	
269	FTIR	20,20	0,30	0,42	0,29	
270	FTIR	19,66	-0,24	-0,33	-0,23	
275	FTIR	19,70	-0,20	-0,28	-0,19	
278	spezial	20,66	0,76	1,06	0,73	
279	spezial	20,53	0,63	0,88	0,60	
280	FTIR	20,50	0,60	0,84	0,57	
281	LwK 3.2F	21,05	1,15	1,60	1,10	
282	LwK 3.3F	24,77	4,87	6,79	4,65	

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

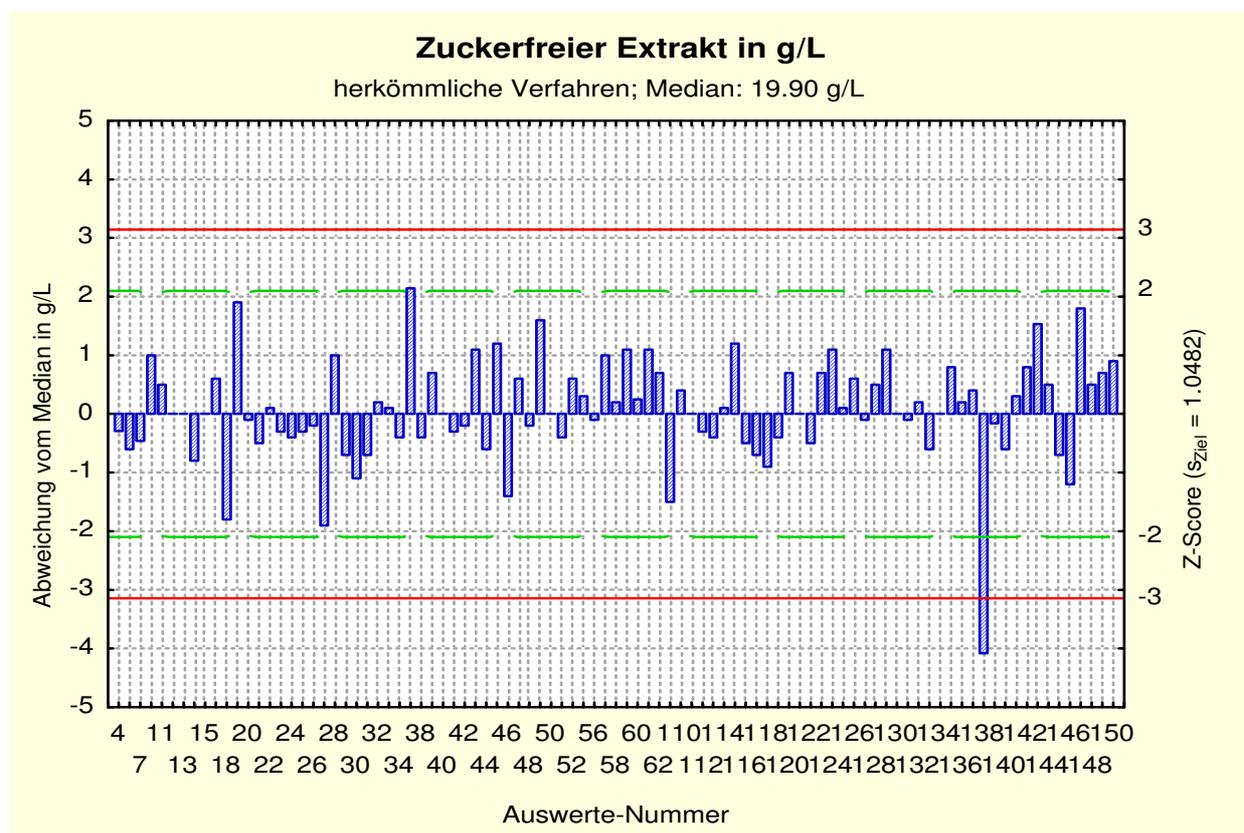
6.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

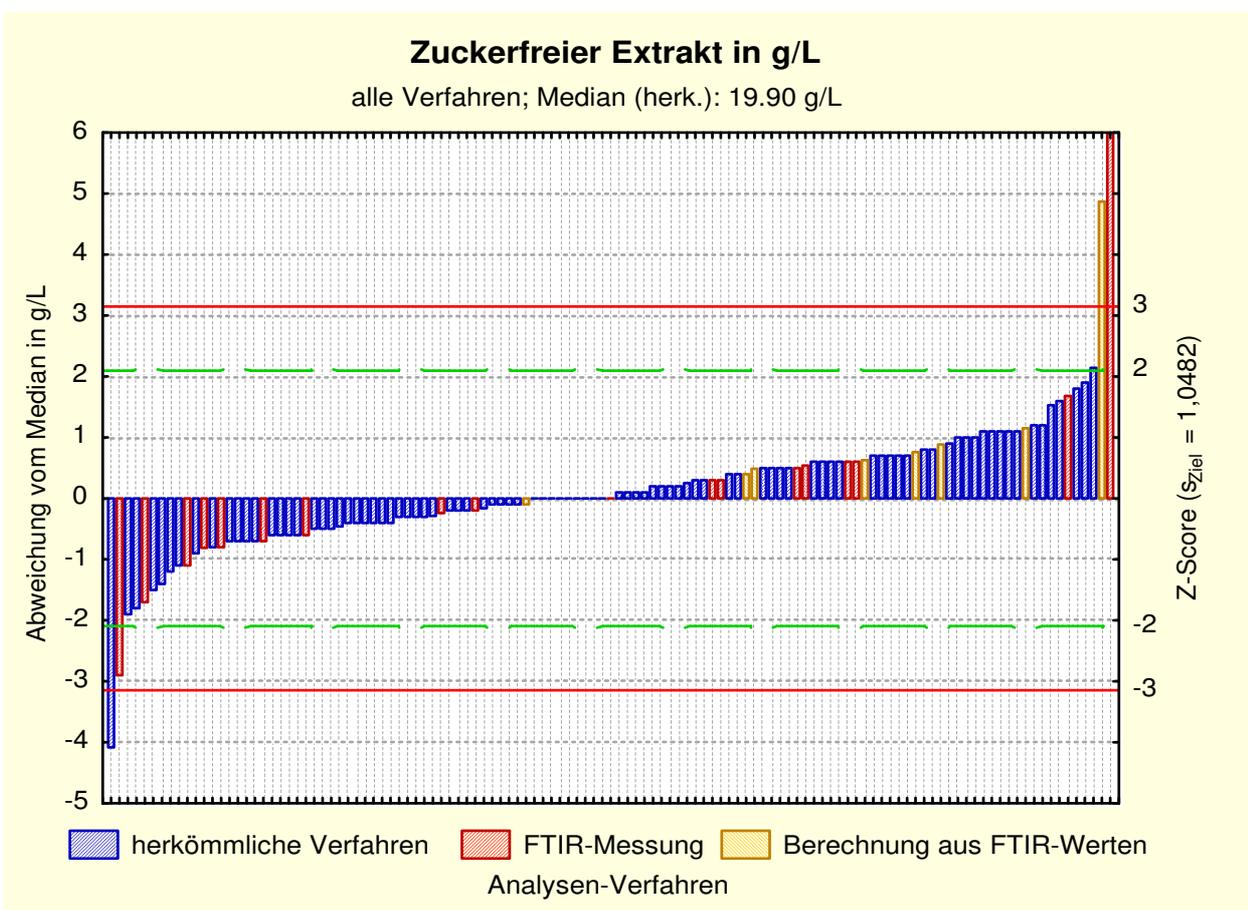
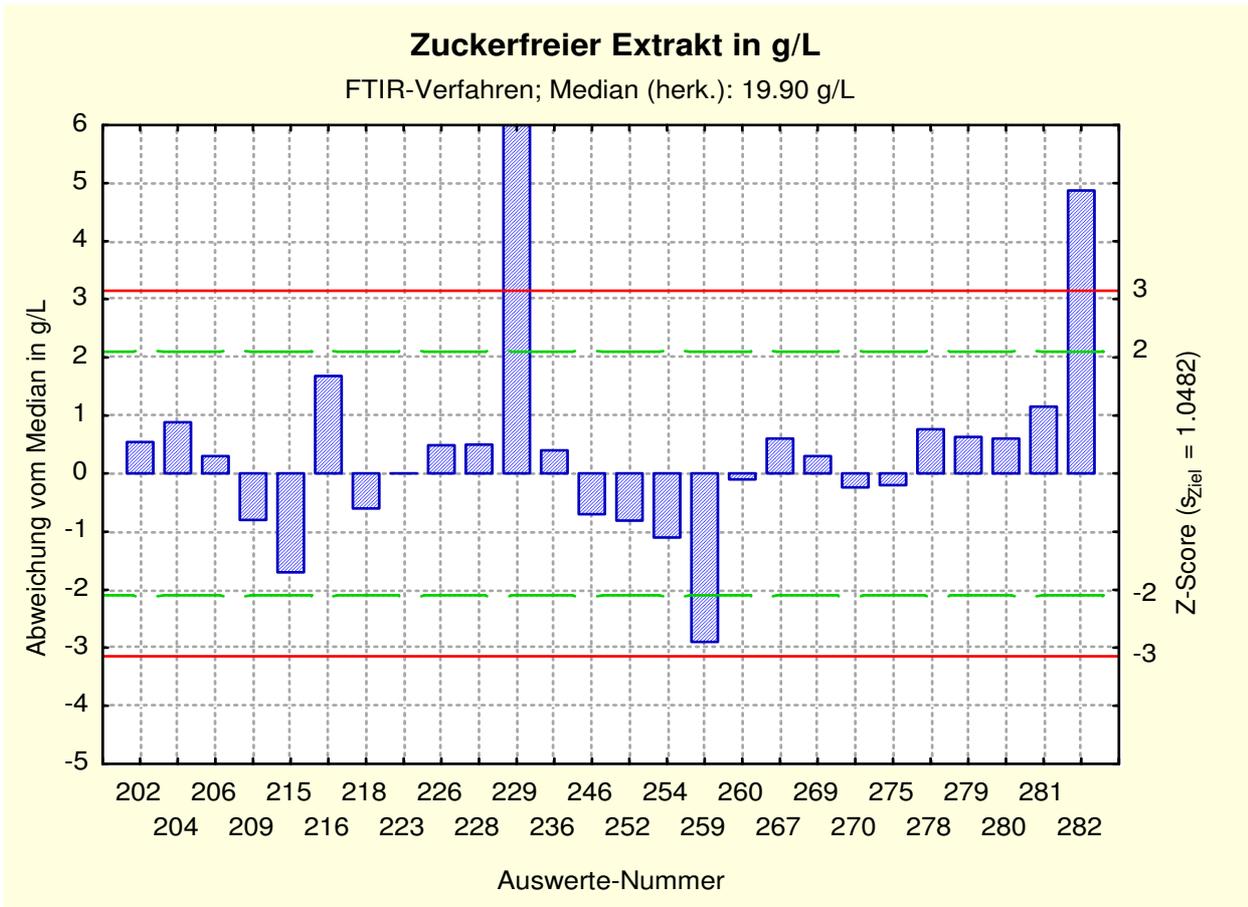
Ergebnisse für Zuckerfreier Extrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	93
Minimalwert	15,8
Mittelwert	19,97
Median	19,90
Maximalwert	22,0
Standardabweichung (s_L)	0,893
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,093
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,718
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,24
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,85
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	
Quotient (u_M/s_H)	0,13
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,09
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	

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

6.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	20,700	0,321
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n. LwK 2.1	16	19,611	0,888
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	75	20,044	0,749
	herkömmliche Verfahren	93	19,996	0,756
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	18	19,785	1,055
spezial	FTIR-Gesamtextrakt - FTIR-Zucker	2	20,595	0,104
LwK 3.2F	Berechnung n. Tabarie auf Basis: FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol (fehlerhafte Kodierung siehe LwK 3.2)	2	20,425	1,002
LwK 3.3F	Berechnung n. Tabarie auf Basis: FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol)	4	21,507	2,316





6.8 Vergärbare Zucker [g/L]

6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	LwK 4.5	21,79	0,600	0,79	0,98	
06	LwK 4.5	21,50	0,310	0,41	0,50	
07	LwK 4.5	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
09	LwK 4.5	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
10	LwK 4.5	19,70	-1,490	-1,97	-2,42	
11	LwK 4.1	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
12	LwK 4.7	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
13	LwK 4.7	20,98	-0,210	-0,28	-0,34	
14	LwK 4.5	21,90	0,710	0,94	1,15	
15	LwK 4.5	21,20	0,010	0,01	0,02	
18	LwK 4.7	21,70	0,510	0,67	0,83	
19	LwK 4.4	19,30	-1,890	-2,50	-3,07	
20	LwK 4.7	21,27	0,080	0,11	0,13	
21	LwK 4.7	21,14	-0,050	-0,07	-0,08	
22	NMR	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
23	LwK 4.4	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
24	LwK 4.4	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
25	LwK 4.5	21,20	0,010	0,01	0,02	
26	LwK 4.7	21,01	-0,182	-0,24	-0,30	
27	LwK 4.4	22,50	1,310	1,73	2,13	
28	LwK 4.4	20,50	-0,690	-0,91	-1,12	
29	LwK 4.5	21,70	0,510	0,67	0,83	
30	LwK 4.7	21,80	0,610	0,81	0,99	
31	LwK 4.5	21,60	0,410	0,54	0,67	
32	LwK 4.4	20,50	-0,690	-0,91	-1,12	
33	LwK 4.4	20,50	-0,690	-0,91	-1,12	
34	LwK 4.8	21,40	0,210	0,28	0,34	
37	LwK 4.3	20,06	-1,130	-1,49	-1,84	
38	LwK 4.5	21,80	0,610	0,81	0,99	
39	LwK 4.7	20,30	-0,890	-1,18	-1,45	
40	LwK 4.5	21,98	0,790	1,04	1,28	
41	LwK 4.5	21,08	-0,110	-0,15	-0,18	
42	LwK 4.7	21,04	-0,152	-0,20	-0,25	
43	LwK 4.4	19,50	-1,690	-2,23	-2,75	
44	LwK 4.5	21,15	-0,040	-0,05	-0,07	
45	LwK 4.5	20,20	-0,990	-1,31	-1,61	
46	LwK 4.5	22,10	0,910	1,20	1,48	
47	LwK 4.5	21,30	0,110	0,15	0,18	
48	LwK 4.5	21,55	0,360	0,48	0,59	
49	LwK 4.4	19,20	-1,990	-2,63	-3,24	
50	LwK 4.7	21,59	0,400	0,53	0,65	
51	LwK 4.4	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
52	LwK 4.5	20,46	-0,730	-0,96	-1,19	
53	LwK 4.5	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
55	LwK 4.5	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
56	LwK 4.5	21,14	-0,050	-0,07	-0,08	
57	LwK 4.5	20,70	-0,490	-0,65	-0,80	
58	LwK 4.4	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
59	LwK 4.7	19,90	-1,290	-1,70	-2,10	
60	LwK 4.4	21,55	0,360	0,48	0,59	
61	LwK 4.7	20,50	-0,690	-0,91	-1,12	
62	LwK 4.4	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
63	LwK 4.5	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
64	LwK 4.4	20,55	-0,640	-0,85	-1,04	
77	LwK 4.4	19,59	-1,600	-2,11	-2,60	
81	LwK 4.5	21,18	-0,010	-0,01	-0,02	
92	LwK 4.5	20,63	-0,560	-0,74	-0,91	
94	LwK 4.7	21,30	0,110	0,15	0,18	
101	LwK 4.4	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
104	NMR	20,85	-0,336	-0,44	-0,55	
105	NMR	21,16	-0,030	-0,04	-0,05	
106	NMR	19,44	-1,754	-2,32	-2,85	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
107	NMR	22,17	0,981	1,30	1,59	
110	LwK 4.5	21,20	0,010	0,01	0,02	
111	LwK 4.7	21,30	0,110	0,15	0,18	
112	LwK 4.7	21,30	0,110	0,15	0,18	
113	LwK 4.5	21,20	0,010	0,01	0,02	
114	LwK 4.4	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
115	LwK 4.7	21,14	-0,050	-0,07	-0,08	
116	LwK 4.4	22,60	1,410	1,86	2,29	
117	LwK 4.5	21,26	0,070	0,09	0,11	
118	LwK 4.5	21,35	0,160	0,21	0,26	
119	LwK 4.5	21,40	0,210	0,28	0,34	
120	LwK 4.4	20,10	-1,090	-1,44	-1,77	
121	LwK 4.4	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
122	LwK 4.7	21,40	0,210	0,28	0,34	
123	LwK 4.4	20,30	-0,890	-1,18	-1,45	
124	LwK 4.4	19,90	-1,290	-1,70	-2,10	
125	LwK 4.4	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
126	LwK 4.4	20,10	-1,090	-1,44	-1,77	
127	LwK 4.4	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
128	LwK 4.4	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
129	LwK 4.4	19,90	-1,290	-1,70	-2,10	
130	LwK 4.5	21,50	0,310	0,41	0,50	
131	LwK 4.5	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
132	LwK 4.7	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
133	LwK 4.5	21,40	0,210	0,28	0,34	
134	LwK 4.5	21,20	0,010	0,01	0,02	
135	LwK 4.5	20,54	-0,650	-0,86	-1,06	
136	LwK 4.7	20,98	-0,210	-0,28	-0,34	
137	LwK 4.5	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
138	LwK 4.3	21,18	-0,010	-0,01	-0,02	
139	LwK 4.3	20,06	-1,130	-1,49	-1,84	
140	LwK 4.7	21,30	0,110	0,15	0,18	
141	LwK 4.5	21,30	0,110	0,15	0,18	
142	LwK 4.4	21,50	0,310	0,41	0,50	
143	LwK 4.4	20,57	-0,620	-0,82	-1,01	
144	LwK 4.5	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
145	LwK 4.5	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
146	LwK 4.5	21,71	0,520	0,69	0,85	
147	LwK 4.3	20,10	-1,090	-1,44	-1,77	
148	LwK 4.7	20,85	-0,340	-0,45	-0,55	
149	LwK 4.1	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
150	LwK 4.4	19,70	-1,490	-1,97	-2,42	

6.8.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	23,51	2,320	3,06	3,77	
203	LwK 4.8	20,92	-0,270	-0,36	-0,44	
204	LwK 4.8	21,05	-0,136	-0,18	-0,22	
206	LwK 4.8	20,00	-1,190	-1,57	-1,93	
207	LwK 4.8	21,20	0,010	0,01	0,02	
208	LwK 4.8	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
209	LwK 4.8	19,66	-1,530	-2,02	-2,49	
210	LwK 4.8	20,00	-1,190	-1,57	-1,93	
211	LwK 4.8	19,80	-1,390	-1,84	-2,26	
212	LwK 4.8	20,58	-0,610	-0,81	-0,99	
214	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
215	LwK 4.8	20,65	-0,540	-0,71	-0,88	
216	LwK 4.8	19,72	-1,470	-1,94	-2,39	
217	LwK 4.8	20,56	-0,630	-0,83	-1,02	
218	LwK 4.8	20,92	-0,270	-0,36	-0,44	
220	LwK 4.8	22,80	1,610	2,13	2,62	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	LwK 4.8	22,41	1,220	1,61	1,98	
222	LwK 4.8	21,36	0,170	0,22	0,28	
223	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
224	LwK 4.8	21,34	0,150	0,20	0,24	
225	LwK 4.8	21,14	-0,050	-0,07	-0,08	
226	LwK 4.8	20,10	-1,090	-1,44	-1,77	
227	LwK 4.8	22,19	1,000	1,32	1,63	
228	LwK 4.8	21,59	0,400	0,53	0,65	
229	LwK 4.8	20,27	-0,920	-1,22	-1,50	
232	LwK 4.8	19,73	-1,460	-1,93	-2,37	
234	LwK 4.8	21,40	0,210	0,28	0,34	
235	LwK 4.8	21,90	0,710	0,94	1,15	
236	LwK 4.8	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
237	LwK 4.8	21,70	0,510	0,67	0,83	
240	LwK 4.8	22,36	1,170	1,55	1,90	
241	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
242	LwK 4.8	20,36	-0,830	-1,10	-1,35	
243	LwK 4.8	22,30	1,110	1,47	1,80	
244	LwK 4.8	20,97	-0,220	-0,29	-0,36	
245	LwK 4.8	21,09	-0,100	-0,13	-0,16	
246	LwK 4.8	21,80	0,610	0,81	0,99	
247	LwK 4.8	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
248	LwK 4.8	20,81	-0,380	-0,50	-0,62	
249	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
250	LwK 4.8	20,56	-0,630	-0,83	-1,02	
251	LwK 4.8	19,56	-1,630	-2,15	-2,65	
252	LwK 4.8	21,68	0,490	0,65	0,80	
254	LwK 4.8	22,10	0,910	1,20	1,48	
255	LwK 4.8	20,30	-0,890	-1,18	-1,45	
256	LwK 4.8	21,50	0,310	0,41	0,50	
257	LwK 4.8	21,32	0,130	0,17	0,21	
258	LwK 4.8	20,65	-0,540	-0,71	-0,88	
259	LwK 4.8	24,12	2,930	3,87	4,76	
260	LwK 4.8	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
261	LwK 4.8	20,70	-0,490	-0,65	-0,80	
262	LwK 4.8	22,50	1,310	1,73	2,13	
263	LwK 4.8	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
264	LwK 4.8	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
265	LwK 4.8	19,76	-1,430	-1,89	-2,33	
266	LwK 4.8	20,29	-0,900	-1,19	-1,46	
267	LwK 4.8	21,04	-0,150	-0,20	-0,24	
268	LwK 4.8	21,60	0,410	0,54	0,67	
269	LwK 4.8	21,16	-0,030	-0,04	-0,05	
270	LwK 4.8	20,30	-0,890	-1,18	-1,45	
271	LwK 4.8	21,07	-0,120	-0,16	-0,20	
272	LwK 4.8	21,40	0,210	0,28	0,34	
273	LwK 4.8	21,01	-0,180	-0,24	-0,29	
274	LwK 4.8	20,95	-0,240	-0,32	-0,39	
275	LwK 4.8	21,90	0,710	0,94	1,15	
276	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
277	LwK 4.8	18,46	-2,730	-3,61	-4,44	
278	LwK 4.8	19,45	-1,740	-2,30	-2,83	
279	LwK 4.8	19,45	-1,740	-2,30	-2,83	
280	LwK 4.8	19,80	-1,390	-1,84	-2,26	
281	LwK 4.8	19,68	-1,510	-1,99	-2,46	
282	LwK 4.8	19,68	-1,510	-1,99	-2,46	
283	LwK 4.8	21,20	0,010	0,01	0,02	
319	LwK 4.8	19,50	-1,690	-2,23	-2,75	
320	LwK 4.8	20,56	-0,630	-0,83	-1,02	
336	LwK 4.8	21,02	-0,170	-0,22	-0,28	
337	LwK 4.8	21,70	0,510	0,67	0,83	
349	LwK 4.8	19,60	-1,590	-2,10	-2,59	
364	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
368	LwK 4.8	21,45	0,260	0,34	0,42	

6.8.3 Reduktometrische Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse reduktometrischer Bestimmungen (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	LwK 4.1	20,80	0,275	0,37	0,46	
19	LwK 4.4	19,30	-1,225	-1,66	-2,05	
23	LwK 4.4	21,10	0,575	0,78	0,96	
24	LwK 4.4	20,80	0,275	0,37	0,46	
27	LwK 4.4	22,50	1,975	2,68	3,31	
28	LwK 4.4	20,50	-0,025	-0,03	-0,04	
32	LwK 4.4	20,50	-0,025	-0,03	-0,04	
33	LwK 4.4	20,50	-0,025	-0,03	-0,04	
37	LwK 4.3	20,06	-0,465	-0,63	-0,78	
43	LwK 4.4	19,50	-1,025	-1,39	-1,72	
49	LwK 4.4	19,20	-1,325	-1,80	-2,22	
51	LwK 4.4	20,90	0,375	0,51	0,63	
58	LwK 4.4	20,80	0,275	0,37	0,46	
60	LwK 4.4	21,55	1,025	1,39	1,72	
62	LwK 4.4	20,40	-0,125	-0,17	-0,21	
64	LwK 4.4	20,55	0,025	0,03	0,04	
77	LwK 4.4	19,59	-0,935	-1,27	-1,57	
101	LwK 4.4	20,40	-0,125	-0,17	-0,21	
114	LwK 4.4	20,60	0,075	0,10	0,13	
116	LwK 4.4	22,60	2,075	2,82	3,48	
120	LwK 4.4	20,10	-0,425	-0,58	-0,71	
121	LwK 4.4	20,80	0,275	0,37	0,46	
123	LwK 4.4	20,30	-0,225	-0,31	-0,38	
124	LwK 4.4	19,90	-0,625	-0,85	-1,05	
125	LwK 4.4	21,10	0,575	0,78	0,96	
126	LwK 4.4	20,10	-0,425	-0,58	-0,71	
127	LwK 4.4	20,90	0,375	0,51	0,63	
128	LwK 4.4	20,60	0,075	0,10	0,13	
129	LwK 4.4	19,90	-0,625	-0,85	-1,05	
138	LwK 4.3	21,18	0,655	0,89	1,10	
139	LwK 4.3	20,06	-0,465	-0,63	-0,78	
142	LwK 4.4	21,50	0,975	1,32	1,63	
143	LwK 4.4	20,57	0,045	0,06	0,08	
147	LwK 4.3	20,10	-0,425	-0,58	-0,71	
149	LwK 4.1	20,60	0,075	0,10	0,13	
150	LwK 4.4	19,70	-0,825	-1,12	-1,38	

6.8.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse reduktometrischer Bestimmungen (informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	23,51	2,985	4,05	5,00	(**)
203	LwK 4.8	20,92	0,395	0,54	0,66	
204	LwK 4.8	21,05	0,529	0,72	0,89	
206	LwK 4.8	20,00	-0,525	-0,71	-0,88	
207	LwK 4.8	21,20	0,675	0,92	1,13	
208	LwK 4.8	20,90	0,375	0,51	0,63	
209	LwK 4.8	19,66	-0,865	-1,17	-1,45	
210	LwK 4.8	20,00	-0,525	-0,71	-0,88	
211	LwK 4.8	19,80	-0,725	-0,98	-1,21	
212	LwK 4.8	20,58	0,055	0,07	0,09	
214	LwK 4.8	21,00	0,475	0,64	0,80	
215	LwK 4.8	20,65	0,125	0,17	0,21	
216	LwK 4.8	19,72	-0,805	-1,09	-1,35	
217	LwK 4.8	20,56	0,035	0,05	0,06	
218	LwK 4.8	20,92	0,395	0,54	0,66	
220	LwK 4.8	22,80	2,275	3,09	3,81	
221	LwK 4.8	22,41	1,885	2,56	3,16	
222	LwK 4.8	21,36	0,835	1,13	1,40	
223	LwK 4.8	21,10	0,575	0,78	0,96	
224	LwK 4.8	21,34	0,815	1,11	1,36	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
225	LwK 4.8	21,14	0,615	0,83	1,03	
226	LwK 4.8	20,10	-0,425	-0,58	-0,71	
227	LwK 4.8	22,19	1,665	2,26	2,79	
228	LwK 4.8	21,59	1,065	1,45	1,78	
229	LwK 4.8	20,27	-0,255	-0,35	-0,43	
232	LwK 4.8	19,73	-0,795	-1,08	-1,33	
234	LwK 4.8	21,40	0,875	1,19	1,47	
235	LwK 4.8	21,90	1,375	1,87	2,30	
236	LwK 4.8	20,90	0,375	0,51	0,63	
237	LwK 4.8	21,70	1,175	1,59	1,97	
240	LwK 4.8	22,36	1,835	2,49	3,07	
241	LwK 4.8	21,00	0,475	0,64	0,80	
242	LwK 4.8	20,36	-0,165	-0,22	-0,28	
243	LwK 4.8	22,30	1,775	2,41	2,97	
244	LwK 4.8	20,97	0,445	0,60	0,75	
245	LwK 4.8	21,09	0,565	0,77	0,95	
246	LwK 4.8	21,80	1,275	1,73	2,14	
247	LwK 4.8	20,40	-0,125	-0,17	-0,21	
248	LwK 4.8	20,81	0,285	0,39	0,48	
249	LwK 4.8	21,10	0,575	0,78	0,96	
250	LwK 4.8	20,56	0,035	0,05	0,06	
251	LwK 4.8	19,56	-0,965	-1,31	-1,62	
252	LwK 4.8	21,68	1,155	1,57	1,93	
254	LwK 4.8	22,10	1,575	2,14	2,64	
255	LwK 4.8	20,30	-0,225	-0,31	-0,38	
256	LwK 4.8	21,50	0,975	1,32	1,63	
257	LwK 4.8	21,32	0,795	1,08	1,33	
258	LwK 4.8	20,65	0,125	0,17	0,21	
259	LwK 4.8	24,12	3,595	4,88	6,02	(**)
260	LwK 4.8	20,80	0,275	0,37	0,46	
261	LwK 4.8	20,70	0,175	0,24	0,29	
262	LwK 4.8	22,50	1,975	2,68	3,31	
263	LwK 4.8	20,60	0,075	0,10	0,13	
264	LwK 4.8	20,90	0,375	0,51	0,63	
265	LwK 4.8	19,76	-0,765	-1,04	-1,28	
266	LwK 4.8	20,29	-0,235	-0,32	-0,39	
267	LwK 4.8	21,04	0,515	0,70	0,86	
268	LwK 4.8	21,60	1,075	1,46	1,80	
269	LwK 4.8	21,16	0,635	0,86	1,06	
270	LwK 4.8	20,30	-0,225	-0,31	-0,38	
271	LwK 4.8	21,07	0,545	0,74	0,91	
272	LwK 4.8	21,40	0,875	1,19	1,47	
273	LwK 4.8	21,01	0,485	0,66	0,81	
274	LwK 4.8	20,95	0,425	0,58	0,71	
275	LwK 4.8	21,90	1,375	1,87	2,30	
276	LwK 4.8	21,10	0,575	0,78	0,96	
277	LwK 4.8	18,46	-2,065	-2,80	-3,46	
278	LwK 4.8	19,45	-1,075	-1,46	-1,80	
279	LwK 4.8	19,45	-1,075	-1,46	-1,80	
280	LwK 4.8	19,80	-0,725	-0,98	-1,21	
281	LwK 4.8	19,68	-0,845	-1,15	-1,42	
282	LwK 4.8	19,68	-0,845	-1,15	-1,42	
283	LwK 4.8	21,20	0,675	0,92	1,13	
319	LwK 4.8	19,50	-1,025	-1,39	-1,72	
320	LwK 4.8	20,56	0,035	0,05	0,06	
336	LwK 4.8	21,02	0,495	0,67	0,83	
337	LwK 4.8	21,70	1,175	1,59	1,97	
349	LwK 4.8	19,60	-0,925	-1,26	-1,55	
364	LwK 4.8	21,00	0,475	0,64	0,80	
368	LwK 4.8	21,45	0,925	1,26	1,55	

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

6.8.5 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker(S)

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	20,37	-0,820	-1,08	-1,33	
202	LwK 4.8	20,86	-0,330	-0,44	-0,54	
203	LwK 4.8	21,38	0,190	0,25	0,31	
204	LwK 4.8	20,91	-0,275	-0,36	-0,45	
205	LwK 4.8	19,87	-1,320	-1,74	-2,15	
206	LwK 4.8	20,00	-1,190	-1,57	-1,93	
207	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
208	LwK 4.8	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
209	LwK 4.8	19,66	-1,530	-2,02	-2,49	
210	LwK 4.8	20,00	-1,190	-1,57	-1,93	
211	LwK 4.8	20,69	-0,500	-0,66	-0,81	
212	LwK 4.8	20,75	-0,440	-0,58	-0,72	
214	LwK 4.8	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
215	LwK 4.8	20,63	-0,560	-0,74	-0,91	
216	LwK 4.8	18,46	-2,730	-3,61	-4,44	
217	LwK 4.8	18,95	-2,240	-2,96	-3,64	
218	LwK 4.8	20,77	-0,420	-0,55	-0,68	
219	LwK 4.8	22,20	1,010	1,33	1,64	
220	LwK 4.8	20,84	-0,350	-0,46	-0,57	
221	LwK 4.8	20,05	-1,140	-1,51	-1,85	
222	LwK 4.8	22,40	1,210	1,60	1,97	
223	LwK 4.8	21,20	0,010	0,01	0,02	
224	LwK 4.8	20,84	-0,350	-0,46	-0,57	
225	LwK 4.8	21,20	0,010	0,01	0,02	
226	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
227	LwK 4.8	20,69	-0,500	-0,66	-0,81	
228	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
229	LwK 4.8	20,81	-0,380	-0,50	-0,62	
231	LwK 4.8	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
232	LwK 4.8	19,73	-1,460	-1,93	-2,37	
234	LwK 4.8	21,11	-0,080	-0,11	-0,13	
235	LwK 4.8	21,50	0,310	0,41	0,50	
236	LwK 4.8	20,24	-0,950	-1,25	-1,54	
237	LwK 4.8	21,60	0,410	0,54	0,67	
240	LwK 4.8	20,82	-0,370	-0,49	-0,60	
241	LwK 4.8	20,00	-1,190	-1,57	-1,93	
242	LwK 4.8	20,22	-0,970	-1,28	-1,58	
243	LwK 4.8	21,56	0,370	0,49	0,60	
244	LwK 4.8	22,31	1,120	1,48	1,82	
245	LwK 4.8	20,73	-0,460	-0,61	-0,75	
246	LwK 4.8	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	
247	LwK 4.8	20,91	-0,280	-0,37	-0,46	
249	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
250	LwK 4.8	20,48	-0,710	-0,94	-1,15	
251	LwK 4.8	19,56	-1,630	-2,15	-2,65	
252	LwK 4.8	21,88	0,690	0,91	1,12	
254	LwK 4.8	20,90	-0,290	-0,38	-0,47	
256	LwK 4.8	20,20	-0,990	-1,31	-1,61	
257	LwK 4.8	20,78	-0,410	-0,54	-0,67	
258	LwK 4.8	18,86	-2,330	-3,08	-3,79	
259	LwK 4.8	23,91	2,720	3,59	4,42	
260	LwK 4.8	20,50	-0,690	-0,91	-1,12	
261	LwK 4.8	21,20	0,010	0,01	0,02	
262	LwK 4.8	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
263	LwK 4.8	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
264	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
265	LwK 4.8	20,64	-0,550	-0,73	-0,89	
266	LwK 4.8	20,74	-0,450	-0,59	-0,73	
267	LwK 4.8	20,25	-0,940	-1,24	-1,53	
268	LwK 4.8	20,60	-0,590	-0,78	-0,96	
270	LwK 4.8	20,30	-0,890	-1,18	-1,45	
271	LwK 4.8	20,27	-0,920	-1,22	-1,50	
272	LwK 4.8	21,00	-0,190	-0,25	-0,31	
273	LwK 4.8	21,39	0,200	0,26	0,33	
275	LwK 4.8	20,80	-0,390	-0,52	-0,63	

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

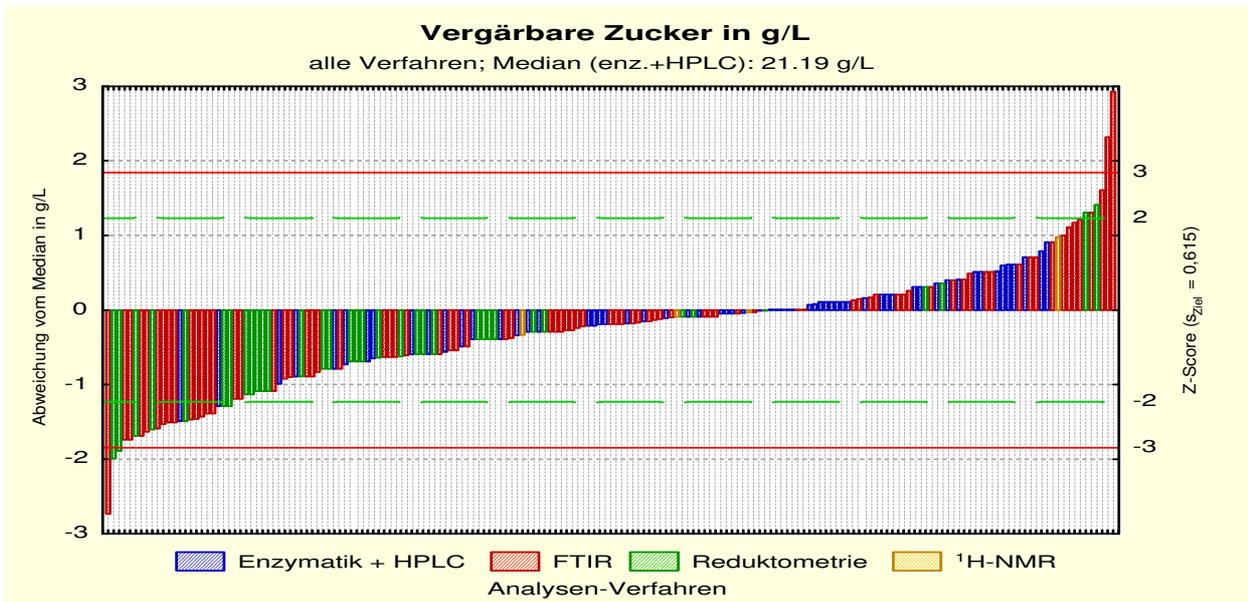
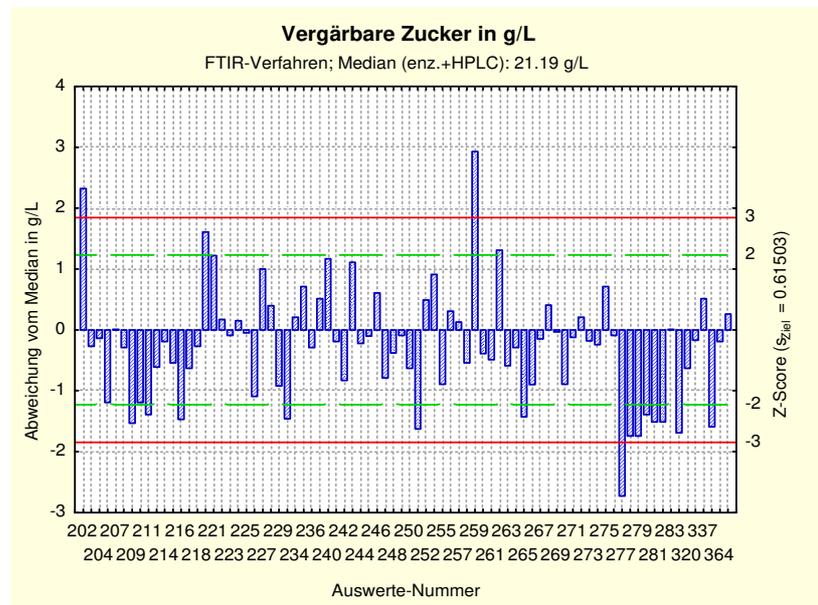
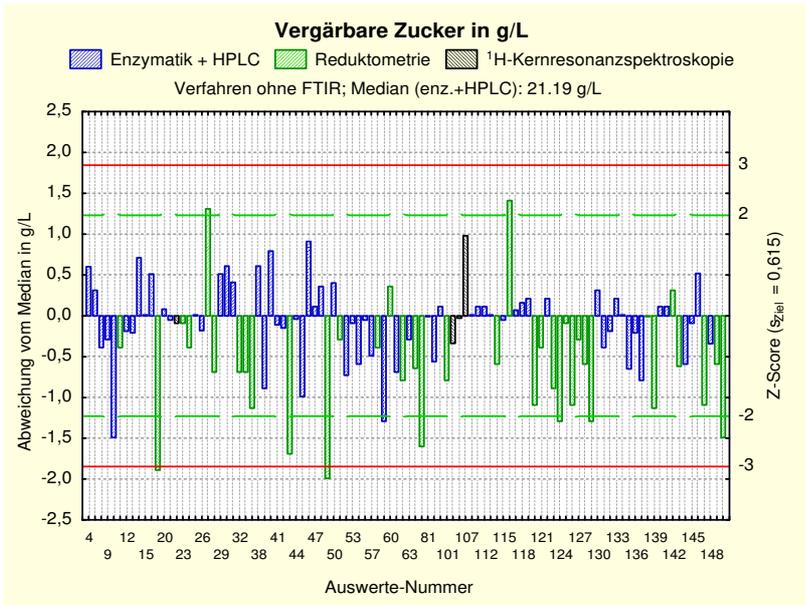
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 4.8	19,40	-1,790	-2,36	-2,91	
277	LwK 4.8	18,46	-2,730	-3,61	-4,44	
278	LwK 4.8	21,76	0,570	0,75	0,93	
279	LwK 4.8	22,56	1,370	1,81	2,23	
280	LwK 4.8	19,90	-1,290	-1,70	-2,10	
281	LwK 4.8	19,69	-1,500	-1,98	-2,44	
282	LwK 4.8	19,83	-1,360	-1,80	-2,21	
283	LwK 4.8	20,40	-0,790	-1,04	-1,28	
312	LwK 4.8	19,53	-1,660	-2,19	-2,70	
319	LwK 4.8	20,70	-0,490	-0,65	-0,80	
320	LwK 4.8	20,48	-0,710	-0,94	-1,15	
323	LwK 4.8	21,30	0,110	0,15	0,18	
336	LwK 4.8	22,00	0,810	1,07	1,32	
337	LwK 4.8	21,80	0,610	0,81	0,99	
343	LwK 4.8	21,82	0,630	0,83	1,02	
349	LwK 4.8	21,10	-0,090	-0,12	-0,15	
364	LwK 4.8	20,70	-0,490	-0,65	-0,80	

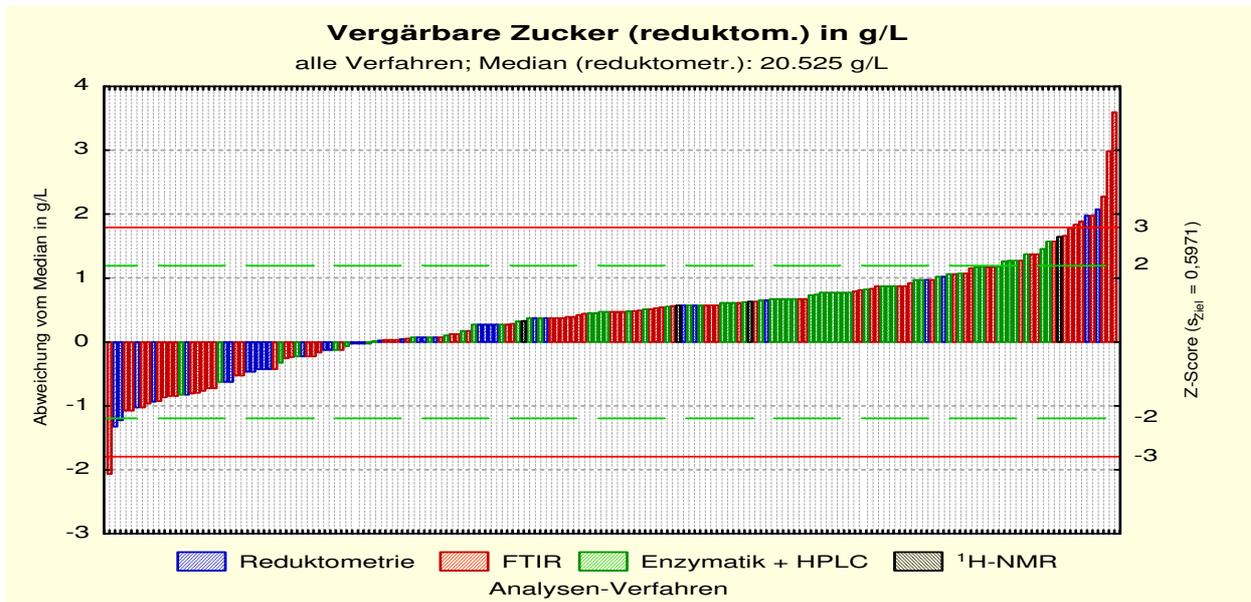
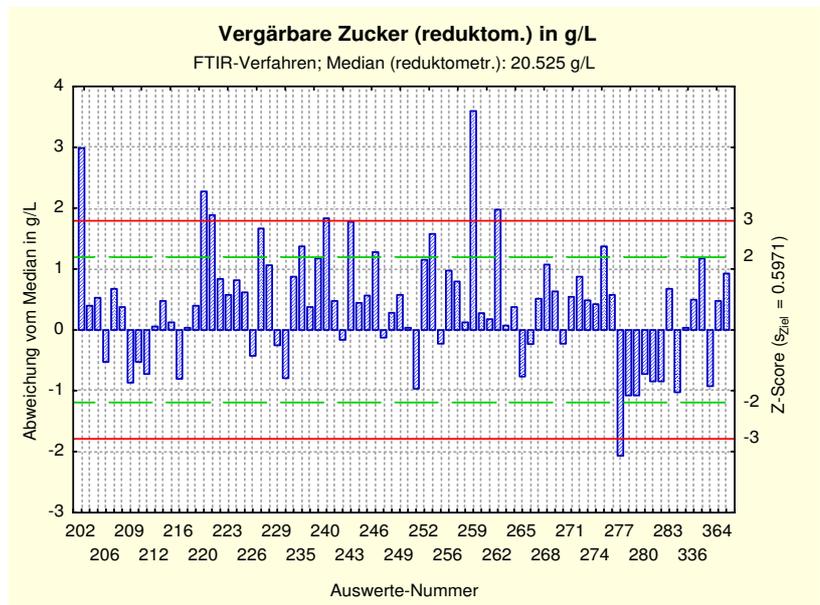
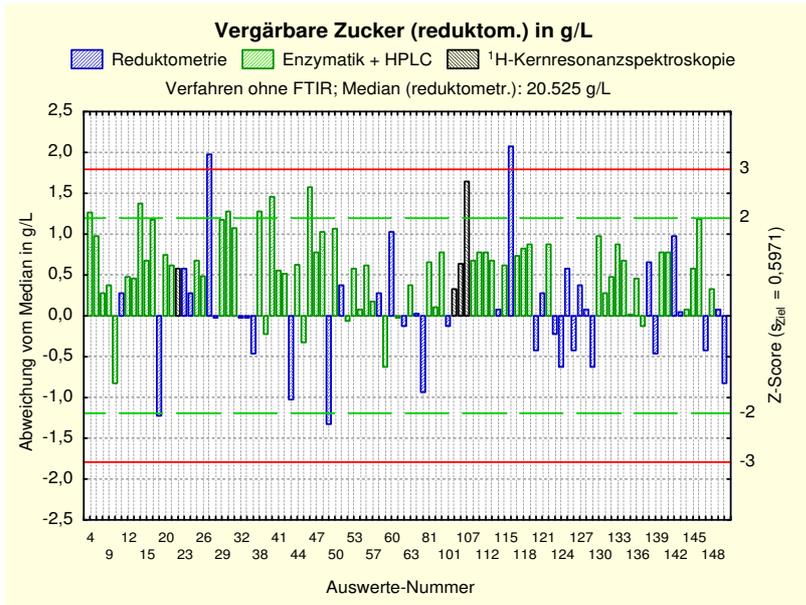
6.8.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

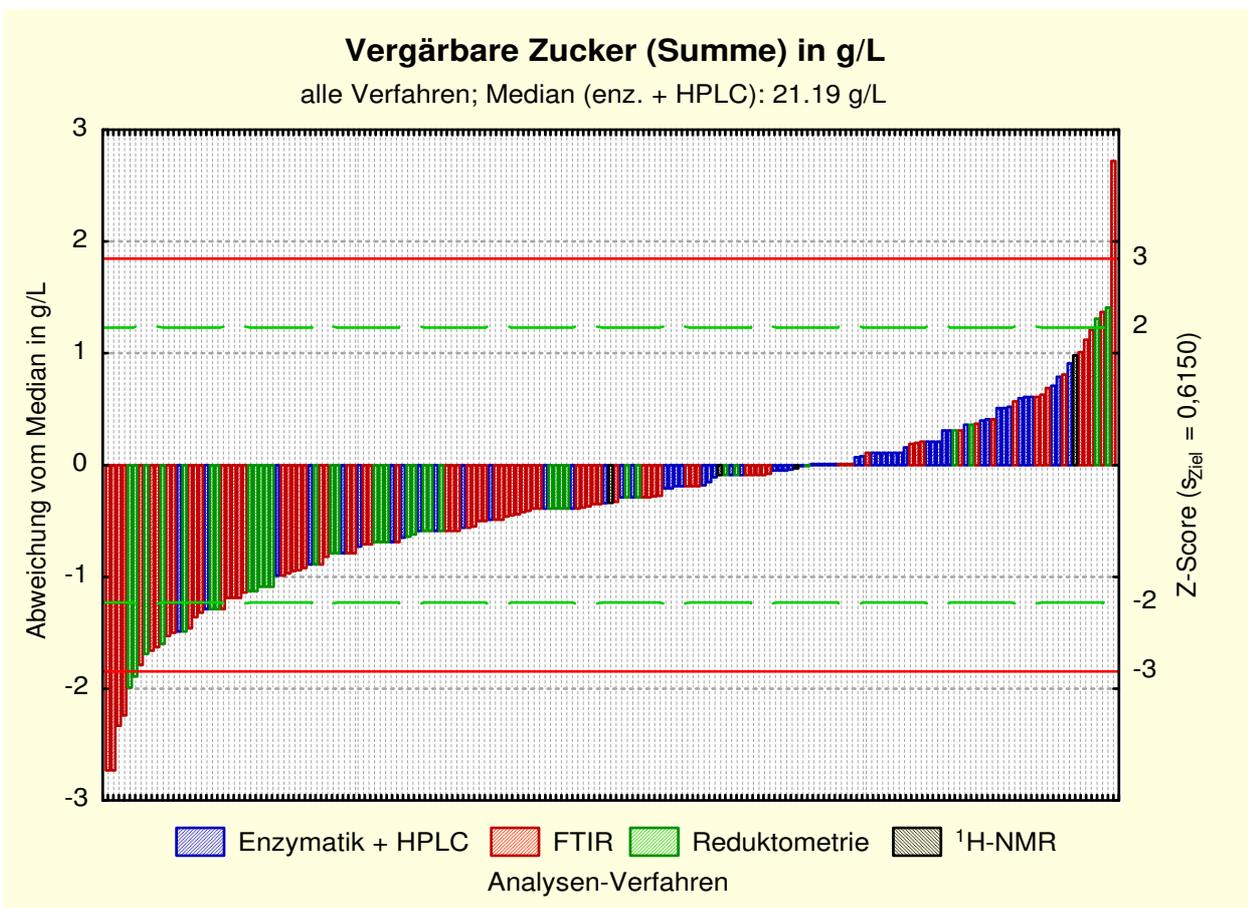
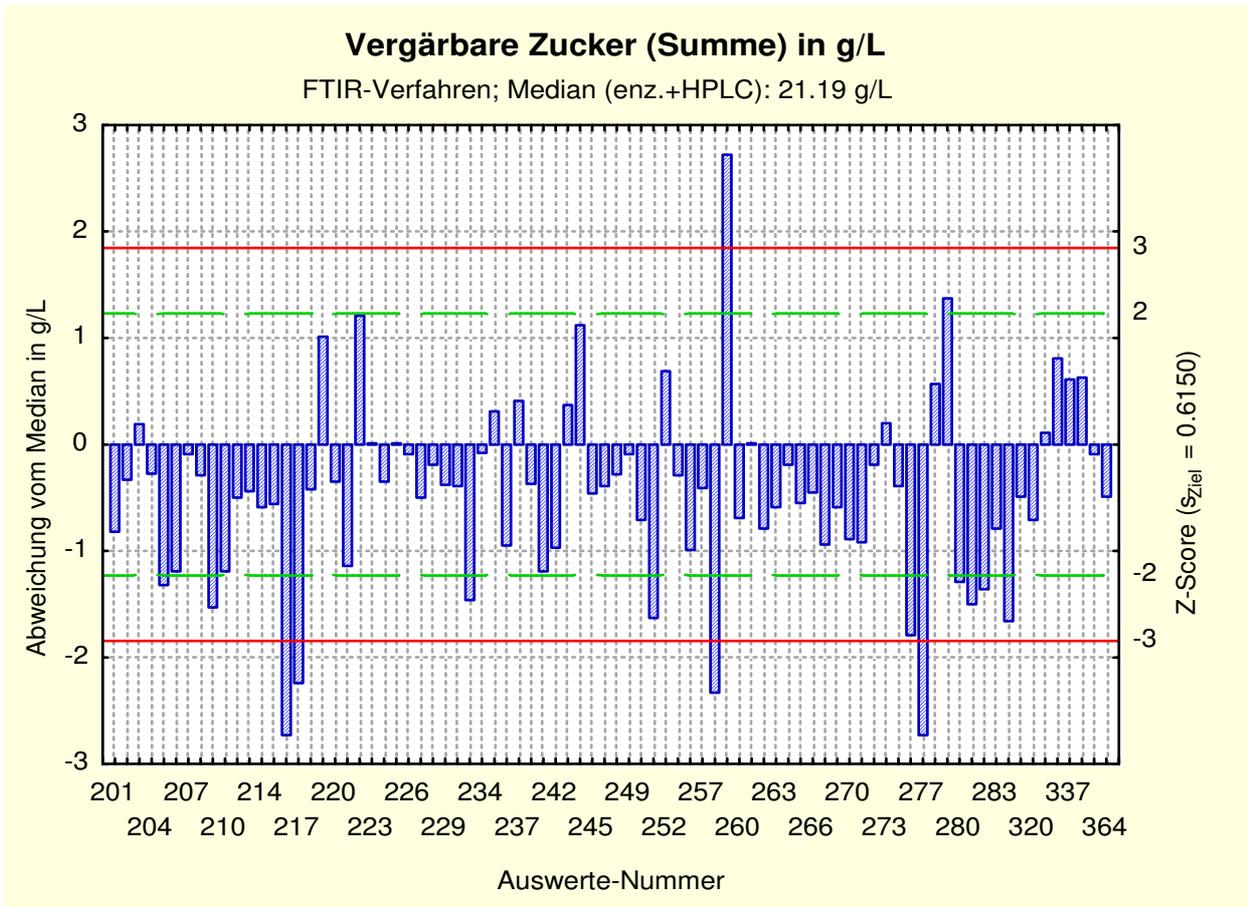
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten	reduktometrisch alle Daten
Gültige Werte	62	36
Minimalwert	19,70	19,20
Mittelwert	21,128	20,543
Median	21,190	20,525
Maximalwert	22,10	22,60
Standardabweichung (s_L)	0,484	0,748
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,062	0,125
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,757	0,737
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,615	0,597
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,584)	0,584
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,64	1,02
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,79	1,25
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,83)	(1,02)
Quotient (u_M/s_H)	0,08	0,17
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,10	0,21
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,11)	(0,21)

6.8.7 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren- Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	2	20,700	0,160
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	4	20,330	0,584
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	30	20,508	0,706
	reduktometrische Verfahren	36	20,497	0,660
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	41	21,168	0,502
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	21	21,127	0,371
	Enzymatik und HPLC	62	21,150	0,458
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis "wie mitgeteilt")	81	20,904	0,882
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis Summe FTIR-Glucose + FTIR-Fructose)	83	20,730	0,745
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	20,956	1,019







6.9 Glucose [g/L]

6.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enzymat. autom.	6,50	0,230	0,86	1,08	
06	enzymat. autom.	6,35	0,085	0,32	0,40	
09	enzymat. Hand	6,20	-0,065	-0,24	-0,31	
10	enzymat. autom.	6,02	-0,248	-0,92	-1,17	
11	enzymat. autom.	6,46	0,195	0,73	0,92	
12	HPLC	6,10	-0,165	-0,61	-0,78	
13	HPLC	6,19	-0,073	-0,27	-0,34	
14	enzymat. autom.	6,36	0,095	0,35	0,45	
15	enzymat. autom.	6,33	0,065	0,24	0,31	
18	HPLC	6,05	-0,215	-0,80	-1,01	
20	HPLC	6,27	0,005	0,02	0,02	
21	HPLC	6,17	-0,095	-0,35	-0,45	
22	NMR	6,50	0,235	0,87	1,11	
25	enzymat. autom.	6,17	-0,095	-0,35	-0,45	
26	HPLC	6,45	0,180	0,67	0,85	
29	enzymat. autom.	6,21	-0,055	-0,20	-0,26	
30	HPLC	6,36	0,095	0,35	0,45	
31	enzymat. autom.	6,40	0,136	0,51	0,64	
38	enzymat. autom.	6,37	0,105	0,39	0,50	
39	HPLC	6,05	-0,215	-0,80	-1,01	
40	enzymat. autom.	6,31	0,045	0,17	0,21	
41	enzymat. autom.	6,31	0,045	0,17	0,21	
42	HPLC	6,12	-0,149	-0,55	-0,70	
44	enzymat. autom.	6,18	-0,085	-0,32	-0,40	
45	enzymat. autom.	5,89	-0,375	-1,39	-1,77	
47	enzymat. autom.	6,35	0,085	0,32	0,40	
48	enzymat. autom.	6,35	0,085	0,32	0,40	
50	HPLC	6,21	-0,055	-0,20	-0,26	
52	enzymat. autom.	6,19	-0,075	-0,28	-0,35	
53	enzymat. autom.	6,20	-0,065	-0,24	-0,31	
56	enzymat. autom.	6,17	-0,095	-0,35	-0,45	
57	enzymat. autom.	6,17	-0,095	-0,35	-0,45	
58	enzymat. autom.	5,40	-0,865	-3,22	-4,08	
59	HPLC	5,90	-0,365	-1,36	-1,72	
61	HPLC	6,20	-0,065	-0,24	-0,31	
63	enzymat. autom.	6,50	0,235	0,87	1,11	
64	enzymat. Hand	6,24	-0,025	-0,09	-0,12	
69	enzymat. autom.	6,47	0,207	0,77	0,98	
81	enzymat. Hand	6,30	0,035	0,13	0,17	
88	enzymat. autom.	6,50	0,235	0,87	1,11	
92	enzymat. autom.	5,94	-0,325	-1,21	-1,53	
94	HPLC	6,33	0,065	0,24	0,31	
101	enzymat. Hand	6,39	0,128	0,48	0,60	
104	NMR	6,66	0,394	1,47	1,86	
105	NMR	6,79	0,525	1,95	2,48	
106	NMR	6,23	-0,031	-0,11	-0,14	
107	NMR	6,96	0,699	2,60	3,30	
110	enzymat. autom.	6,30	0,035	0,13	0,17	
111	HPLC	6,20	-0,065	-0,24	-0,31	
112	HPLC	6,30	0,035	0,13	0,17	
115	HPLC	6,12	-0,145	-0,54	-0,68	
117	enzymat. autom.	6,30	0,035	0,13	0,17	
118	enzymat. autom.	6,26	-0,005	-0,02	-0,02	
119	enzymat. autom.	6,38	0,115	0,43	0,54	
122	HPLC	6,30	0,035	0,13	0,17	
130	enzymat. autom.	6,50	0,235	0,87	1,11	
132	HPLC	6,10	-0,165	-0,61	-0,78	
133	enzymat. autom.	6,30	0,035	0,13	0,17	
134	enzymat. autom.	6,29	0,025	0,09	0,12	
135	enzymat. autom.	6,14	-0,125	-0,46	-0,59	
136	HPLC	6,16	-0,105	-0,39	-0,50	
140	HPLC	6,30	0,035	0,13	0,17	
141	enzymat. autom.	6,33	0,065	0,24	0,31	
144	enzymat. autom.	6,10	-0,165	-0,61	-0,78	
148	HPLC	6,06	-0,205	-0,76	-0,97	

6.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,78	-0,485	-1,80	-1,19	
202	FTIR	5,95	-0,315	-1,17	-0,77	
203	FTIR	6,48	0,215	0,80	0,53	
204	FTIR	5,96	-0,307	-1,14	-0,75	
205	FTIR	5,68	-0,585	-2,18	-1,43	
206	FTIR	5,98	-0,285	-1,06	-0,70	
207	FTIR	6,70	0,435	1,62	1,07	
208	FTIR	6,20	-0,065	-0,24	-0,16	
209	FTIR	5,09	-1,175	-4,37	-2,88	
210	FTIR	5,90	-0,365	-1,36	-0,89	
211	FTIR	5,37	-0,895	-3,33	-2,19	
212	FTIR	5,96	-0,305	-1,13	-0,75	
214	FTIR	6,20	-0,065	-0,24	-0,16	
215	FTIR	5,72	-0,545	-2,03	-1,34	
216	FTIR	5,17	-1,095	-4,07	-2,68	
217	FTIR	5,23	-1,035	-3,85	-2,54	
218	FTIR	5,55	-0,715	-2,66	-1,75	
219	FTIR	7,90	1,635	6,08	4,01	
220	FTIR	5,72	-0,545	-2,03	-1,34	
221	FTIR	5,81	-0,455	-1,69	-1,12	
222	FTIR	7,10	0,835	3,11	2,05	
223	FTIR	6,20	-0,065	-0,24	-0,16	
224	FTIR	6,08	-0,185	-0,69	-0,45	
225	FTIR	5,78	-0,485	-1,80	-1,19	
226	FTIR	6,50	0,235	0,87	0,58	
227	FTIR	6,14	-0,125	-0,46	-0,31	
228	FTIR	7,15	0,885	3,29	2,17	
229	FTIR	6,16	-0,105	-0,39	-0,26	
231	FTIR	5,70	-0,565	-2,10	-1,38	
232	FTIR	5,75	-0,515	-1,92	-1,26	
234	FTIR	6,10	-0,165	-0,61	-0,40	
235	FTIR	6,30	0,035	0,13	0,09	
236	FTIR	5,93	-0,335	-1,25	-0,82	
237	FTIR	7,80	1,535	5,71	3,76	
240	FTIR	5,82	-0,445	-1,66	-1,09	
241	FTIR	6,20	-0,065	-0,24	-0,16	
242	FTIR	5,75	-0,515	-1,92	-1,26	
243	FTIR	6,81	0,545	2,03	1,34	
244	FTIR	6,74	0,475	1,77	1,16	
245	FTIR	5,75	-0,515	-1,92	-1,26	
246	FTIR	5,60	-0,665	-2,47	-1,63	
247	FTIR	5,86	-0,405	-1,51	-0,99	
249	FTIR	6,30	0,035	0,13	0,09	
250	FTIR	5,56	-0,705	-2,62	-1,73	
251	FTIR	5,72	-0,545	-2,03	-1,34	
252	FTIR	6,73	0,465	1,73	1,14	
254	FTIR	6,10	-0,165	-0,61	-0,40	
256	FTIR	6,00	-0,265	-0,99	-0,65	
257	FTIR	5,83	-0,435	-1,62	-1,07	
258	FTIR	4,87	-1,395	-5,19	-3,42	
259	FTIR	8,96	2,695	10,02	6,61	(**)
260	FTIR	6,40	0,135	0,50	0,33	
261	FTIR	6,40	0,135	0,50	0,33	
262	FTIR	6,70	0,435	1,62	1,07	
263	FTIR	6,50	0,235	0,87	0,58	
264	FTIR	5,90	-0,365	-1,36	-0,89	
265	FTIR	6,37	0,105	0,39	0,26	
266	FTIR	5,80	-0,465	-1,73	-1,14	
267	FTIR	6,23	-0,035	-0,13	-0,09	
268	FTIR	5,85	-0,415	-1,54	-1,02	
270	FTIR	6,30	0,035	0,13	0,09	
271	FTIR	5,63	-0,635	-2,36	-1,56	
272	FTIR	5,40	-0,865	-3,22	-2,12	
273	FTIR	6,04	-0,225	-0,84	-0,55	
275	FTIR	5,60	-0,665	-2,47	-1,63	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

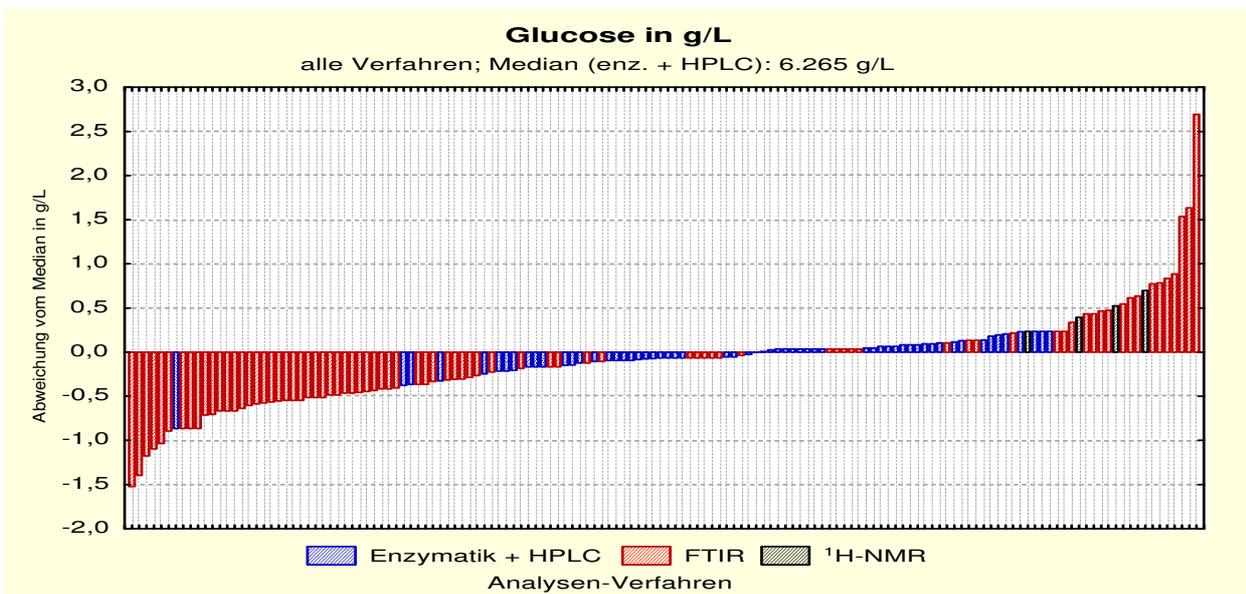
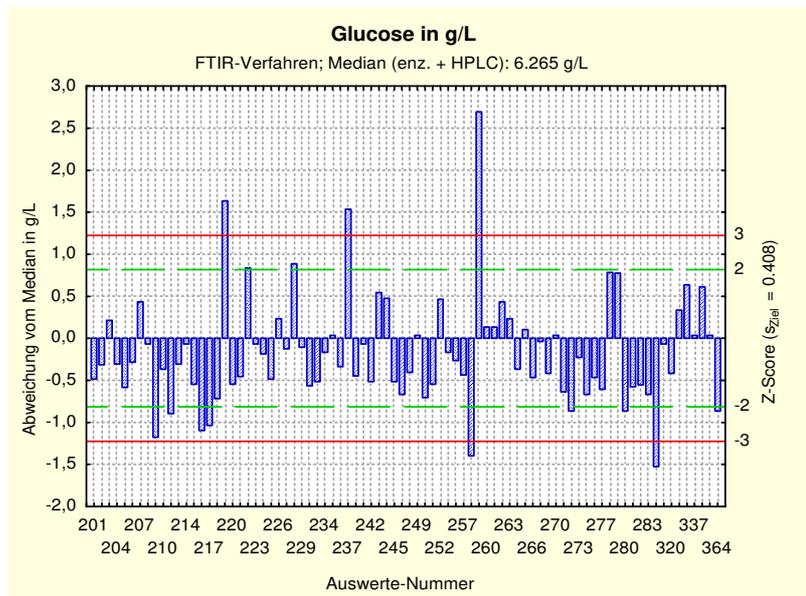
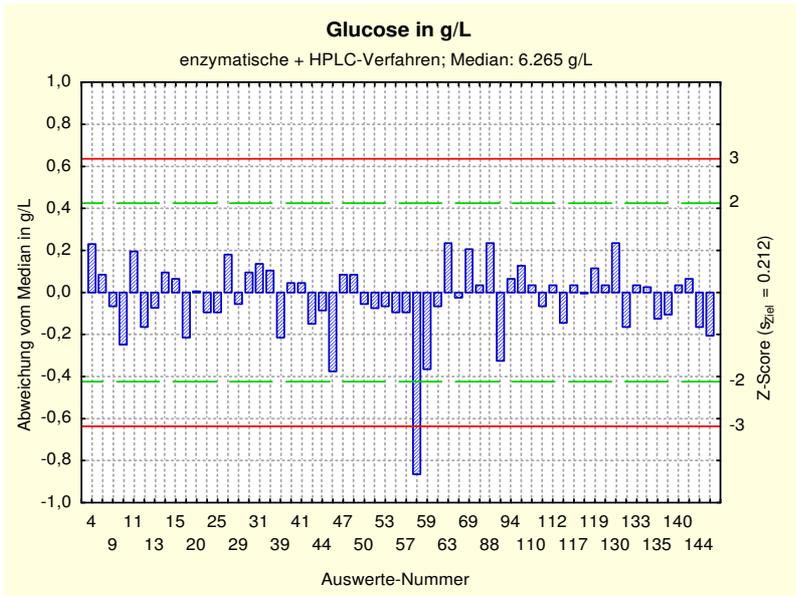
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	5,80	-0,465	-1,73	-1,14	
277	FTIR	5,66	-0,605	-2,25	-1,48	
278	FTIR	7,05	0,785	2,92	1,92	
279	FTIR	7,04	0,775	2,88	1,90	
280	FTIR	5,40	-0,865	-3,22	-2,12	
281	FTIR	5,69	-0,575	-2,14	-1,41	
282	FTIR	5,71	-0,555	-2,06	-1,36	
283	FTIR	5,60	-0,665	-2,47	-1,63	
312	FTIR	4,74	-1,525	-5,67	-3,74	
319	FTIR	6,20	-0,065	-0,24	-0,16	
320	FTIR	5,85	-0,415	-1,54	-1,02	
323	FTIR	6,60	0,335	1,25	0,82	
336	FTIR	6,90	0,635	2,36	1,56	
337	FTIR	6,30	0,035	0,13	0,09	
343	FTIR	6,88	0,615	2,29	1,51	
349	FTIR	6,30	0,035	0,13	0,09	
364	FTIR	5,40	-0,865	-3,22	-2,12	

6.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	60
Minimalwert	5,40
Mittelwert	6,234
Median	6,265
Maximalwert	6,50
Standardabweichung (s_L)	0,182
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,023
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,269
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,212
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,408
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,68
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,86
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,45
Quotient (u_M/s_H)	0,09
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,06

6.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie			
	OIV-MA-AS311-03	21	6,189	0,126
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiertes Verfahren			
	OIV-MA-AS311-02	35	6,284	0,157
enzymat. Hand	enzymatisch manuell			
	OIV-MA-AS311-02	4	6,280	0,089
	herkömmliche Verfahren	60	6,249	0,152
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	6,042	0,523
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	6,644	0,289



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enzymat. autom.	15,30	0,373	0,66	0,84	
06	enzymat. autom.	15,20	0,278	0,49	0,62	
09	enzymat. Hand	14,70	-0,222	-0,40	-0,50	
10	enzymat. autom.	13,70	-1,222	-2,17	-2,74	
11	enzymat. autom.	14,16	-0,762	-1,36	-1,71	
12	HPLC	14,90	-0,022	-0,04	-0,05	
13	HPLC	14,79	-0,128	-0,23	-0,29	
14	enzymat. autom.	15,55	0,628	1,12	1,41	
15	enzymat. autom.	14,83	-0,092	-0,16	-0,21	
18	HPLC	15,70	0,778	1,38	1,75	
20	HPLC	15,00	0,078	0,14	0,17	
21	HPLC	14,97	0,048	0,09	0,11	
22	NMR	14,56	-0,362	-0,64	-0,81	
25	enzymat. autom.	15,05	0,128	0,23	0,29	
26	HPLC	14,56	-0,360	-0,64	-0,81	
29	enzymat. autom.	15,23	0,308	0,55	0,69	
30	HPLC	15,43	0,508	0,90	1,14	
31	enzymat. autom.	15,22	0,300	0,53	0,67	
38	enzymat. autom.	15,42	0,498	0,89	1,12	
39	HPLC	14,20	-0,722	-1,28	-1,62	
40	enzymat. autom.	14,67	-0,252	-0,45	-0,57	
41	enzymat. autom.	14,77	-0,152	-0,27	-0,34	
42	HPLC	14,92	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat. autom.	14,97	0,048	0,09	0,11	
45	enzymat. autom.	14,30	-0,622	-1,11	-1,40	
47	enzymat. autom.	14,95	0,028	0,05	0,06	
48	enzymat. autom.	14,90	-0,022	-0,04	-0,05	
50	HPLC	15,37	0,448	0,80	1,00	
52	enzymat. autom.	14,35	-0,572	-1,02	-1,28	
53	enzymat. autom.	14,89	-0,032	-0,06	-0,07	
56	enzymat. autom.	14,97	0,048	0,09	0,11	
57	enzymat. autom.	14,51	-0,412	-0,73	-0,92	
58	enzymat. autom.	15,33	0,408	0,73	0,92	
59	HPLC	14,00	-0,922	-1,64	-2,07	
61	HPLC	14,30	-0,622	-1,11	-1,40	
63	enzymat. autom.	14,40	-0,522	-0,93	-1,17	
64	enzymat. Hand	14,44	-0,482	-0,86	-1,08	
69	enzymat. autom.	15,05	0,129	0,23	0,29	
81	enzymat. Hand	14,89	-0,032	-0,06	-0,07	
88	enzymat. autom.	15,17	0,248	0,44	0,56	
92	enzymat. autom.	14,69	-0,232	-0,41	-0,52	
94	HPLC	14,95	0,028	0,05	0,06	
101	enzymat. Hand	14,81	-0,112	-0,20	-0,25	
104	NMR	14,15	-0,767	-1,37	-1,72	
105	NMR	14,37	-0,552	-0,98	-1,24	
106	NMR	13,20	-1,721	-3,06	-3,86	
107	NMR	15,21	0,285	0,51	0,64	
110	enzymat. autom.	14,90	-0,022	-0,04	-0,05	
111	HPLC	15,00	0,078	0,14	0,17	
115	HPLC	15,02	0,098	0,17	0,22	
117	enzymat. autom.	14,96	0,038	0,07	0,09	
118	enzymat. autom.	15,09	0,168	0,30	0,38	
119	enzymat. autom.	14,96	0,038	0,07	0,09	
122	HPLC	15,10	0,178	0,32	0,40	
130	enzymat. autom.	15,00	0,078	0,14	0,17	
132	HPLC	14,90	-0,022	-0,04	-0,05	
133	enzymat. autom.	15,10	0,178	0,32	0,40	
134	enzymat. autom.	14,88	-0,042	-0,07	-0,09	
135	enzymat. autom.	14,40	-0,522	-0,93	-1,17	
136	HPLC	14,82	-0,102	-0,18	-0,23	
140	HPLC	15,00	0,078	0,14	0,17	
141	enzymat. autom.	14,99	0,068	0,12	0,15	
144	enzymat. autom.	14,45	-0,472	-0,84	-1,06	
148	HPLC	14,79	-0,132	-0,23	-0,30	

6.10.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	14,59	-0,332	-0,59	-0,74	
202	FTIR	14,91	-0,012	-0,02	-0,03	
203	FTIR	14,90	-0,022	-0,04	-0,05	
204	FTIR	14,96	0,035	0,06	0,08	
205	FTIR	14,19	-0,732	-1,30	-1,64	
206	FTIR	14,02	-0,902	-1,61	-2,02	
207	FTIR	14,40	-0,522	-0,93	-1,17	
208	FTIR	14,70	-0,222	-0,40	-0,50	
209	FTIR	14,57	-0,352	-0,63	-0,79	
210	FTIR	14,10	-0,822	-1,46	-1,84	
211	FTIR	15,32	0,398	0,71	0,89	
212	FTIR	14,79	-0,132	-0,23	-0,30	
214	FTIR	14,40	-0,522	-0,93	-1,17	
215	FTIR	14,91	-0,012	-0,02	-0,03	
216	FTIR	13,29	-1,632	-2,90	-3,66	
217	FTIR	13,72	-1,202	-2,14	-2,70	
218	FTIR	15,22	0,298	0,53	0,67	
219	FTIR	14,30	-0,622	-1,11	-1,40	
220	FTIR	15,12	0,198	0,35	0,44	
221	FTIR	14,24	-0,682	-1,21	-1,53	
222	FTIR	15,30	0,378	0,67	0,85	
223	FTIR	15,00	0,078	0,14	0,17	
224	FTIR	14,76	-0,162	-0,29	-0,36	
225	FTIR	15,42	0,498	0,89	1,12	
226	FTIR	14,60	-0,322	-0,57	-0,72	
227	FTIR	14,55	-0,372	-0,66	-0,83	
228	FTIR	13,85	-1,072	-1,91	-2,40	
229	FTIR	14,65	-0,272	-0,48	-0,61	
231	FTIR	15,10	0,178	0,32	0,40	
232	FTIR	13,98	-0,942	-1,68	-2,11	
234	FTIR	15,01	0,088	0,16	0,20	
235	FTIR	15,20	0,278	0,49	0,62	
236	FTIR	14,31	-0,612	-1,09	-1,37	
237	FTIR	13,80	-1,122	-2,00	-2,52	
240	FTIR	15,00	0,078	0,14	0,17	
241	FTIR	13,80	-1,122	-2,00	-2,52	
242	FTIR	14,47	-0,452	-0,80	-1,01	
243	FTIR	14,75	-0,172	-0,31	-0,39	
244	FTIR	15,57	0,648	1,15	1,45	
245	FTIR	14,98	0,058	0,10	0,13	
246	FTIR	15,20	0,278	0,49	0,62	
247	FTIR	15,05	0,128	0,23	0,29	
249	FTIR	14,80	-0,122	-0,22	-0,27	
250	FTIR	14,92	-0,002	-0,00	-0,00	
251	FTIR	13,84	-1,082	-1,93	-2,43	
252	FTIR	15,15	0,228	0,41	0,51	
254	FTIR	14,80	-0,122	-0,22	-0,27	
256	FTIR	14,20	-0,722	-1,28	-1,62	
257	FTIR	14,95	0,028	0,05	0,06	
258	FTIR	13,99	-0,932	-1,66	-2,09	
259	FTIR	14,95	0,028	0,05	0,06	
260	FTIR	14,10	-0,822	-1,46	-1,84	
261	FTIR	14,80	-0,122	-0,22	-0,27	
262	FTIR	13,70	-1,222	-2,17	-2,74	
263	FTIR	14,10	-0,822	-1,46	-1,84	
264	FTIR	15,10	0,178	0,32	0,40	
265	FTIR	14,27	-0,652	-1,16	-1,46	
266	FTIR	14,94	0,018	0,03	0,04	
267	FTIR	14,02	-0,902	-1,61	-2,02	
268	FTIR	14,75	-0,172	-0,31	-0,39	
270	FTIR	14,00	-0,922	-1,64	-2,07	
271	FTIR	14,64	-0,282	-0,50	-0,63	
272	FTIR	15,60	0,678	1,21	1,52	
273	FTIR	15,35	0,428	0,76	0,96	
275	FTIR	15,20	0,278	0,49	0,62	
276	FTIR	13,60	-1,322	-2,35	-2,97	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

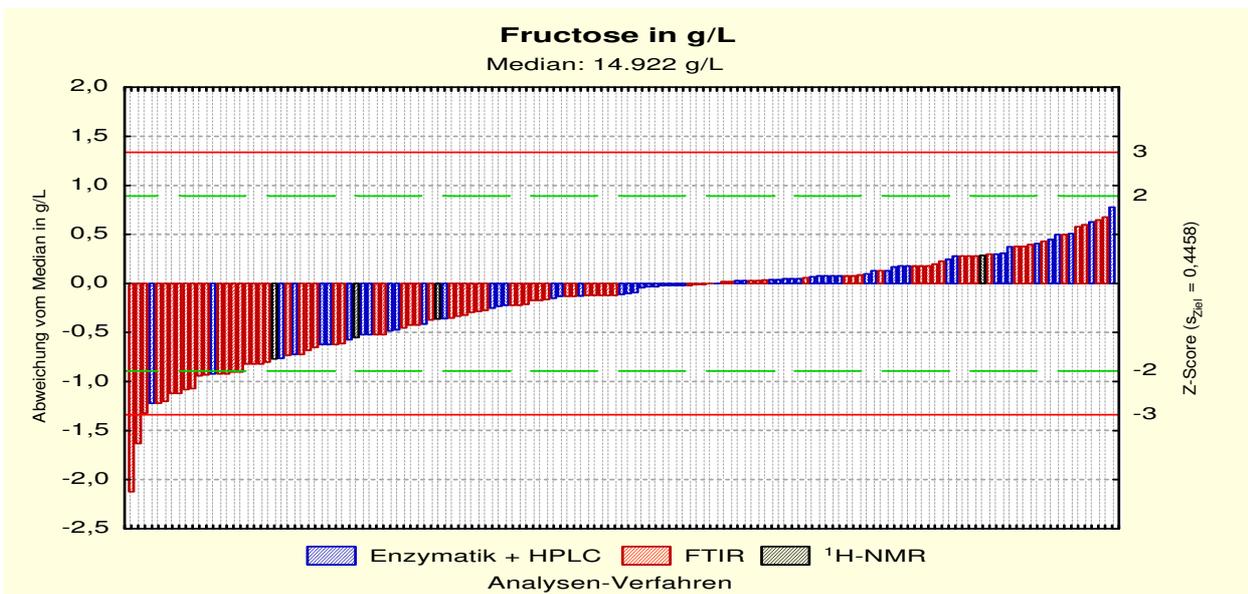
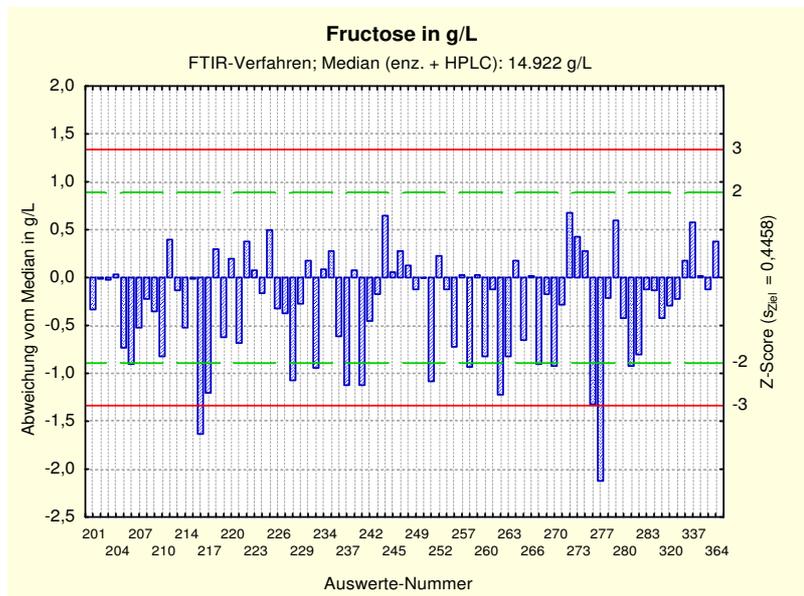
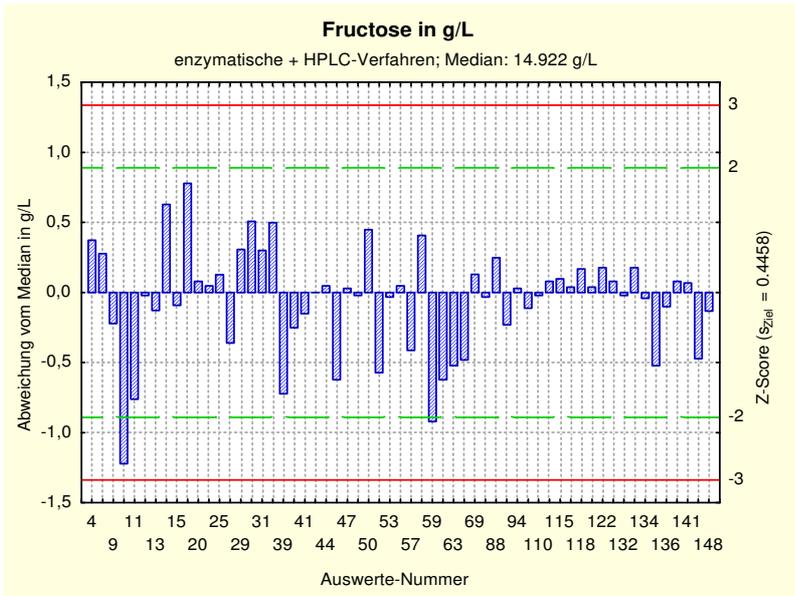
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	12,80	-2,122	-3,78	-4,76	
278	FTIR	14,71	-0,212	-0,38	-0,48	
279	FTIR	15,52	0,598	1,06	1,34	
280	FTIR	14,50	-0,422	-0,75	-0,95	
281	FTIR	14,00	-0,922	-1,64	-2,07	
282	FTIR	14,12	-0,802	-1,43	-1,80	
283	FTIR	14,80	-0,122	-0,22	-0,27	
312	FTIR	14,79	-0,132	-0,23	-0,30	
319	FTIR	14,50	-0,422	-0,75	-0,95	
320	FTIR	14,63	-0,292	-0,52	-0,66	
323	FTIR	14,70	-0,222	-0,40	-0,50	
336	FTIR	15,10	0,178	0,32	0,40	
337	FTIR	15,50	0,578	1,03	1,30	
343	FTIR	14,94	0,018	0,03	0,04	
349	FTIR	14,80	-0,122	-0,22	-0,27	
364	FTIR	15,30	0,378	0,67	0,85	

6.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	59
Minimalwert	13,70
Mittelwert	14,862
Median	14,922
Maximalwert	15,70
Standardabweichung (s_L)	0,381
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,050
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,562
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,446
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,330)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,68
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,85
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(1,15)
Quotient (u_M/s_H)	0,09
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,15)

6.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	20	14,908	0,342
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	35	14,890	0,368
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell, OIV-MA-AS311-02	4	14,720	0,201
	alle herkömmlichen Verfahren	59	14,881	0,349
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	14,649	0,569
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	14,293	0,797



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
04	enzymat. autom.	4,99	-0,03	-0,13	
06	enzymat. autom.	5,08	0,06	0,29	
07	enzymat. autom.	5,00	-0,02	-0,07	
10	enzymat. autom.	6,02	1,00	4,52	
11	enzymat. Hand	5,16	0,14	0,65	
12	HPLC	5,10	0,08	0,38	
13	HPLC	4,96	-0,06	-0,27	
20	HPLC	4,91	-0,11	-0,47	
21	HPLC	4,91	-0,11	-0,47	
22	NMR	4,90	-0,12	-0,52	
26	HPLC	5,07	0,05	0,24	
30	HPLC	5,05	0,03	0,16	
39	HPLC	4,65	-0,37	-1,64	
42	HPLC	4,97	-0,05	-0,20	
44	enzymat. autom.	5,03	0,01	0,07	
48	HPLC	4,86	-0,16	-0,71	
50	HPLC	5,13	0,11	0,52	
56	enzymat. autom.	5,04	0,02	0,11	
58	enzymat. autom.	4,93	-0,09	-0,38	
59	enzymat. autom.	5,00	-0,02	-0,07	
61	HPLC	4,70	-0,32	-1,42	
81	enzymat. Hand	5,06	0,04	0,20	
88	enzymat. autom.	5,25	0,24	1,07	
89	enzymat. Hand	5,07	0,05	0,22	
94	HPLC	4,96	-0,06	-0,25	
105	NMR	5,18	0,16	0,74	
106	NMR	4,88	-0,14	-0,62	
107	NMR	5,26	0,25	1,11	

6.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,69	-0,33	-1,46	-0,93	
202	FTIR	4,44	-0,58	-2,58	-1,65	
203	FTIR	5,02	0,00	0,02	0,01	
204	FTIR	4,99	-0,03	-0,12	-0,07	
206	FTIR	4,87	-0,15	-0,65	-0,42	
207	FTIR	5,44	0,42	1,91	1,22	
208	FTIR	5,60	0,58	2,63	1,68	
209	FTIR	5,21	0,19	0,88	0,56	
211	FTIR	5,16	0,14	0,65	0,42	
212	FTIR	5,48	0,46	2,09	1,34	
214	FTIR	4,60	-0,42	-1,86	-1,19	
215	FTIR	5,53	0,51	2,31	1,48	
216	FTIR	6,00	0,98	4,43	2,83	
217	FTIR	4,08	-0,94	-4,20	-2,69	
218	FTIR	5,35	0,33	1,51	0,96	
219	FTIR	6,10	1,08	4,88	3,12	
220	FTIR	5,19	0,17	0,79	0,50	
221	FTIR	4,88	-0,14	-0,61	-0,39	
222	FTIR	4,90	-0,12	-0,52	-0,33	
223	FTIR	4,40	-0,62	-2,76	-1,77	
224	FTIR	4,87	-0,15	-0,65	-0,42	
225	FTIR	4,82	-0,20	-0,88	-0,56	
226	FTIR	5,10	0,08	0,38	0,24	
227	FTIR	5,05	0,03	0,16	0,10	
228	FTIR	4,87	-0,15	-0,65	-0,42	
229	FTIR	5,04	0,02	0,11	0,07	
231	FTIR	4,02	-1,00	-4,47	-2,86	
232	FTIR	4,13	-0,89	-3,98	-2,54	
234	FTIR	4,65	-0,37	-1,64	-1,05	
235	FTIR	4,30	-0,72	-3,21	-2,05	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

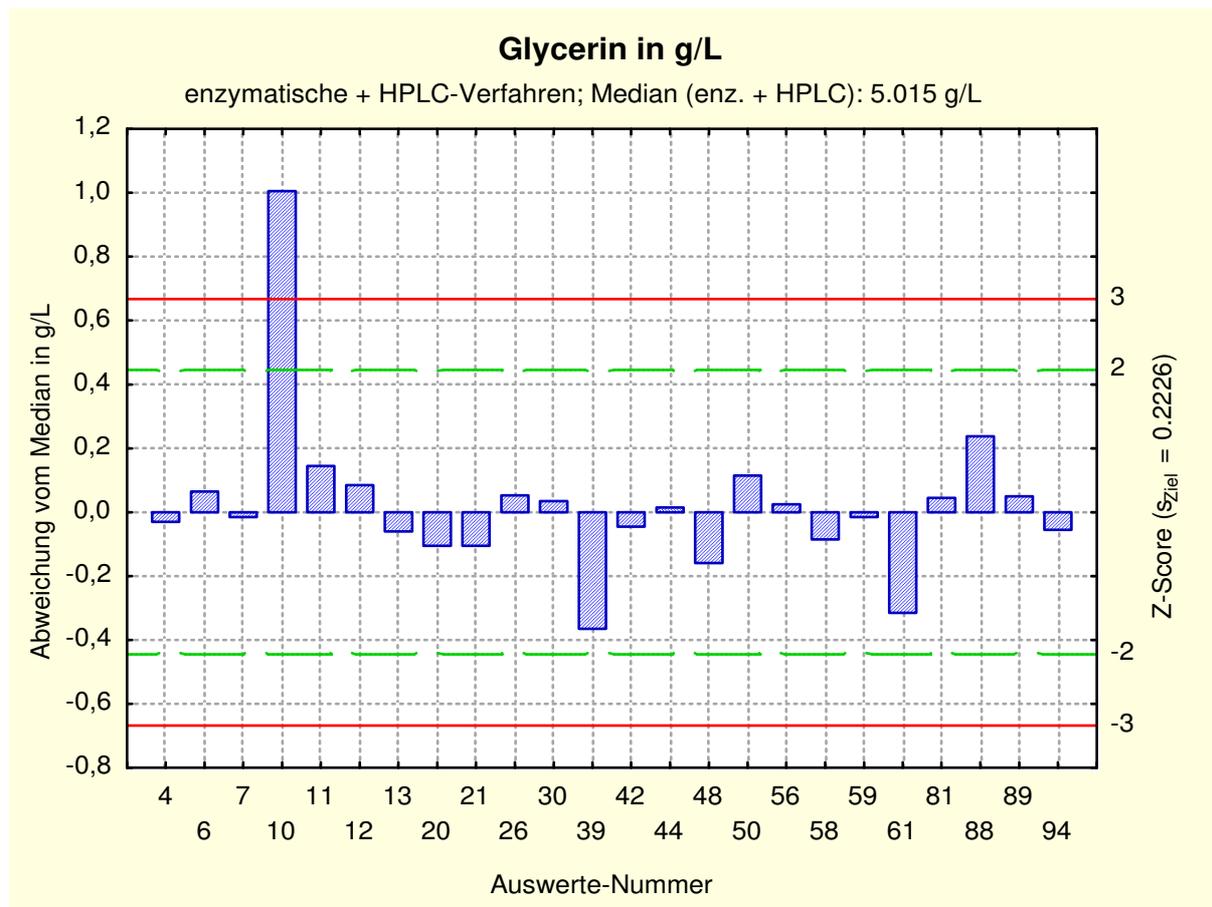
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
236	FTIR	4,23	-0,79	-3,53	-2,26	
237	FTIR	6,30	1,28	5,77	3,69	
240	FTIR	4,80	-0,22	-0,97	-0,62	
241	FTIR	4,70	-0,32	-1,42	-0,91	
242	FTIR	4,57	-0,45	-2,00	-1,28	
243	FTIR	4,91	-0,11	-0,47	-0,30	
244	FTIR	4,92	-0,10	-0,43	-0,27	
245	FTIR	4,68	-0,34	-1,51	-0,96	
246	FTIR	4,80	-0,22	-0,97	-0,62	
249	FTIR	5,80	0,78	3,53	2,26	
250	FTIR	4,98	-0,04	-0,16	-0,10	
252	FTIR	4,68	-0,34	-1,51	-0,96	
254	FTIR	4,80	-0,22	-0,97	-0,62	
256	FTIR	5,82	0,80	3,62	2,31	
257	FTIR	4,62	-0,40	-1,77	-1,14	
258	FTIR	5,50	0,48	2,18	1,39	
259	FTIR	4,81	-0,21	-0,92	-0,59	
260	FTIR	4,80	-0,22	-0,97	-0,62	
261	FTIR	6,20	1,18	5,32	3,41	
262	FTIR	6,30	1,28	5,77	3,69	
263	FTIR	4,60	-0,42	-1,86	-1,19	
265	FTIR	5,53	0,51	2,31	1,48	
266	FTIR	4,80	-0,22	-0,97	-0,62	
267	FTIR	5,00	-0,02	-0,07	-0,04	
271	FTIR	4,08	-0,94	-4,20	-2,69	
272	FTIR	4,40	-0,62	-2,76	-1,77	
273	FTIR	4,82	-0,20	-0,88	-0,56	
275	FTIR	4,40	-0,62	-2,76	-1,77	
276	FTIR	4,70	-0,32	-1,42	-0,91	
278	FTIR	5,03	0,01	0,07	0,04	
279	FTIR	4,92	-0,10	-0,43	-0,27	
280	FTIR	4,70	-0,32	-1,42	-0,91	
281	FTIR	5,02	0,00	0,02	0,01	
282	FTIR	4,84	-0,18	-0,79	-0,50	
283	FTIR	4,10	-0,92	-4,11	-2,63	
320	FTIR	5,29	0,27	1,24	0,79	
336	FTIR	4,21	-0,81	-3,62	-2,31	
337	FTIR	4,60	-0,42	-1,86	-1,19	
349	FTIR	4,60	-0,42	-1,86	-1,19	
368	FTIR	5,35	0,33	1,51	0,96	

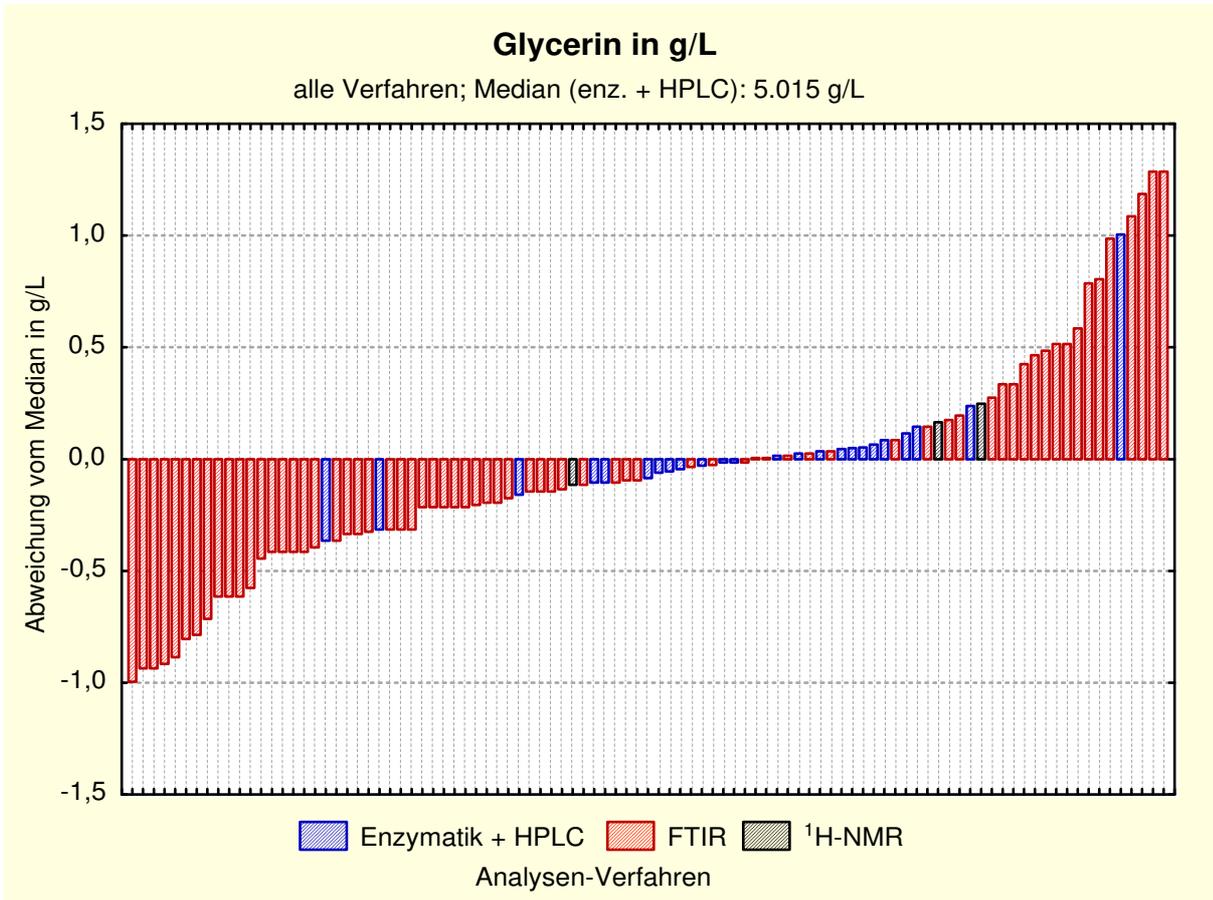
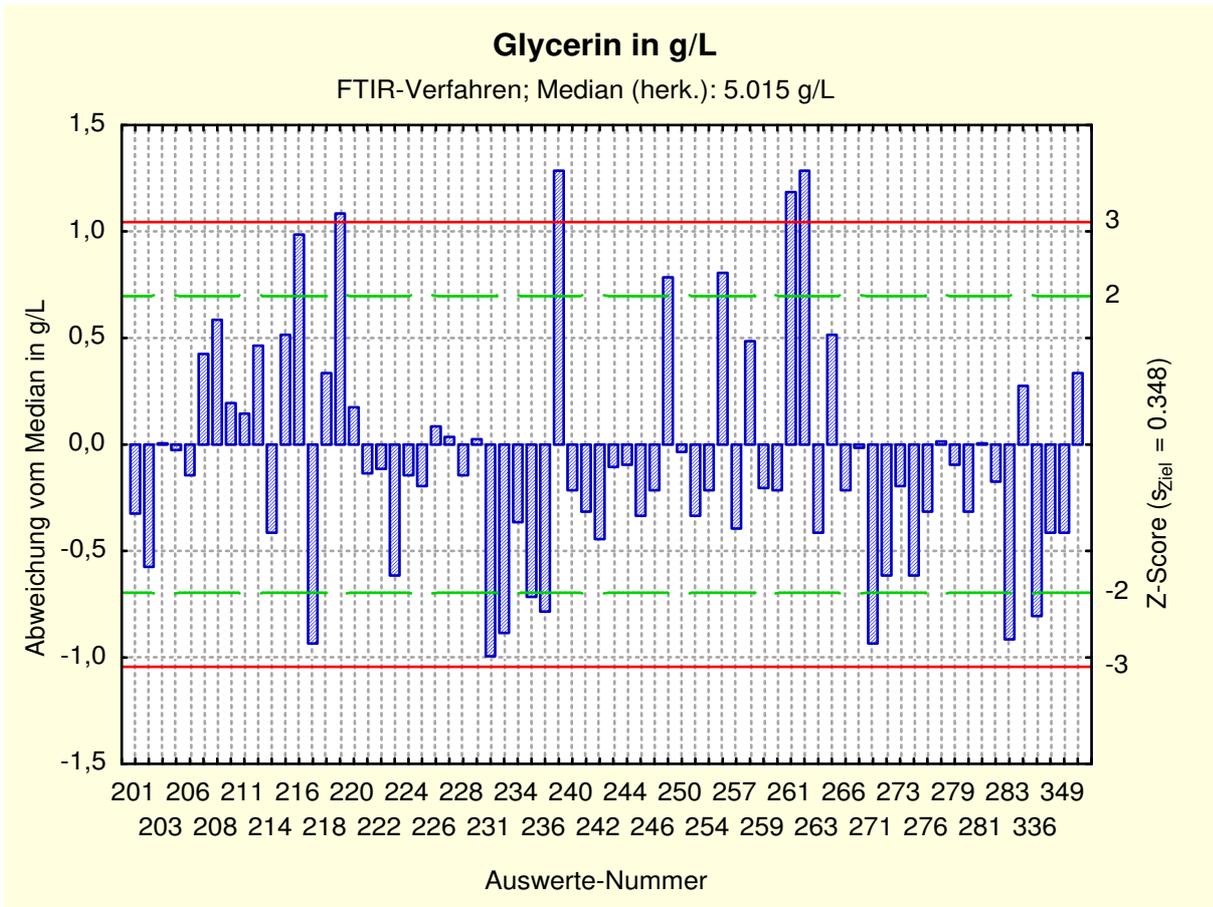
6.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	4,7
Mittelwert	5,04
Median	5,02
Maximalwert	6,0
Standardabweichung (s_L)	0,247
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,050
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,223
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,348
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,11
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,71
Quotient (u_M/s_H)	0,23
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,15

6.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	4,945	0,153
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	9	5,064	0,131
enzymat. Hand	enzymatisch manuell	3	5,088	0,050
	alle herkömmlichen Verfahren	24	5,013	0,115
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	4,902	0,482
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	5,055	0,221





6.12 pH-Wert

6.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
04	potentiometr.	3,13	-0,030	-0,63	
05	potentiometr.	3,21	0,050	1,05	
06	potentiometr.	3,16	0,000	0,00	
07	potentiometr.	3,18	0,020	0,42	
10	potentiometr.	3,20	0,040	0,84	
11	potentiometr.	3,24	0,080	1,68	
12	potentiometr.	3,26	0,100	2,10	
13	potentiometr.	3,13	-0,030	-0,63	
14	potentiometr.	3,18	0,020	0,42	
15	potentiometr.	3,02	-0,140	-2,94	
18	potentiometr.	3,24	0,076	1,60	
20	potentiometr.	3,20	0,040	0,84	
21	potentiometr.	3,11	-0,050	-1,05	
22	potentiometr.	3,16	0,000	0,00	
24	potentiometr.	3,09	-0,070	-1,47	
25	potentiometr.	3,05	-0,110	-2,31	
26	potentiometr.	3,15	-0,010	-0,21	
27	potentiometr.	3,35	0,190	3,99	
28	potentiometr.	3,10	-0,060	-1,26	
29	potentiometr.	3,09	-0,070	-1,47	
30	potentiometr.	3,06	-0,100	-2,10	
32	potentiometr.	3,10	-0,060	-1,26	
37	potentiometr.	3,06	-0,100	-2,10	
38	potentiometr.	3,02	-0,140	-2,94	
39	potentiometr.	3,16	0,000	0,00	
40	potentiometr.	3,19	0,025	0,53	
41	potentiometr.	3,17	0,010	0,21	
42	potentiometr.	3,34	0,180	3,78	
43	potentiometr.	3,12	-0,040	-0,84	
45	potentiometr.	3,11	-0,050	-1,05	
46	potentiometr.	3,28	0,120	2,52	
47	potentiometr.	3,07	-0,090	-1,89	
48	potentiometr.	3,18	0,020	0,42	
49	potentiometr.	3,16	0,000	0,00	
50	potentiometr.	3,20	0,040	0,84	
53	potentiometr.	3,19	0,030	0,63	
56	potentiometr.	3,19	0,030	0,63	
57	potentiometr.	2,96	-0,200	-4,20	
58	potentiometr.	3,23	0,070	1,47	
59	potentiometr.	3,25	0,090	1,89	
60	potentiometr.	3,11	-0,055	-1,16	
61	potentiometr.	2,82	-0,340	-7,14	(**)
62	potentiometr.	3,22	0,060	1,26	
63	potentiometr.	3,20	0,040	0,84	
64	potentiometr.	3,03	-0,130	-2,73	
69	potentiometr.	3,11	-0,050	-1,05	
77	potentiometr.	3,20	0,040	0,84	
81	potentiometr.	3,16	0,000	0,00	
88	potentiometr.	3,21	0,050	1,05	
101	potentiometr.	3,04	-0,120	-2,52	
102	potentiometr.	3,21	0,050	1,05	

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

6.12.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	51	3,152	0,082
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,224	0,063
	alle Verfahren	132	3,199	0,077

6.12.3 FTIR-Laboregebnisse

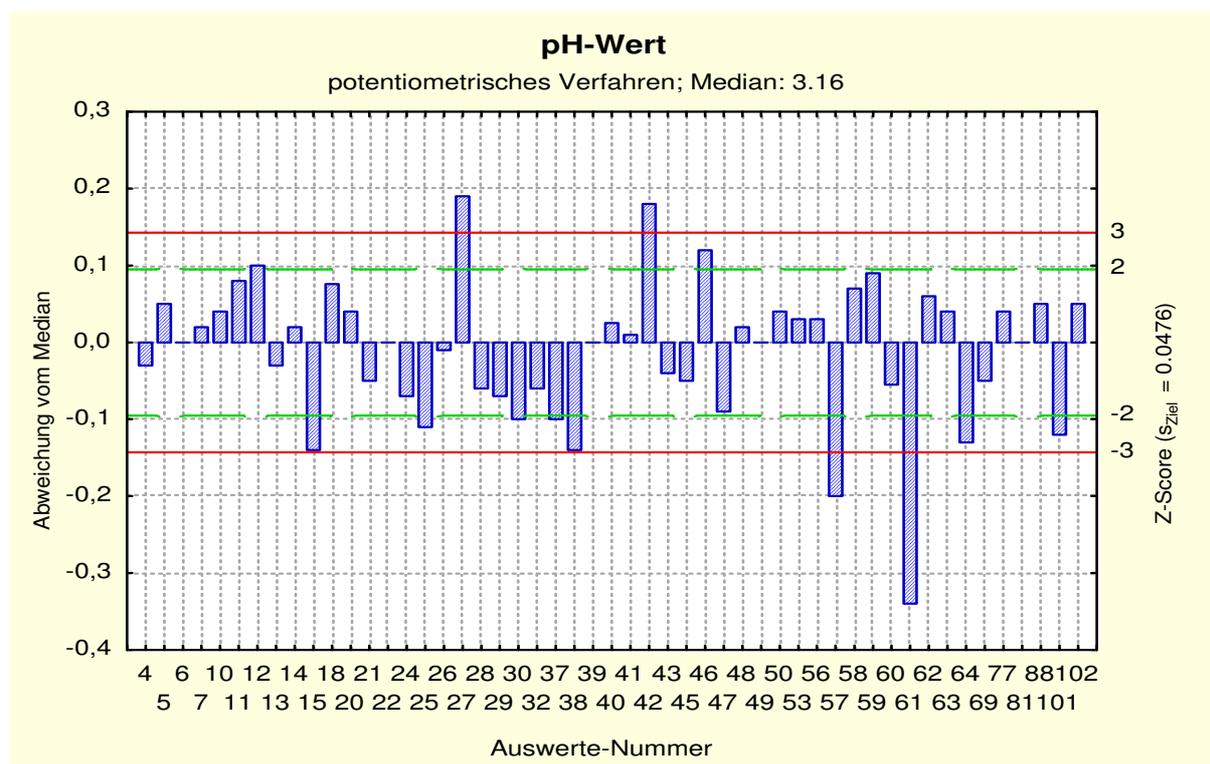
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,18	0,020	0,41	
202	FTIR	3,30	0,140	2,84	
203	FTIR	3,23	0,070	1,42	
204	FTIR	3,17	0,013	0,26	
205	FTIR	3,26	0,100	2,03	
206	FTIR	3,23	0,070	1,42	
207	FTIR	3,24	0,080	1,62	
208	FTIR	3,21	0,050	1,01	
209	FTIR	3,28	0,120	2,43	
211	FTIR	3,16	0,000	0,00	
212	FTIR	3,22	0,060	1,22	
214	FTIR	3,25	0,090	1,83	
215	FTIR	3,18	0,020	0,41	
216	FTIR	3,37	0,210	4,26	
217	FTIR	3,14	-0,020	-0,41	
218	FTIR	3,24	0,080	1,62	
219	FTIR	3,38	0,220	4,46	
220	FTIR	3,21	0,050	1,01	
221	FTIR	3,18	0,020	0,41	
222	FTIR	3,13	-0,030	-0,61	
223	FTIR	3,17	0,010	0,20	
224	FTIR	3,19	0,030	0,61	
225	FTIR	3,14	-0,020	-0,41	
226	FTIR	3,21	0,050	1,01	
227	FTIR	3,28	0,120	2,43	
228	FTIR	3,26	0,100	2,03	
229	FTIR	3,14	-0,020	-0,41	
231	FTIR	3,18	0,020	0,41	
232	FTIR	3,27	0,110	2,23	
234	FTIR	3,28	0,120	2,43	
235	FTIR	3,31	0,150	3,04	
236	FTIR	3,23	0,070	1,42	
237	FTIR	3,35	0,190	3,85	
240	FTIR	3,27	0,110	2,23	
241	FTIR	3,33	0,170	3,45	
242	FTIR	3,21	0,050	1,01	
243	FTIR	3,22	0,060	1,22	
244	FTIR	3,23	0,070	1,42	
245	FTIR	3,21	0,050	1,01	
246	FTIR	3,27	0,110	2,23	
247	FTIR	3,20	0,040	0,81	
248	FTIR	3,14	-0,020	-0,41	
249	FTIR	3,24	0,080	1,62	
250	FTIR	3,28	0,120	2,43	
251	FTIR	3,25	0,090	1,83	
252	FTIR	3,19	0,030	0,61	
254	FTIR	3,28	0,120	2,43	
256	FTIR	3,23	0,070	1,42	
257	FTIR	3,28	0,120	2,43	
258	FTIR	3,18	0,020	0,41	
259	FTIR	3,17	0,010	0,20	
260	FTIR	3,31	0,150	3,04	
261	FTIR	3,05	-0,110	-2,23	
262	FTIR	3,37	0,210	4,26	
263	FTIR	3,26	0,100	2,03	
264	FTIR	3,23	0,070	1,42	
265	FTIR	3,20	0,040	0,81	
266	FTIR	3,14	-0,020	-0,41	
267	FTIR	3,24	0,080	1,62	
268	FTIR	3,24	0,075	1,52	
269	FTIR	3,17	0,010	0,20	
270	FTIR	3,24	0,080	1,62	
271	FTIR	3,29	0,130	2,64	
272	FTIR	3,00	-0,160	-3,25	
273	FTIR	3,21	0,050	1,01	
274	FTIR	3,26	0,100	2,03	

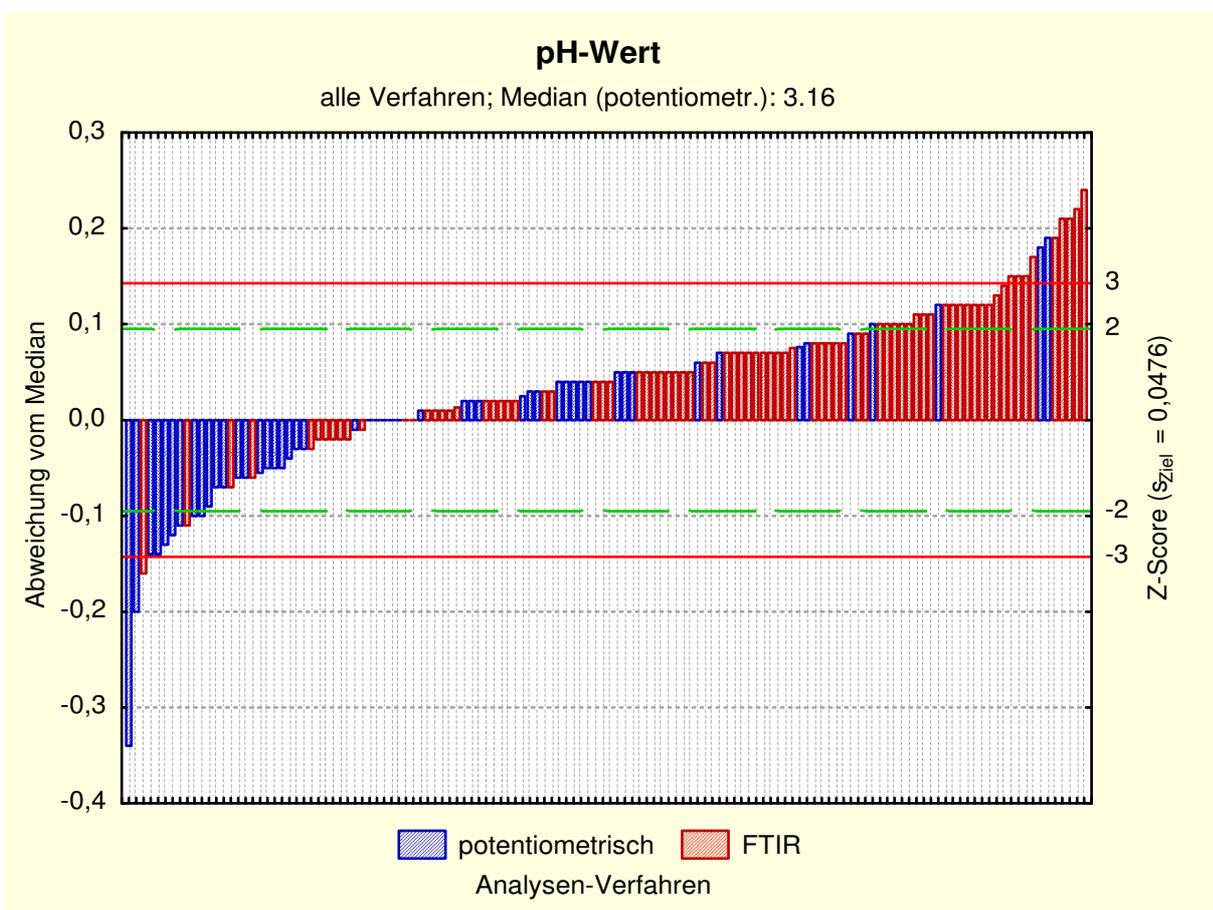
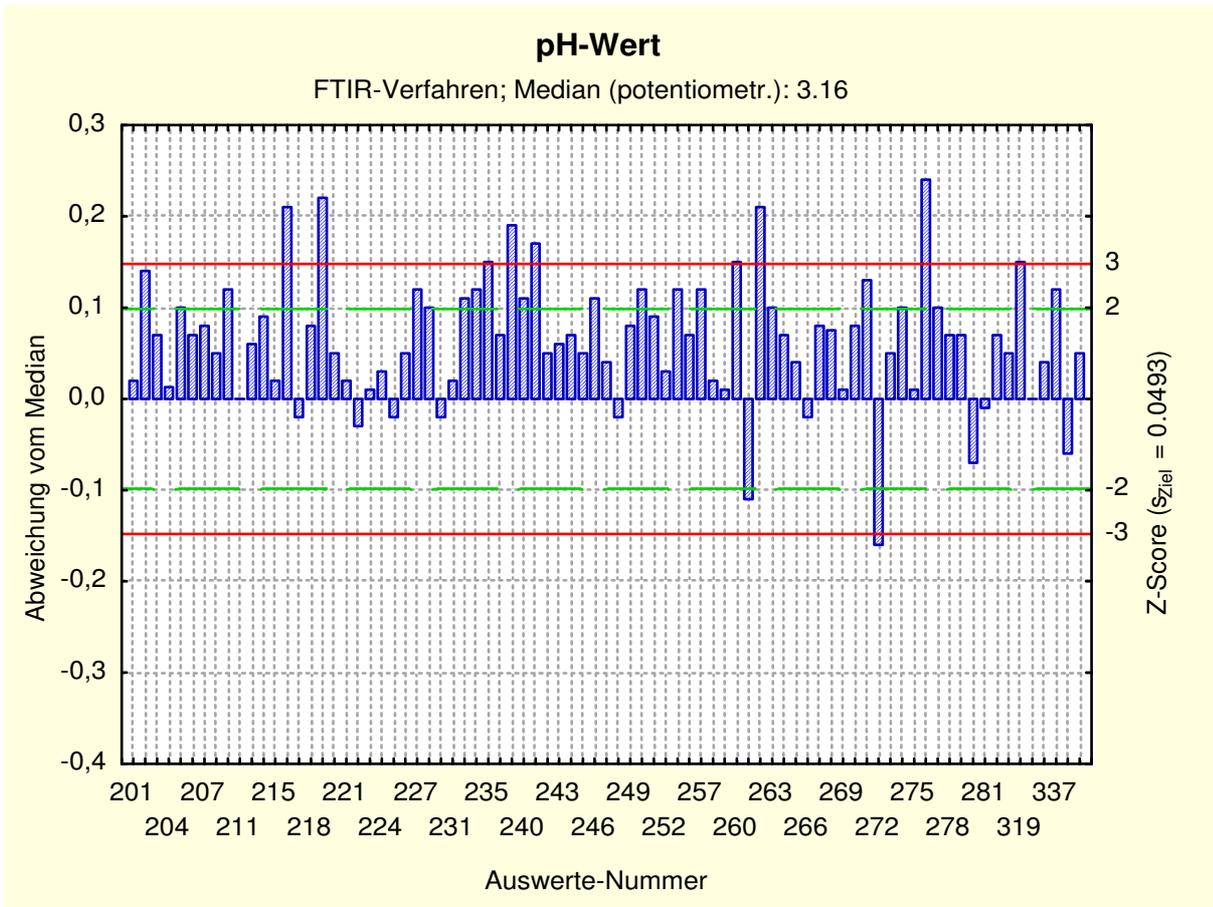
Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	3,17	0,010	0,20	
276	FTIR	3,40	0,240	4,87	
277	FTIR	3,26	0,100	2,03	
278	FTIR	3,23	0,070	1,42	
279	FTIR	3,23	0,070	1,42	
280	FTIR	3,09	-0,070	-1,42	
281	FTIR	3,15	-0,010	-0,20	
282	FTIR	3,23	0,070	1,42	
283	FTIR	3,21	0,050	1,01	
319	FTIR	3,31	0,150	3,04	
320	FTIR	3,16	0,000	0,00	
336	FTIR	3,20	0,040	0,81	
337	FTIR	3,28	0,120	2,43	
349	FTIR	3,10	-0,060	-1,22	
364	FTIR	3,21	0,050	1,01	

6.12.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	51	50
Minimalwert	2,82	2,96
Mittelwert	3,149	3,155
Median	3,160	3,160
Maximalwert	3,35	3,35
Standardabweichung (s _L)	0,0929	0,0810
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0130	0,0115
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s _L /s _H)		
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,95	1,70
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,88	1,64
Quotient (u _M /s _H)		
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,27	0,24
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,26	0,23





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	phot.aut.	6,62	-0,185	-0,64	-1,73	
05	LwK 5.2.1	6,87	0,070	0,24	0,65	
06	LwK 5.1	6,50	-0,300	-1,04	-2,80	
07	LwK 5.2.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
10	LwK 5.2.1	6,66	-0,140	-0,49	-1,31	
11	LwK 5.1	6,53	-0,270	-0,94	-2,52	
12	LwK 5.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
13	LwK 5.1	6,91	0,110	0,38	1,03	
14	LwK 5.1	7,54	0,740	2,57	6,91	(**)
15	LwK 5.2.1	6,77	-0,030	-0,10	-0,28	
18	LwK 5.2.1	6,84	0,040	0,14	0,37	
19	LwK 5.1	6,68	-0,120	-0,42	-1,12	
20	LwK 5.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
21	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
22	LwK 5.1	6,50	-0,300	-1,04	-2,80	
23	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
24	LwK 5.1	7,10	0,300	1,04	2,80	
25	LwK 5.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
26	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
27	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
28	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
29	LwK 5.2.1	7,04	0,240	0,83	2,24	
30	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
31	LwK 5.1	6,50	-0,300	-1,04	-2,80	
32	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
33	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
34	LwK 5.2.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
37	LwK 5.1	7,35	0,550	1,91	5,13	(**)
38	LwK 5.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
39	LwK 5.2.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
40	LwK 5.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
41	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
42	LwK 5.1	6,71	-0,090	-0,31	-0,84	
43	LwK 5.1	7,60	0,800	2,78	7,47	(**)
44	LwK 5.3	6,76	-0,040	-0,14	-0,37	
45	LwK 5.1	6,77	-0,030	-0,10	-0,28	
46	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
47	LwK 5.1	6,78	-0,020	-0,07	-0,19	
48	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
49	LwK 5.1	7,05	0,250	0,87	2,33	
50	LwK 5.1	6,69	-0,110	-0,38	-1,03	
51	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
52	LwK 5.2.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
53	LwK 5.2.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
55	LwK 5.2.2	7,69	0,890	3,09	8,31	(**)
56	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
57	LwK 5.1	6,85	0,050	0,17	0,47	
58	LwK 5.1	6,85	0,050	0,17	0,47	
59	LwK 5.1	6,97	0,170	0,59	1,59	
60	LwK 5.2.1	7,70	0,900	3,12	8,40	(**)
61	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
62	LwK 5.1	6,40	-0,400	-1,39	-3,73	
63	LwK 5.2.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
64	LwK 5.1	6,77	-0,030	-0,10	-0,28	
69	LwK 5.2.1	7,45	0,650	2,25	6,07	(**)
77	LwK 5.2.2	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
81	LwK 5.2.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
87	LwK 5.2.1	6,92	0,120	0,42	1,12	
101	LwK 5.1	6,88	0,080	0,28	0,75	
102	LwK 5.2.1	7,25	0,450	1,56	4,20	
110	LwK 5.1	7,10	0,300	1,04	2,80	
111	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
112	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
113	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
114	LwK 5.1	6,65	-0,150	-0,52	-1,40	
115	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
116	LwK 5.2.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
117	LwK 5.1	6,73	-0,070	-0,24	-0,65	
118	LwK 5.1	6,61	-0,190	-0,66	-1,77	
119	LwK 5.1	7,00	0,200	0,69	1,87	
120	LwK 5.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
121	LwK 5.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
122	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
123	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
124	LwK 5.1	6,90	0,100	0,35	0,93	
125	LwK 5.1	7,90	1,100	3,82	10,27	(**)
126	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
127	LwK 5.1	6,73	-0,070	-0,24	-0,65	
128	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
129	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
130	LwK 5.1	7,05	0,250	0,87	2,33	
131	LwK 5.2.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
132	LwK 5.1	7,20	0,400	1,39	3,73	
133	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
134	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
135	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
136	LwK 5.2.1	6,88	0,080	0,28	0,75	
137	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
138	LwK 5.1	6,85	0,050	0,17	0,47	
139	LwK 5.1	7,80	1,000	3,47	9,33	(**)
140	LwK 5.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
141	LwK 5.1	6,74	-0,060	-0,21	-0,56	
142	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
143	LwK 5.2.1	6,60	-0,200	-0,69	-1,87	
144	LwK 5.1	6,65	-0,150	-0,52	-1,40	
145	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	
146	LwK 5.1	6,66	-0,140	-0,49	-1,31	
147	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
148	LwK 5.1	6,83	0,030	0,10	0,28	
149	LwK 5.1	6,80	0,000	0,00	0,00	
150	LwK 5.1	6,70	-0,100	-0,35	-0,93	

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

6.13.1 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,59	-0,205	-0,71	-1,41	
202	LwK 5.3	6,66	-0,140	-0,49	-0,97	
203	LwK 5.3	6,48	-0,320	-1,11	-2,21	
204	LwK 5.3	6,75	-0,052	-0,18	-0,36	
205	LwK 5.3	6,84	0,040	0,14	0,28	
206	LwK 5.3	6,47	-0,330	-1,14	-2,28	
207	LwK 5.3	6,79	-0,010	-0,03	-0,07	
208	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
209	LwK 5.3	6,83	0,030	0,10	0,21	
210	LwK 5.3	6,59	-0,210	-0,73	-1,45	
211	LwK 5.3	6,57	-0,230	-0,80	-1,59	
212	LwK 5.3	6,75	-0,050	-0,17	-0,34	
214	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
215	LwK 5.3	6,82	0,020	0,07	0,14	
216	LwK 5.3	6,63	-0,170	-0,59	-1,17	
217	LwK 5.3	6,63	-0,170	-0,59	-1,17	
218	LwK 5.3	6,58	-0,220	-0,76	-1,52	
219	LwK 5.3	6,80	0,000	0,00	0,00	
220	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
221	LwK 5.3	6,59	-0,210	-0,73	-1,45	
222	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

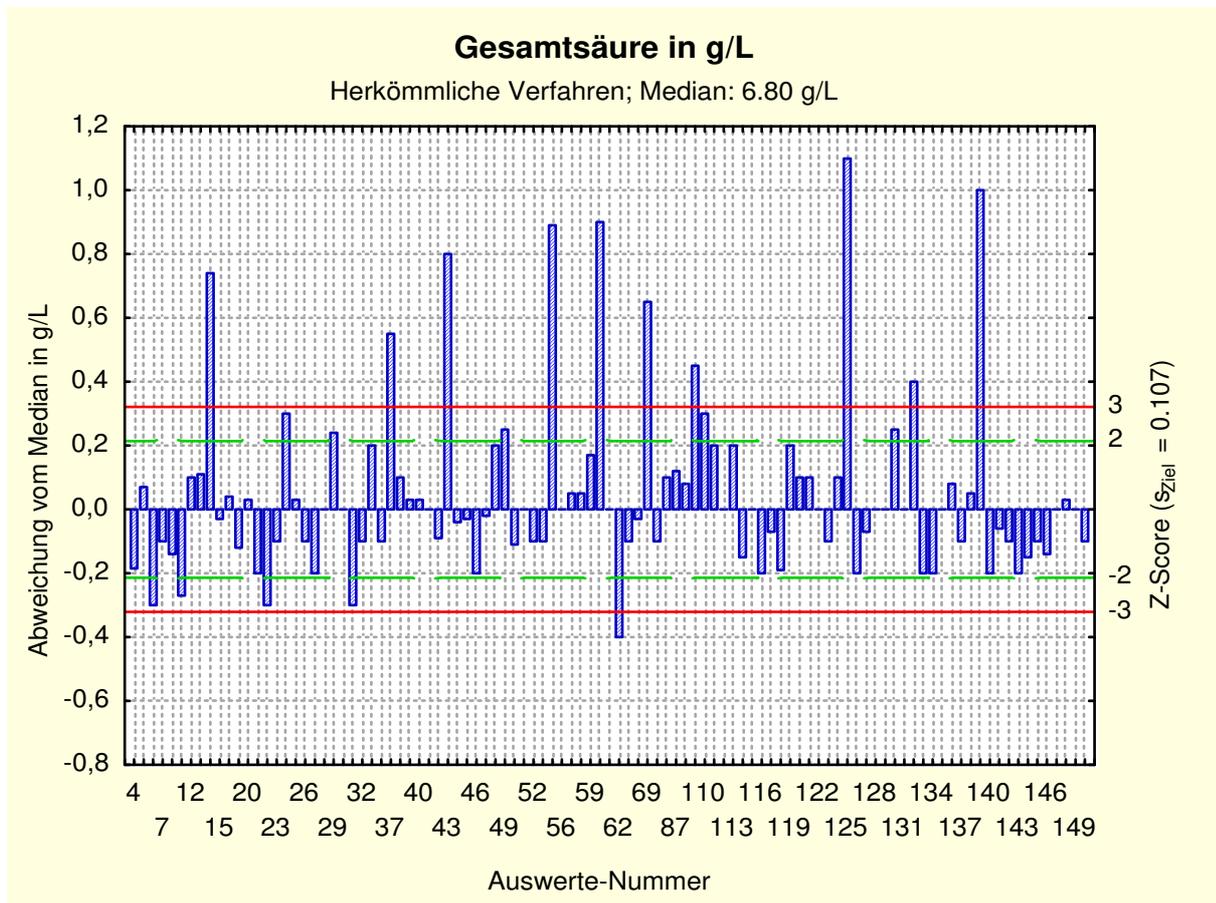
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	LwK 5.3	6,60	-0,200	-0,69	-1,38	
224	LwK 5.3	6,99	0,190	0,66	1,31	
225	LwK 5.3	6,55	-0,250	-0,87	-1,72	
226	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
227	LwK 5.3	6,63	-0,170	-0,59	-1,17	
228	LwK 5.3	6,61	-0,190	-0,66	-1,31	
229	LwK 5.3	6,16	-0,640	-2,22	-4,41	
231	LwK 5.3	6,51	-0,290	-1,01	-2,00	
232	LwK 5.3	6,73	-0,070	-0,24	-0,48	
234	LwK 5.3	6,49	-0,310	-1,08	-2,14	
235	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
236	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
237	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
240	LwK 5.3	6,74	-0,060	-0,21	-0,41	
241	LwK 5.3	6,80	0,000	0,00	0,00	
242	LwK 5.3	6,60	-0,200	-0,69	-1,38	
243	LwK 5.3	6,60	-0,200	-0,69	-1,38	
244	LwK 5.3	6,59	-0,210	-0,73	-1,45	
245	LwK 5.3	6,88	0,080	0,28	0,55	
246	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
247	LwK 5.3	6,56	-0,240	-0,83	-1,66	
248	LwK 5.3	6,96	0,160	0,56	1,10	
249	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
250	LwK 5.3	6,52	-0,280	-0,97	-1,93	
251	LwK 5.3	6,87	0,070	0,24	0,48	
252	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
254	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
255	LwK 5.3	7,50	0,700	2,43	4,83	
256	LwK 5.3	6,61	-0,190	-0,66	-1,31	
257	LwK 5.3	6,78	-0,020	-0,07	-0,14	
258	LwK 5.3	6,88	0,080	0,28	0,55	
259	LwK 5.3	6,57	-0,230	-0,80	-1,59	
260	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
261	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
262	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
263	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
264	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
265	LwK 5.3	6,75	-0,050	-0,17	-0,34	
266	LwK 5.3	6,58	-0,220	-0,76	-1,52	
267	LwK 5.3	6,74	-0,060	-0,21	-0,41	
268	LwK 5.3	6,49	-0,310	-1,08	-2,14	
269	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
270	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
271	LwK 5.3	6,92	0,120	0,42	0,83	
272	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
273	LwK 5.3	6,42	-0,380	-1,32	-2,62	
274	LwK 5.3	7,14	0,340	1,18	2,34	
275	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
276	LwK 5.3	6,40	-0,400	-1,39	-2,76	
277	LwK 5.3	6,66	-0,140	-0,49	-0,97	
278	LwK 5.3	6,67	-0,130	-0,45	-0,90	
279	LwK 5.3	6,57	-0,230	-0,80	-1,59	
280	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
281	LwK 5.3	6,79	-0,010	-0,03	-0,07	
282	LwK 5.3	6,74	-0,060	-0,21	-0,41	
283	LwK 5.3	6,50	-0,300	-1,04	-2,07	
312	LwK 5.3	6,46	-0,340	-1,18	-2,34	
319	LwK 5.3	6,80	0,000	0,00	0,00	
320	LwK 5.3	6,54	-0,260	-0,90	-1,79	
323	LwK 5.3	6,80	0,000	0,00	0,00	
336	LwK 5.3	6,77	-0,030	-0,10	-0,21	
337	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
343	LwK 5.3	6,65	-0,150	-0,52	-1,03	
349	LwK 5.3	6,90	0,100	0,35	0,69	
364	LwK 5.3	6,70	-0,100	-0,35	-0,69	
368	LwK 5.3	6,60	-0,200	-0,69	-1,38	

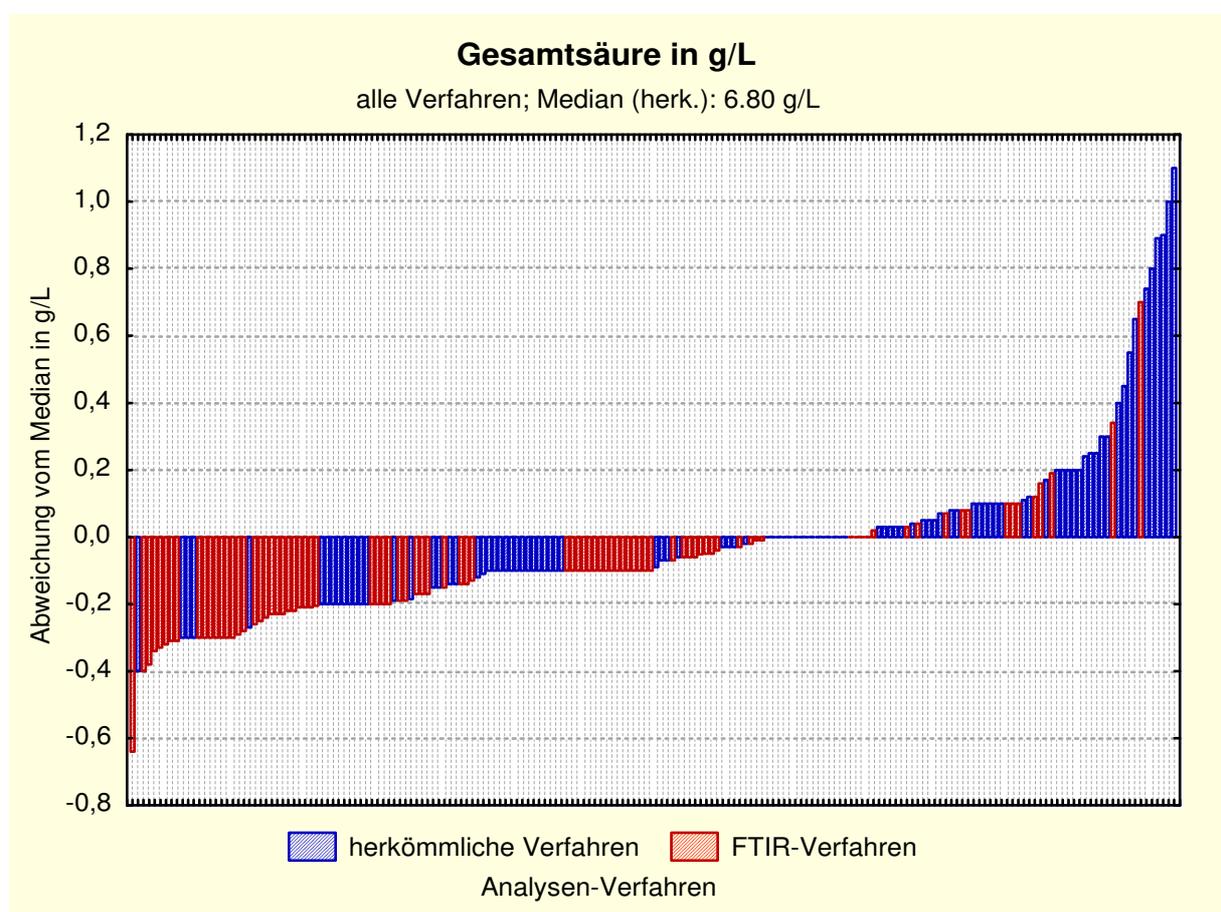
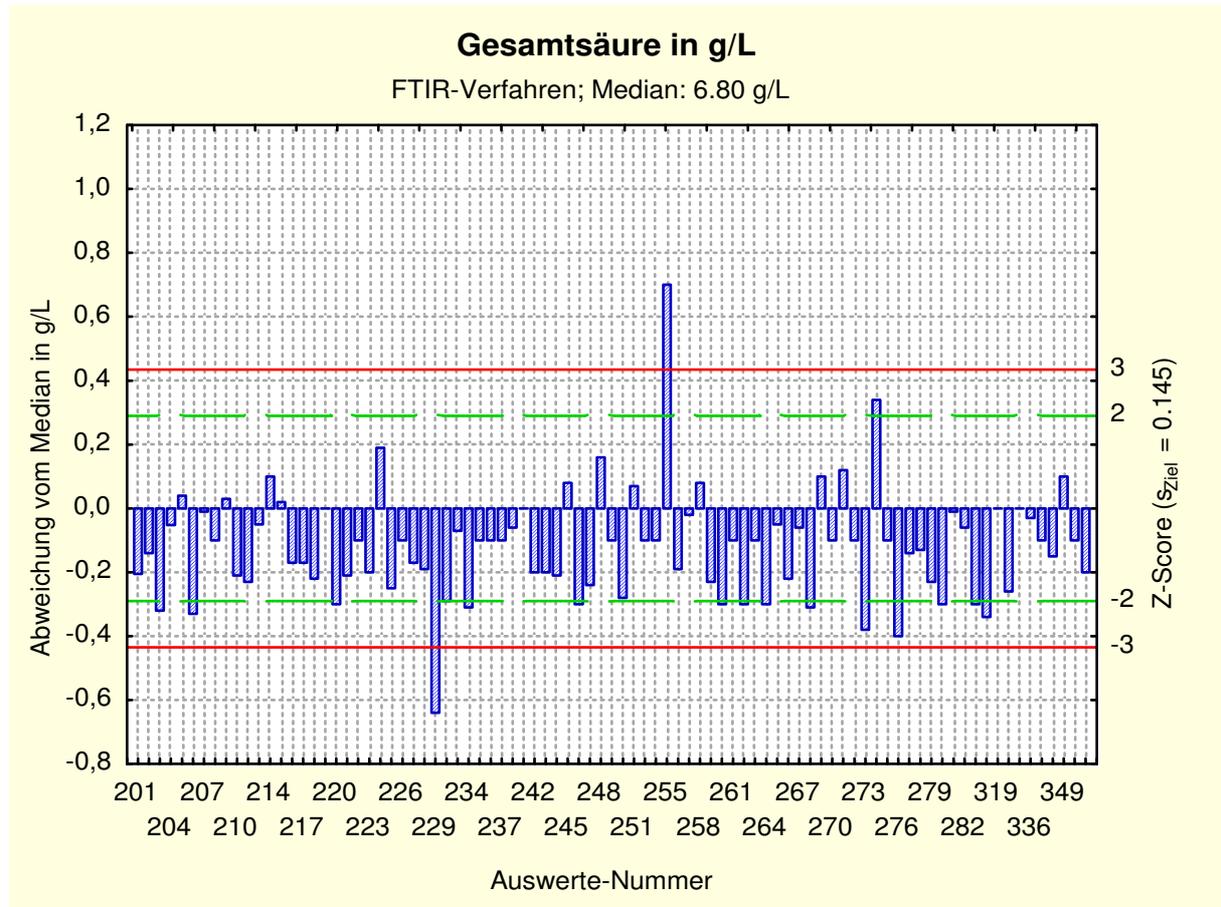
6.13.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	100	92
Minimalwert	6,40	6,40
Mittelwert	6,840	6,778
Median	6,800	6,800
Maximalwert	7,90	7,20
Standardabweichung (s_L)	0,273	0,150
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,028	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,288	0,288
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,95	0,52
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,55	1,40
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	1,88	1,11
Quotient (u_M/s_H)	0,10	0,05
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,26	0,15
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,19	0,12

6.13.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	74	6,801	0,184
LwK 5.2.1	Potentiometrische Bestimmung; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	23	6,816	0,159
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	2	7,195	0,794
	alle herkömmlichen Verfahren	99	6,807	0,178
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	6,672	0,150
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	6,615	





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,67	-0,030	-0,23	
02	IC	2,70	0,000	0,00	
05	photometr.	2,61	-0,090	-0,68	
06	HPLC	2,60	-0,100	-0,76	
07	HPLC	2,70	0,000	0,00	
08	HPLC	2,68	-0,020	-0,15	
10	photometr. autom.	2,67	-0,030	-0,23	
11	photometr.	2,97	0,270	2,05	
15	photometr. autom.	2,80	0,100	0,76	
21	HPLC	3,10	0,400	3,04	
22	NMR	2,91	0,210	1,60	
24	HPLC	2,65	-0,050	-0,38	
25	photometr. autom.	2,66	-0,040	-0,30	
26	HPLC	2,82	0,120	0,91	
29	photometr. autom.	2,40	-0,300	-2,28	
31	photometr. autom.	2,96	0,260	1,98	
38	photometr. autom.	3,02	0,320	2,43	
39	HPLC	2,75	0,050	0,38	
40	photometr. autom.	2,90	0,200	1,52	
41	photometr. autom.	2,63	-0,070	-0,53	
44	photometr. autom.	2,75	0,050	0,38	
45	photometr. autom.	2,90	0,200	1,52	
47	photometr.	3,13	0,430	3,27	
48	photometr. autom.	2,20	-0,500	-3,80	
50	HPLC	2,68	-0,020	-0,15	
56	photometr. autom.	2,95	0,250	1,90	
57	photometr. autom.	2,50	-0,200	-1,52	
58	photometr. autom.	2,59	-0,110	-0,84	
59	HPLC	2,70	0,000	0,00	
61	photometr. autom.	2,11	-0,590	-4,49	
63	HPLC	2,80	0,100	0,76	
69	photometr. autom.	2,89	0,190	1,44	
92	photometr. autom.	2,88	0,180	1,37	
94	HPLC	2,78	0,080	0,61	
97	photometr.	2,48	-0,225	-1,71	
104	NMR	2,34	-0,361	-2,75	
105	NMR	2,31	-0,390	-2,97	
106	NMR	1,91	-0,790	-6,01	
107	NMR	2,32	-0,385	-2,93	

6.14.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,81	0,110	0,84	0,48	
202	FTIR	2,89	0,190	1,44	0,84	
203	FTIR	2,74	0,040	0,30	0,18	
204	FTIR	2,98	0,276	2,10	1,22	
205	FTIR	2,76	0,060	0,46	0,26	
206	FTIR	2,91	0,210	1,60	0,93	
208	FTIR	2,50	-0,200	-1,52	-0,88	
211	FTIR	2,52	-0,180	-1,37	-0,79	
212	FTIR	2,33	-0,370	-2,81	-1,63	
214	FTIR	2,60	-0,100	-0,76	-0,44	
215	FTIR	2,60	-0,100	-0,76	-0,44	
216	FTIR	6,63	3,930	29,88	17,31	(*)
217	FTIR	2,68	-0,020	-0,15	-0,09	
218	FTIR	2,65	-0,050	-0,38	-0,22	
219	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
220	FTIR	2,37	-0,330	-2,51	-1,45	
221	FTIR	2,09	-0,610	-4,64	-2,69	
222	FTIR	2,91	0,210	1,60	0,93	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

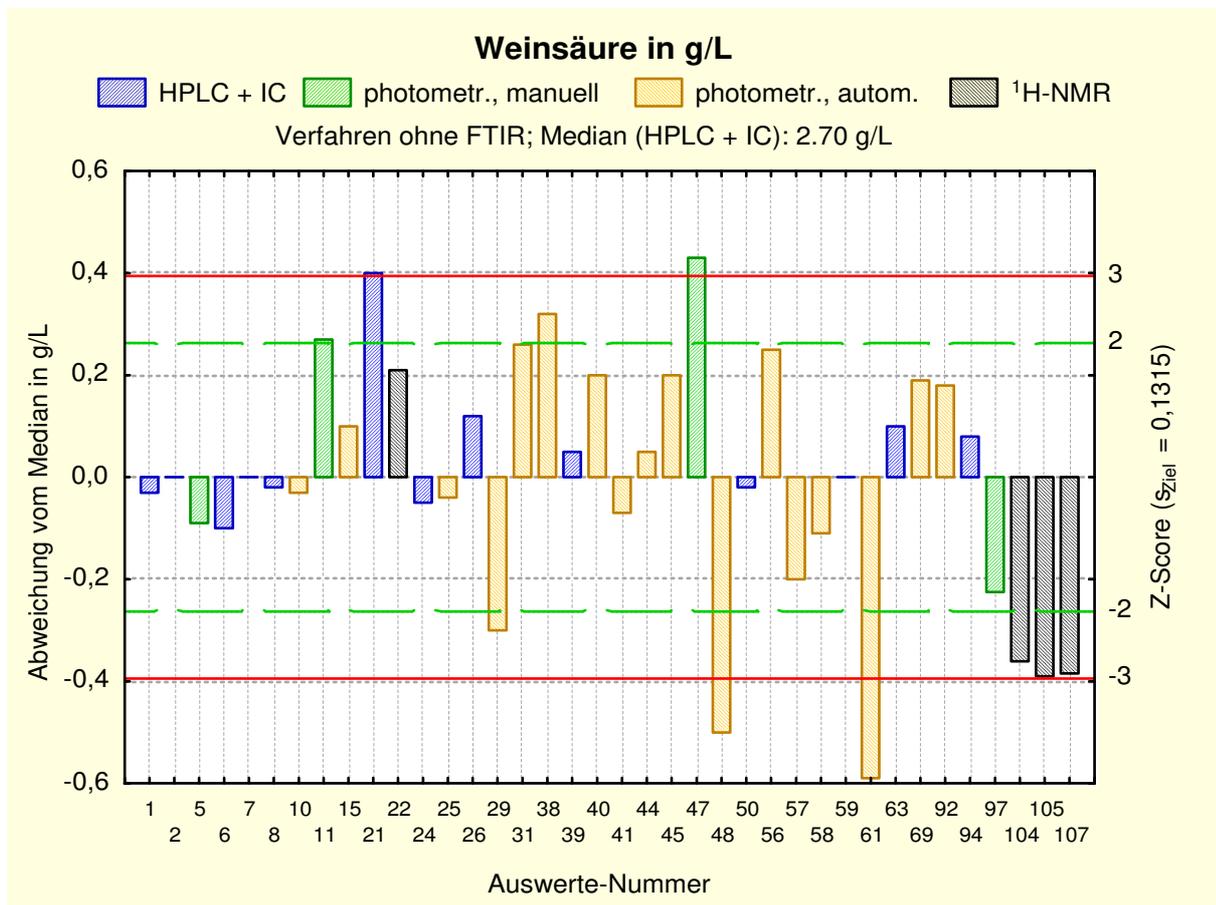
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	2,70	0,000	0,00	0,00	
224	FTIR	2,81	0,110	0,84	0,48	
225	FTIR	2,36	-0,340	-2,59	-1,50	
226	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
227	FTIR	2,71	0,010	0,08	0,04	
228	FTIR	2,87	0,170	1,29	0,75	
229	FTIR	2,83	0,130	0,99	0,57	
231	FTIR	2,81	0,110	0,84	0,48	
232	FTIR	2,75	0,050	0,38	0,22	
234	FTIR	3,12	0,420	3,19	1,85	
235	FTIR	2,20	-0,500	-3,80	-2,20	
236	FTIR	2,42	-0,280	-2,13	-1,23	
237	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
240	FTIR	2,84	0,140	1,06	0,62	
241	FTIR	2,50	-0,200	-1,52	-0,88	
242	FTIR	3,37	0,670	5,09	2,95	
243	FTIR	2,15	-0,550	-4,18	-2,42	
244	FTIR	2,77	0,070	0,53	0,31	
245	FTIR	2,54	-0,160	-1,22	-0,70	
246	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
247	FTIR	2,57	-0,130	-0,99	-0,57	
249	FTIR	2,70	0,000	0,00	0,00	
250	FTIR	2,69	-0,010	-0,08	-0,04	
252	FTIR	2,75	0,050	0,38	0,22	
254	FTIR	2,70	0,000	0,00	0,00	
256	FTIR	2,77	0,070	0,53	0,31	
257	FTIR	1,93	-0,770	-5,85	-3,39	
258	FTIR	2,91	0,210	1,60	0,93	
259	FTIR	2,63	-0,070	-0,53	-0,31	
260	FTIR	2,70	0,000	0,00	0,00	
261	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
262	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
264	FTIR	1,90	-0,800	-6,08	-3,52	
265	FTIR	2,84	0,140	1,06	0,62	
266	FTIR	2,66	-0,040	-0,30	-0,18	
267	FTIR	2,49	-0,210	-1,60	-0,93	
268	FTIR	2,75	0,050	0,38	0,22	
269	FTIR	2,14	-0,560	-4,26	-2,47	
270	FTIR	2,60	-0,100	-0,76	-0,44	
271	FTIR	2,62	-0,080	-0,61	-0,35	
272	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
273	FTIR	2,89	0,190	1,44	0,84	
274	FTIR	2,40	-0,300	-2,28	-1,32	
275	FTIR	2,70	0,000	0,00	0,00	
276	FTIR	2,90	0,200	1,52	0,88	
277	FTIR	2,72	0,020	0,15	0,09	
278	FTIR	3,07	0,370	2,81	1,63	
279	FTIR	2,76	0,060	0,46	0,26	
280	FTIR	2,60	-0,100	-0,76	-0,44	
282	FTIR	2,95	0,250	1,90	1,10	
283	FTIR	3,10	0,400	3,04	1,76	
319	FTIR	2,80	0,100	0,76	0,44	
320	FTIR	3,08	0,380	2,89	1,67	
336	FTIR	2,47	-0,230	-1,75	-1,01	
337	FTIR	2,20	-0,500	-3,80	-2,20	
349	FTIR	3,10	0,400	3,04	1,76	
364	FTIR	2,10	-0,600	-4,56	-2,64	

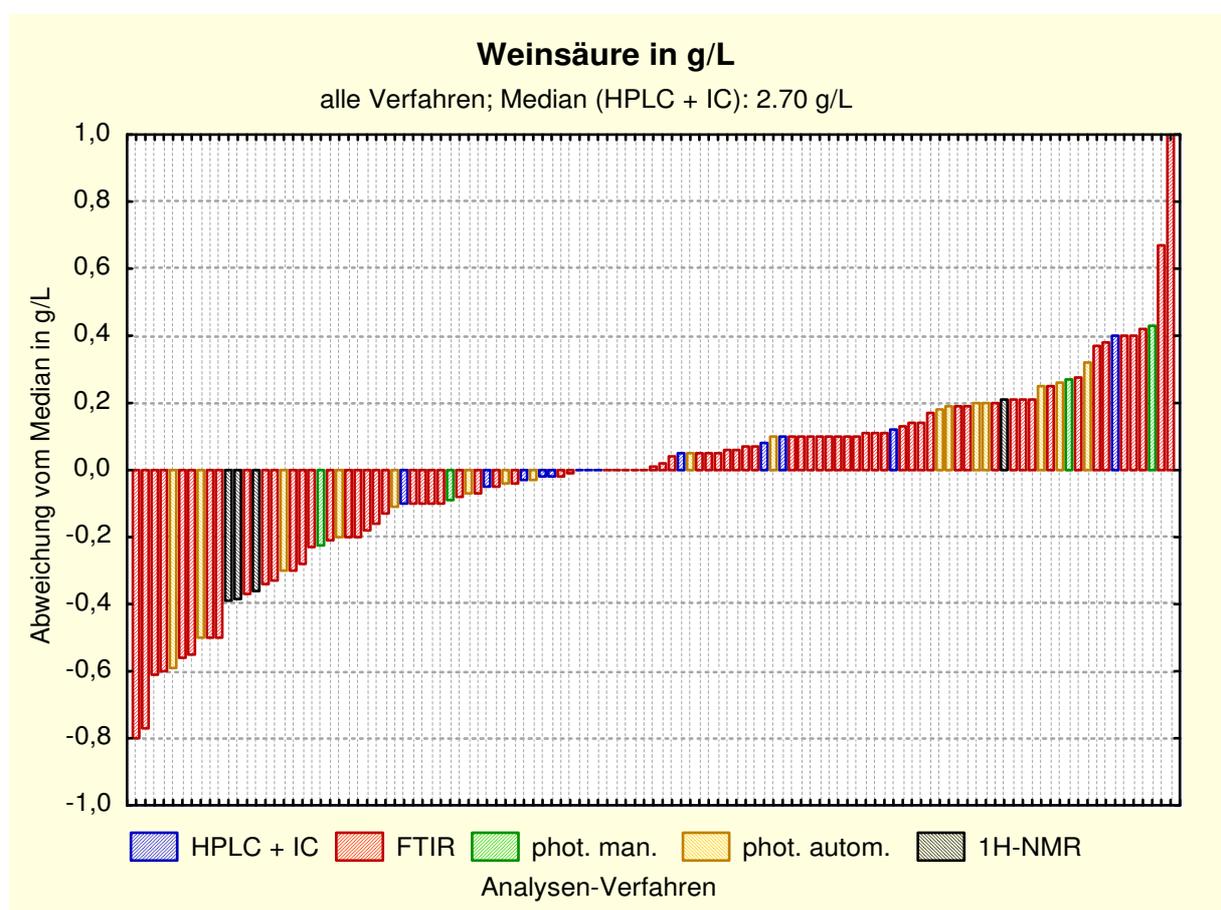
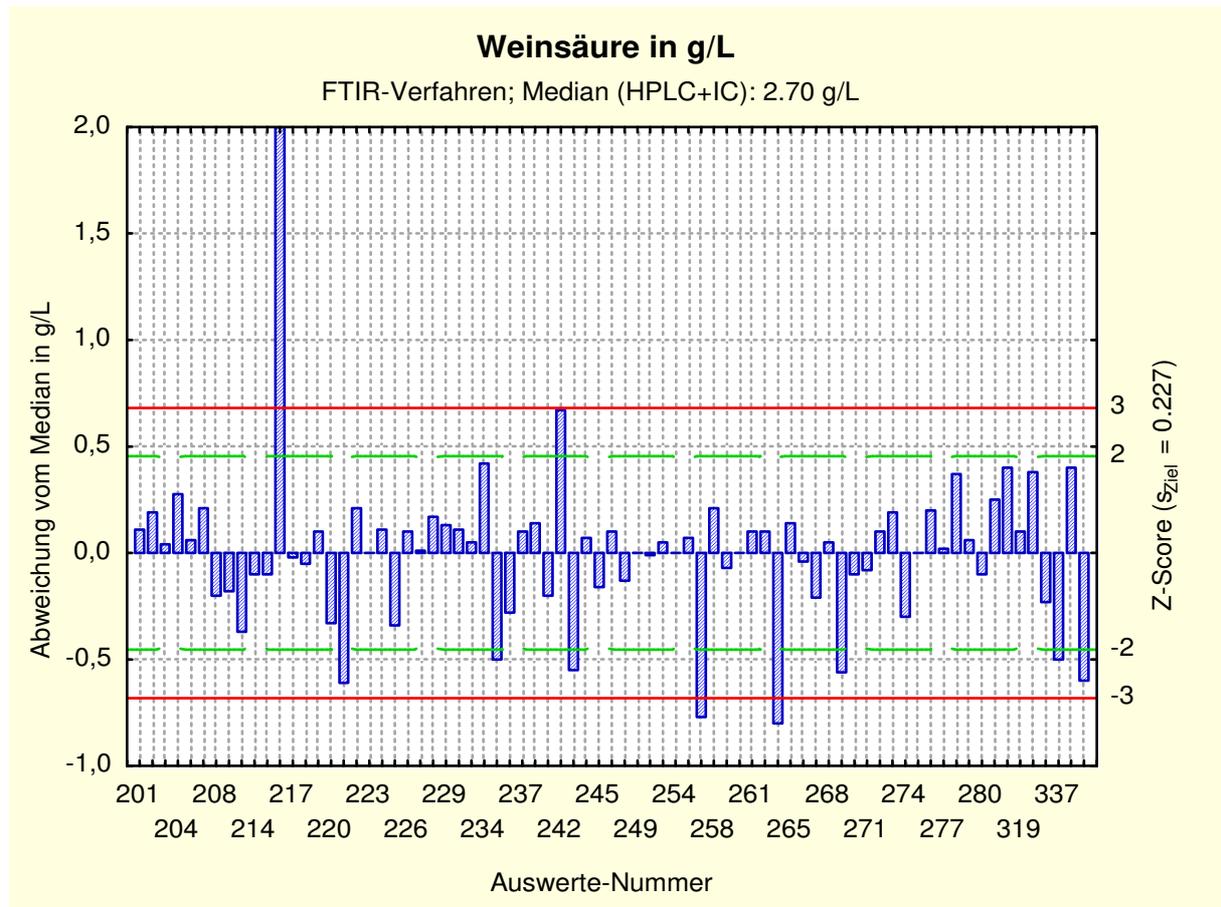
6.14.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC alle Daten	herk. Verf. alle Daten
Gültige Werte	13	33
Minimalwert	2,60	2,11
Mittelwert	2,741	2,719
Median	2,700	2,700
Maximalwert	3,10	3,13
Standardabweichung (s _L)	0,124	0,225
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,035	0,039
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,132	0,132
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)	0,227	0,227
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,95	1,71
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)		
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)	0,55	0,99
Quotient (u _M /s _H)	0,26	0,30
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)		
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)	0,15	0,17

6.14.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	2,723	0,085
IC	Ionenchromatographie (IC)	1	2,700	
	HPLC + IC	13	2,720	0,080
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	2,796	0,346
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	17	2,718	0,251
	alle herkömmlichen Verfahren	34	2,735	0,193
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	2,700	0,243
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,360	0,386





6.15 Flüchtige Säure [g/L]

6.15.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	Gerhardt SO ₂ korr.	0,450	0,0210	0,76	0,74	
07	Halbmikro SO ₂ korr.	0,372	-0,0570	-2,07	-1,99	
10	Halbmikro SO ₂ korr.	0,379	-0,0500	-1,81	-1,75	
12	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,330	-0,0990	-3,59	-3,46	
13	Gerhardt SO ₂ korr.	0,453	0,0240	0,87	0,84	
20	Gerhardt SO ₂ korr.	0,510	0,0810	2,94	2,84	
21	Halbmikro SO ₂ unber.	0,570	0,1410	5,12	4,93	
24	OIV o. SO ₂ -korr.	0,420	-0,0090	-0,33	-0,32	
25	Gerhardt SO ₂ korr.	0,270	-0,1590	-5,77	-5,56	(**)
26	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,490	0,0610	2,21	2,13	
28	Wädenswil SO ₂ korr.	0,355	-0,0740	-2,68	-2,59	
29	Gerhardt SO ₂ korr.	0,360	-0,0690	-2,50	-2,42	
30	Gerhardt SO ₂ korr.	0,420	-0,0090	-0,33	-0,32	
31	Halbmikro SO ₂ korr.	0,438	0,0090	0,33	0,32	
32	Halbmikro SO ₂ unber.	0,480	0,0510	1,85	1,78	
37	Halbmikro SO ₂ unber.	0,534	0,1050	3,81	3,68	
38	Gerhardt SO ₂ korr.	0,405	-0,0240	-0,87	-0,84	
39	Gerhardt SO ₂ korr.	0,454	0,0250	0,91	0,88	
40	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,591	0,1620	5,88	5,67	(**)
41	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,481	0,0520	1,89	1,82	
42	Halbmikro SO ₂ unber.	0,500	0,0710	2,58	2,48	
44	Halbmikro SO ₂ korr.	0,450	0,0210	0,76	0,74	
45	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,687	0,2580	9,36	9,03	(*)
47	Gerhardt SO ₂ korr.	0,780	0,3510	12,73	12,29	(*)
49	Gerhardt SO ₂ unber.	0,582	0,1530	5,55	5,35	
50	Halbmikro SO ₂ korr.	0,321	-0,1080	-3,92	-3,78	
56	Rentschler mod. korr.	0,332	-0,0970	-3,52	-3,39	
57	Halbmikro SO ₂ korr.	0,442	0,0128	0,46	0,45	
58	OIV SO ₂ -korr.	0,490	0,0610	2,21	2,13	
60	Wädenswil SO ₂ unber.	0,600	0,1710	6,20	5,98	(***)
63	Gerhardt SO ₂ korr.	0,640	0,2110	7,65	7,38	(**)
64	Halbmikro SO ₂ unber.	0,500	0,0710	2,58	2,48	
66	Wädenswil SO ₂ unber.	0,560	0,1310	4,75	4,59	
68	Wädenswil SO ₂ unber.	0,480	0,0510	1,85	1,78	
81	Halbmikro SO ₂ unber.	0,390	-0,0390	-1,41	-1,36	
88	OIV SO ₂ -korr.	0,614	0,1850	6,71	6,47	(**)
89	Halbmikro SO ₂ korr.	0,347	-0,0820	-2,97	-2,87	
101	Halbmikro SO ₂ unber.	0,600	0,1710	6,20	5,98	(***)

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

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

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

6.15.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
202	FTIR	0,460	0,0141	0,50	0,16	
203	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
204	FTIR	0,462	0,0161	0,57	0,18	
205	FTIR	0,420	-0,0259	-0,91	-0,29	
206	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
208	FTIR	0,190	-0,2559	-8,98	-2,87	
209	FTIR	0,310	-0,1359	-4,77	-1,53	
210	FTIR	0,265	-0,1809	-6,35	-2,03	
211	FTIR	0,480	0,0341	1,20	0,38	
214	FTIR	0,390	-0,0559	-1,96	-0,63	
215	FTIR	0,290	-0,1559	-5,47	-1,75	
216	FTIR	0,300	-0,1459	-5,12	-1,64	
217	FTIR	0,370	-0,0759	-2,66	-0,85	
218	FTIR	0,290	-0,1559	-5,47	-1,75	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

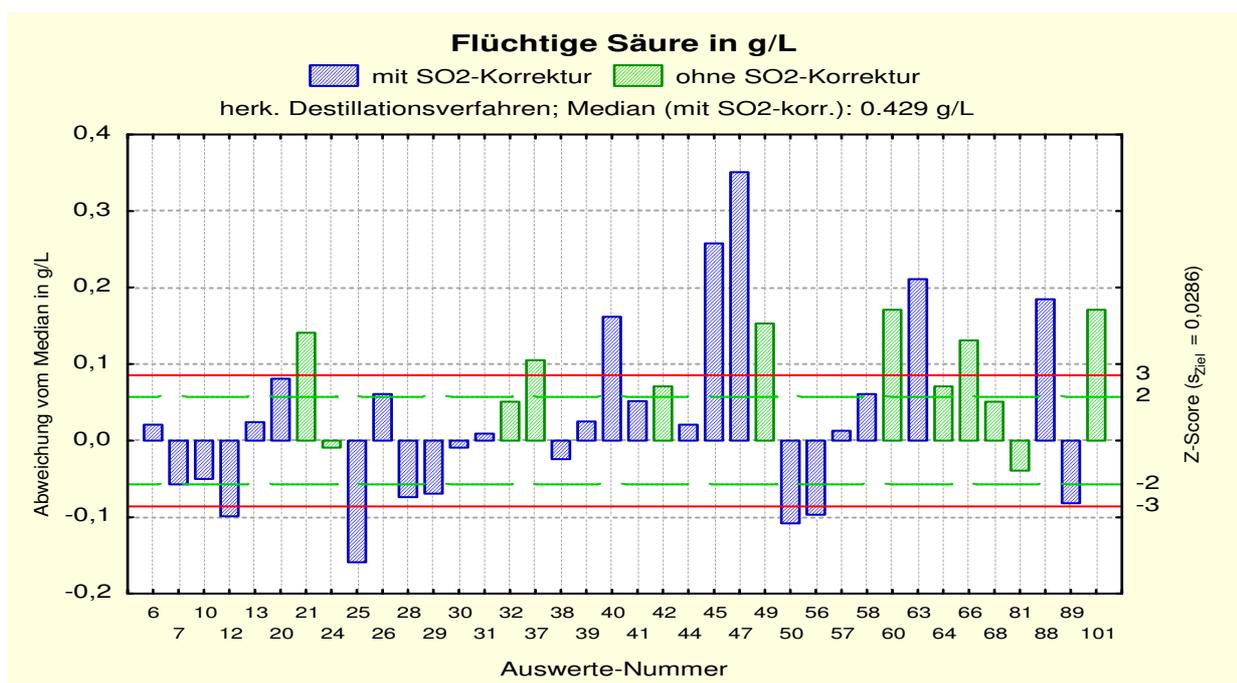
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	0,590	0,1441	5,06	1,62	
220	FTIR	0,380	-0,0659	-2,31	-0,74	
221	FTIR	0,400	-0,0459	-1,61	-0,52	
223	FTIR	0,440	-0,0059	-0,21	-0,07	
224	FTIR	0,260	-0,1859	-6,53	-2,09	
225	FTIR	0,399	-0,0469	-1,65	-0,53	
226	FTIR	0,290	-0,1559	-5,47	-1,75	
227	FTIR	0,510	0,0641	2,25	0,72	
228	FTIR	0,250	-0,1959	-6,88	-2,20	
229	FTIR	0,397	-0,0489	-1,72	-0,55	
231	FTIR	0,390	-0,0559	-1,96	-0,63	
232	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
234	FTIR	0,320	-0,1259	-4,42	-1,41	
235	FTIR	0,560	0,1141	4,01	1,28	
236	FTIR	0,390	-0,0559	-1,96	-0,63	
237	FTIR	0,520	0,0741	2,60	0,83	
240	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
241	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
242	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
243	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
244	FTIR	0,460	0,0141	0,50	0,16	
245	FTIR	0,550	0,1041	3,65	1,17	
246	FTIR	0,450	0,0041	0,14	0,05	
247	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
249	FTIR	0,480	0,0341	1,20	0,38	
250	FTIR	0,120	-0,3259	-11,44	-3,66	
251	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
252	FTIR	0,350	-0,0959	-3,37	-1,08	
254	FTIR	0,440	-0,0059	-0,21	-0,07	
256	FTIR	0,330	-0,1159	-4,07	-1,30	
257	FTIR	0,490	0,0441	1,55	0,49	
258	FTIR	0,330	-0,1159	-4,07	-1,30	
260	FTIR	0,400	-0,0459	-1,61	-0,52	
261	FTIR	0,320	-0,1259	-4,42	-1,41	
262	FTIR	0,240	-0,2059	-7,23	-2,31	
263	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
264	FTIR	0,390	-0,0559	-1,96	-0,63	
265	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
266	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
267	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
268	FTIR	0,360	-0,0859	-3,02	-0,96	
269	FTIR	0,590	0,1441	5,06	1,62	
270	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
271	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
272	FTIR	0,330	-0,1159	-4,07	-1,30	
273	FTIR	0,420	-0,0259	-0,91	-0,29	
274	FTIR	0,500	0,0541	1,90	0,61	
275	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
276	FTIR	0,360	-0,0859	-3,02	-0,96	
277	FTIR	0,320	-0,1259	-4,42	-1,41	
278	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
279	FTIR	0,430	-0,0159	-0,56	-0,18	
280	FTIR	0,250	-0,1959	-6,88	-2,20	
281	FTIR	0,460	0,0141	0,50	0,16	
282	FTIR	0,470	0,0241	0,85	0,27	
283	FTIR	0,340	-0,1059	-3,72	-1,19	
319	FTIR	0,300	-0,1459	-5,12	-1,64	
320	FTIR	0,370	-0,0759	-2,66	-0,85	
336	FTIR	0,390	-0,0559	-1,96	-0,63	
337	FTIR	0,370	-0,0759	-2,66	-0,85	
349	FTIR	0,410	-0,0359	-1,26	-0,40	
364	FTIR	0,420	-0,0259	-0,91	-0,29	
368	FTIR	0,395	-0,0509	-1,79	-0,57	

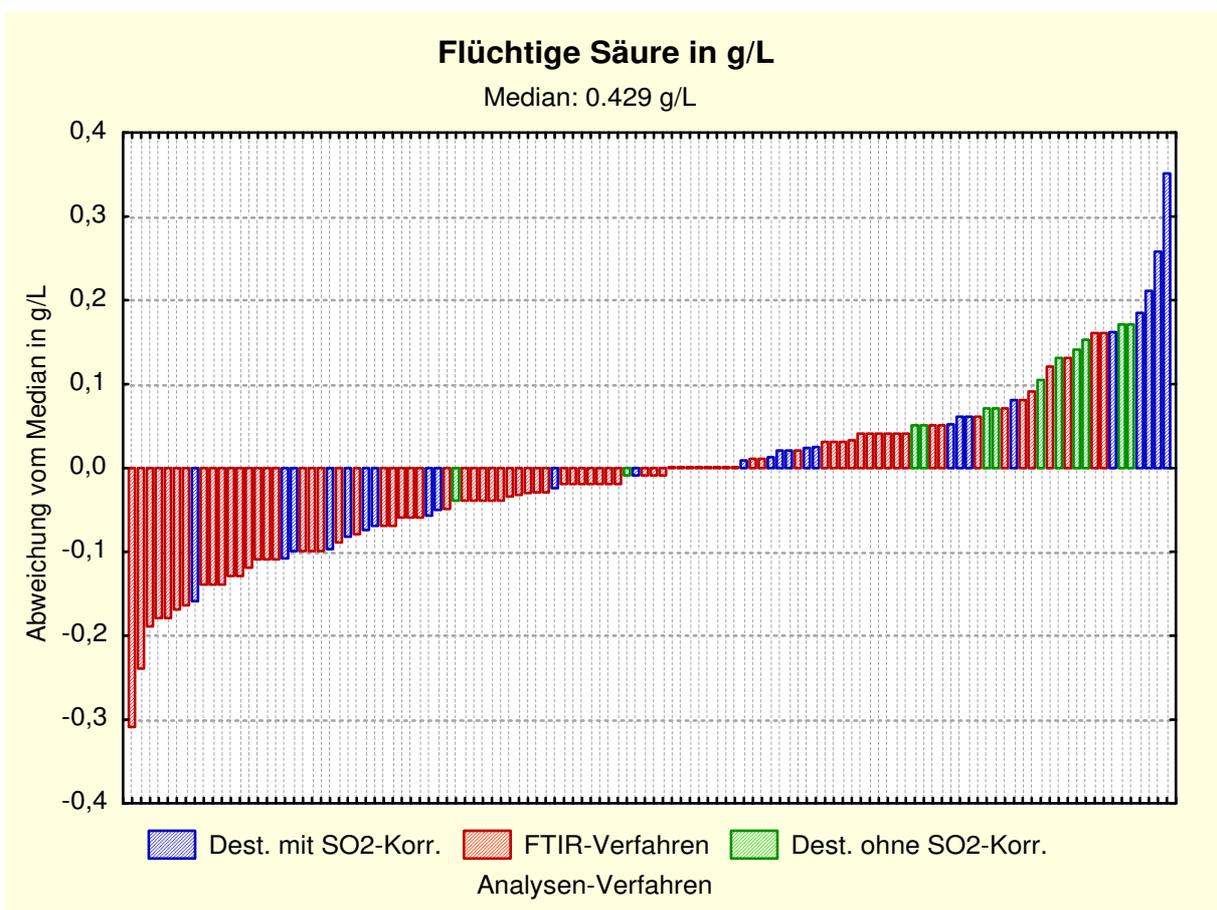
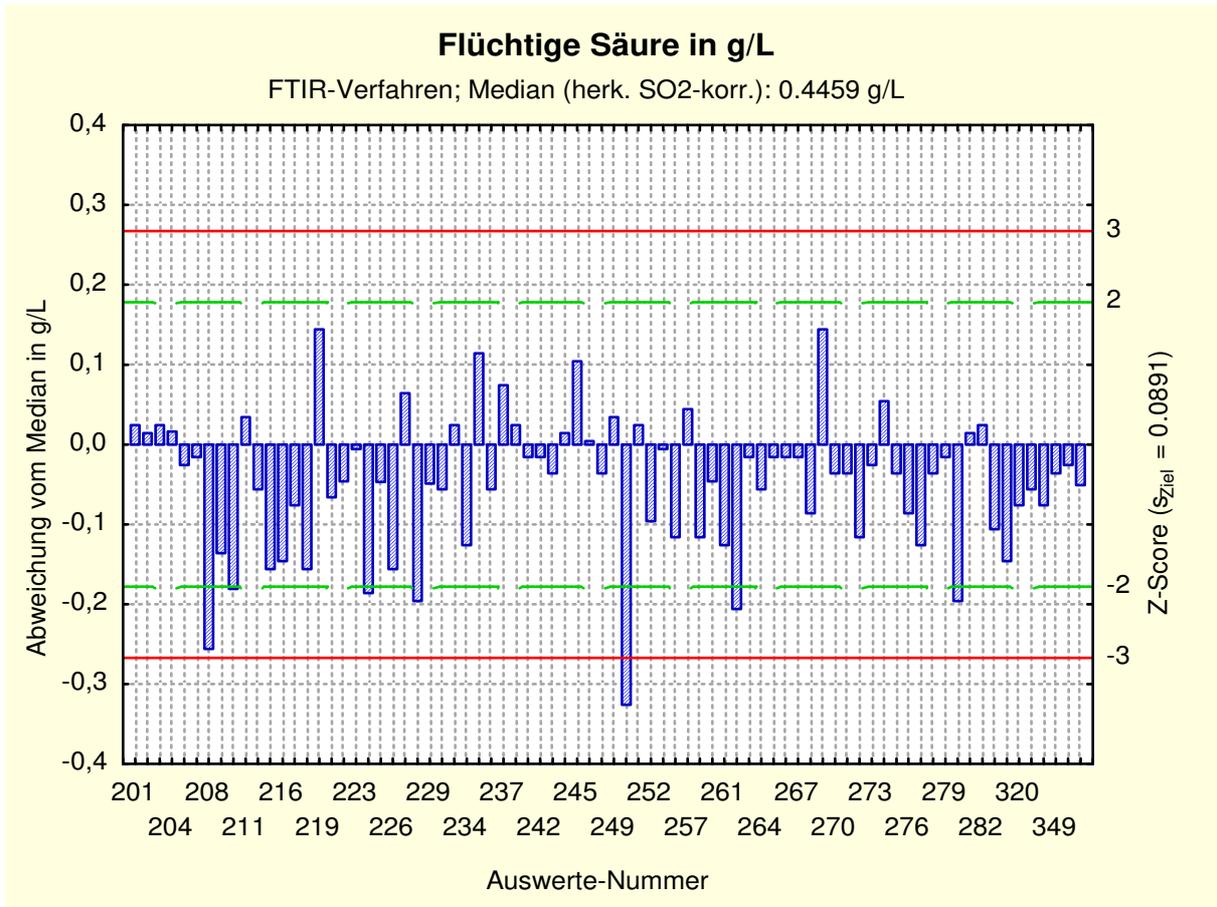
6.15.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO₂-Korrektur

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	20
Minimalwert	0,270	0,321
Mittelwert	0,4331	0,4139
Median	0,4399	0,4290
Maximalwert	0,640	0,510
Standardabweichung (s _L)	0,094	0,060
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,019	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,028	0,028
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (S _{Ü FTIR})	0,089	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	3,34	2,18
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	3,29	2,11
Quotient (s _L /S _{Ü FTIR})	1,37	0,67
Quotient (u _M /s _H)	0,68	0,49
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,67	0,47
Quotient (u _M /S _{Ü FTIR})	0,27	0,15

6.15.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,5111	0,0623
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	7	0,3927	0,0578
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,5467	0,0693
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,3550	
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,5820	
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	5	0,5158	0,1515
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	10	0,4618	0,1321
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	2	0,5520	0,0994
OIV o. SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 ohne SO ₂ -Korrektur	1	0,4200	
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO ₂ -			
SO ₂ -korr	Einfluss korrigiert	1	0,3320	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	26	0,4468	0,1153
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,3997	0,0794





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

Bewertungsbasis HPLC + Enzymatik

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,320	-0,080	-3,08	
06	enzymat. autom.	0,392	-0,008	-0,31	
07	enzymat. autom.	0,355	-0,045	-1,73	
11	enzymat. autom.	0,460	0,060	2,31	
14	enzymat. autom.	0,470	0,070	2,70	
15	enzymat. autom.	0,390	-0,010	-0,39	
22	NMR	0,280	-0,120	-4,62	
25	enzymat. autom.	0,400	0,000	0,00	
26	HPLC	0,460	0,060	2,31	
29	enzymat. autom.	0,430	0,030	1,16	
31	enzymat. autom.	0,400	0,000	0,00	
38	enzymat. autom.	0,370	-0,030	-1,16	
39	HPLC	0,430	0,030	1,16	
41	enzymat. autom.	0,365	-0,035	-1,35	
44	enzymat. autom.	0,400	0,000	0,00	
45	enzymat. autom.	0,370	-0,030	-1,16	
47	enzymat. autom.	0,470	0,070	2,70	
48	enzymat. autom.	0,430	0,030	1,16	
50	enzymat. Hand	0,283	-0,117	-4,50	
53	enzymat. autom.	0,490	0,090	3,47	
56	enzymat. autom.	0,375	-0,025	-0,96	
57	enzymat. autom.	0,410	0,010	0,39	
58	enzymat. autom.	0,360	-0,040	-1,54	
59	HPLC	0,336	-0,064	-2,46	
61	enzymat. autom.	0,570	0,170	6,55	(**)
63	enzymat. autom.	0,387	-0,013	-0,50	
69	enzymat. autom.	0,410	0,010	0,39	
89	NMR	0,319	-0,081	-3,12	
92	enzymat. autom.	0,400	0,000	0,00	
94	HPLC	0,340	-0,060	-2,31	
104	NMR	0,321	-0,079	-3,04	
105	NMR	0,336	-0,064	-2,46	
106	NMR	0,296	-0,104	-4,02	
107	NMR	0,334	-0,066	-2,55	
212	FTIR	0,380	-0,020	-0,77	
222	FTIR	0,230	-0,170	-6,55	(***)
241	FTIR	0,270	-0,130	-5,01	(***)
259	FTIR	0,470	0,070	2,70	
260	FTIR	0,530	0,130	5,01	(***)

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

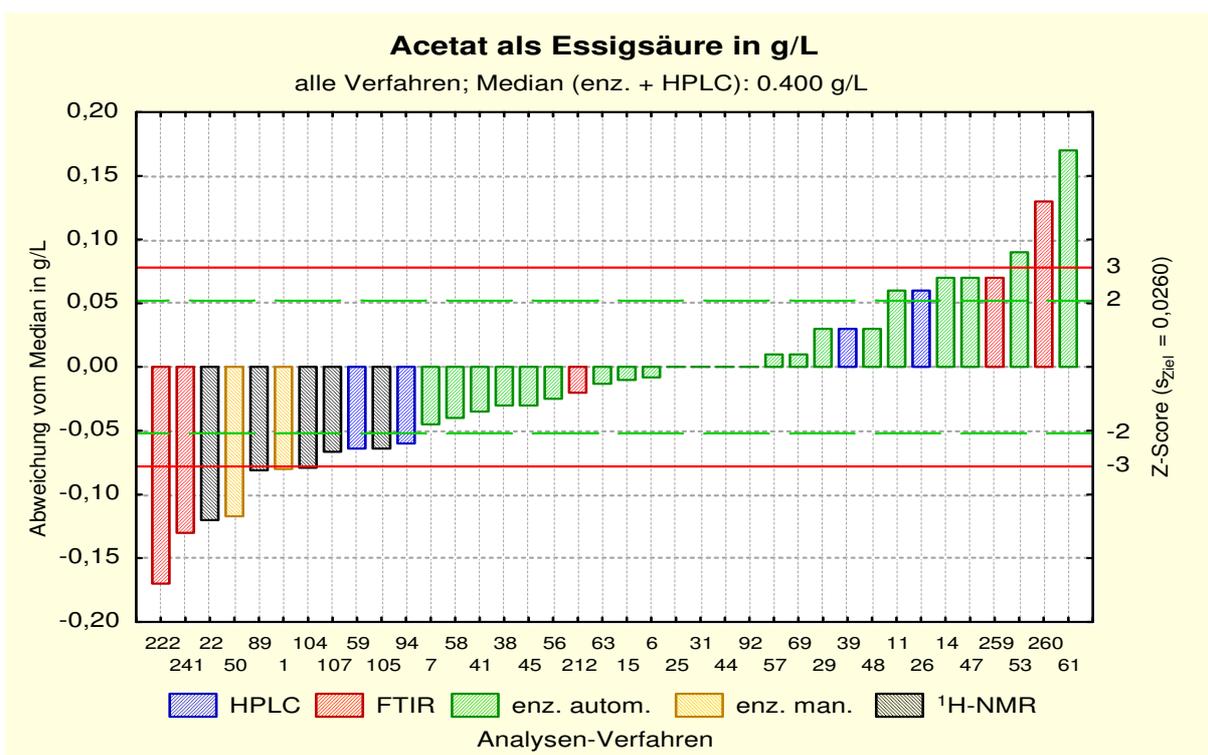
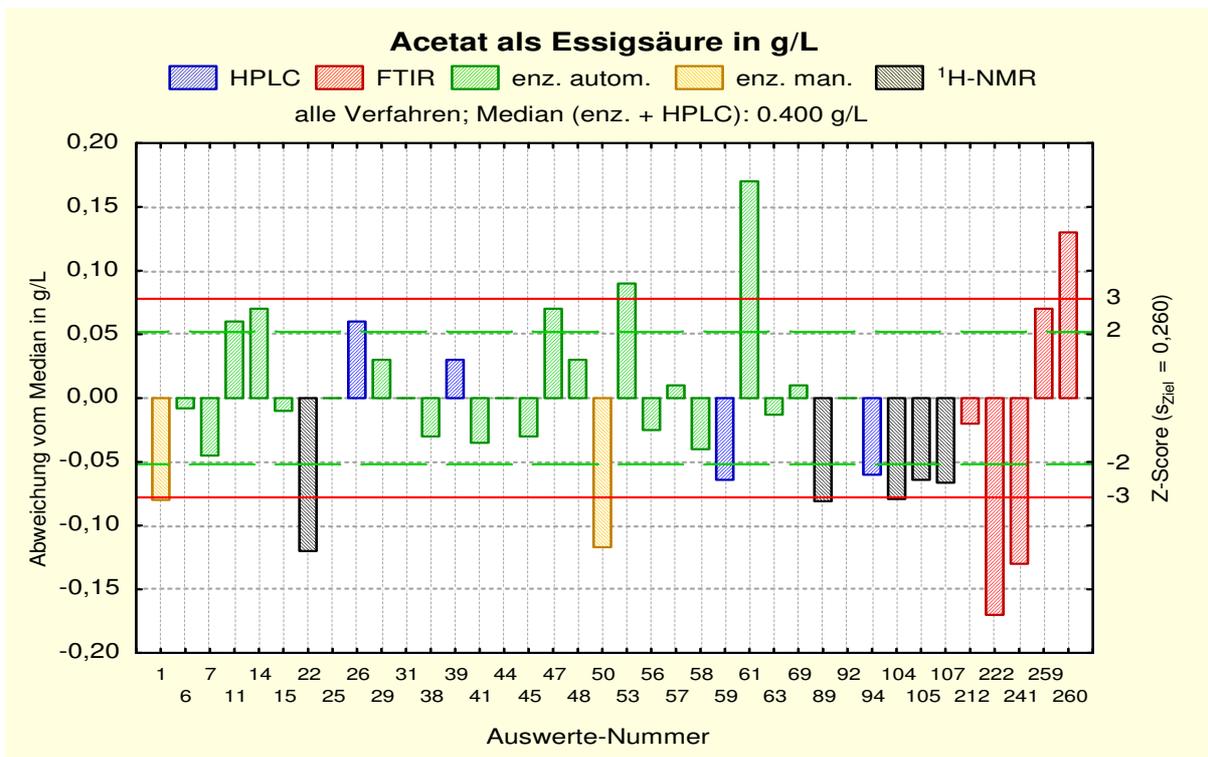
Mit (***) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten Median der herkömmlichen Werte ab.

6.16.2 Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	27
Minimalwert	0,283	0,283
Mittelwert	0,403	0,396
Median	0,400	0,400
Maximalwert	0,570	0,490
Standardabweichung (s_L)	0,058	0,049
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,026	0,026
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,25	1,90
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,42	0,36
Quotient ($u_M / s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M / s_{\bar{U}\ FTIR}$)		

6.16.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,3915	0,0714
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	22	0,4085	0,0440
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,3015	0,0297
	HPLC + enzymatische Verfahren	28	0,4001	0,0535
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	5	0,3760	0,1447
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	0,3144	0,0246



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

Bewertungsbasis ohne NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,84	0,000	0,00	0,00	
02	IC	2,60	-0,240	-1,75	-2,67	
06	HPLC	2,77	-0,070	-0,51	-0,78	
07	HPLC	2,89	0,050	0,36	0,56	
08	HPLC	2,64	-0,200	-1,46	-2,22	
21	HPLC	2,62	-0,220	-1,60	-2,44	
22	NMR	2,86	0,020	0,15	0,22	
24	HPLC	2,70	-0,140	-1,02	-1,55	
26	HPLC	2,74	-0,100	-0,73	-1,11	
39	HPLC	2,84	0,000	0,00	0,00	
50	HPLC	3,04	0,200	1,46	2,22	
59	HPLC	2,98	0,145	1,06	1,61	
63	enzymat. autom.	2,87	0,026	0,19	0,29	
81	enzymat. Hand	2,94	0,100	0,73	1,11	
94	HPLC	3,22	0,380	2,77	4,22	
104	NMR	2,81	-0,026	-0,19	-0,29	
105	NMR	2,89	0,050	0,36	0,56	
106	NMR	2,55	-0,289	-2,11	-3,21	
107	NMR	2,92	0,078	0,57	0,87	

6.17.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,84	0,037	0,28	0,42	
04	enz.(L-), autom.	2,75	-0,053	-0,39	-0,59	
06	enz.(L-), autom.	2,77	-0,033	-0,24	-0,36	
07	enz.(L-), autom.	2,81	0,007	0,06	0,08	
10	enz.(L-), autom.	2,64	-0,163	-1,20	-1,82	
11	enz.(L-), autom.	2,93	0,127	0,94	1,43	
15	enz.(L-), autom.	2,60	-0,203	-1,49	-2,27	
25	enz.(L-), autom.	2,69	-0,113	-0,83	-1,26	
29	enz.(L-), autom.	3,20	0,397	2,93	4,46	
31	enz.(L-), autom.	2,88	0,077	0,57	0,87	
38	enz.(L-), autom.	2,93	0,127	0,94	1,43	
40	enz.(L-), autom.	2,77	-0,033	-0,24	-0,36	
41	enz.(L-), autom.	2,81	0,002	0,02	0,03	
42	enz.(L-), autom.	2,78	-0,023	-0,17	-0,25	
44	enz.(L-), autom.	2,73	-0,073	-0,53	-0,81	
45	enz.(L-), autom.	3,04	0,237	1,75	2,67	
47	enz.(L-), autom.	3,33	0,527	3,89	5,92	(**)
48	enz.(L-), autom.	2,90	0,097	0,72	1,09	
56	enz.(L-), autom.	2,78	-0,023	-0,17	-0,25	
57	enz.(L-), autom.	3,15	0,347	2,56	3,90	
58	enz.(L-), autom.	2,87	0,067	0,50	0,76	
59	enz.(L-), autom.	2,73	-0,069	-0,50	-0,77	
61	enz.(L-), autom.	3,30	0,497	3,66	5,58	(**)
63	enz.(L-), autom.	2,80	-0,003	-0,02	-0,03	
64	enz.(L-) Hand	2,79	-0,013	-0,09	-0,14	
69	enz.(L-), autom.	2,94	0,137	1,01	1,54	
81	enz.(L-) Hand	2,86	0,057	0,42	0,65	
88	enz.(L-), autom.	2,70	-0,103	-0,76	-1,15	
92	enz.(L-), autom.	2,86	0,057	0,42	0,65	
101	enz.(L-) Hand	2,77	-0,037	-0,27	-0,41	

(**) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

6.17.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,78	-0,060	-0,44	-0,28	
202	FTIR	2,61	-0,230	-1,68	-1,06	
203	FTIR	2,37	-0,470	-3,42	-2,16	
204	FTIR	2,76	-0,078	-0,57	-0,36	
205	FTIR	2,49	-0,350	-2,55	-1,61	
206	FTIR	2,55	-0,290	-2,11	-1,33	
208	FTIR	2,30	-0,540	-3,93	-2,48	
211	FTIR	2,80	-0,040	-0,29	-0,18	
212	FTIR	3,49	0,650	4,73	2,98	
214	FTIR	3,90	1,060	7,72	4,86	
215	FTIR	2,89	0,050	0,36	0,23	
216	FTIR	2,79	-0,050	-0,36	-0,23	
217	FTIR	3,20	0,360	2,62	1,65	
218	FTIR	2,90	0,060	0,44	0,28	
219	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
220	FTIR	2,81	-0,030	-0,22	-0,14	
221	FTIR	2,75	-0,090	-0,66	-0,41	
222	FTIR	3,16	0,320	2,33	1,47	
223	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
224	FTIR	2,54	-0,300	-2,19	-1,38	
225	FTIR	2,78	-0,060	-0,44	-0,28	
226	FTIR	3,20	0,360	2,62	1,65	
227	FTIR	2,86	0,020	0,15	0,09	
228	FTIR	2,66	-0,180	-1,31	-0,83	
229	FTIR	2,78	-0,060	-0,44	-0,28	
231	FTIR	2,93	0,090	0,66	0,41	
232	FTIR	2,95	0,110	0,80	0,50	
234	FTIR	2,94	0,100	0,73	0,46	
236	FTIR	2,93	0,090	0,66	0,41	
237	FTIR	3,10	0,260	1,89	1,19	
240	FTIR	2,97	0,130	0,95	0,60	
241	FTIR	2,80	-0,040	-0,29	-0,18	
242	FTIR	3,45	0,610	4,44	2,80	
243	FTIR	3,06	0,220	1,60	1,01	
244	FTIR	2,64	-0,200	-1,46	-0,92	
245	FTIR	3,22	0,380	2,77	1,74	
246	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
247	FTIR	3,43	0,590	4,30	2,71	
249	FTIR	2,40	-0,440	-3,20	-2,02	
250	FTIR	3,07	0,230	1,68	1,06	
252	FTIR	2,48	-0,360	-2,62	-1,65	
254	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
256	FTIR	3,09	0,250	1,82	1,15	
257	FTIR	3,11	0,270	1,97	1,24	
258	FTIR	2,98	0,140	1,02	0,64	
259	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
260	FTIR	2,70	-0,140	-1,02	-0,64	
261	FTIR	2,90	0,060	0,44	0,28	
262	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
264	FTIR	2,50	-0,340	-2,48	-1,56	
265	FTIR	3,29	0,450	3,28	2,06	
266	FTIR	2,24	-0,600	-4,37	-2,75	
267	FTIR	3,23	0,390	2,84	1,79	
268	FTIR	2,80	-0,040	-0,29	-0,18	
269	FTIR	2,52	-0,320	-2,33	-1,47	
270	FTIR	2,90	0,060	0,44	0,28	
271	FTIR	2,58	-0,260	-1,89	-1,19	
272	FTIR	3,10	0,260	1,89	1,19	
273	FTIR	2,69	-0,150	-1,09	-0,69	
274	FTIR	2,84	0,000	0,00	0,00	
275	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
276	FTIR	3,00	0,160	1,17	0,73	
277	FTIR	2,63	-0,210	-1,53	-0,96	
278	FTIR	2,54	-0,300	-2,19	-1,38	
279	FTIR	2,63	-0,210	-1,53	-0,96	
280	FTIR	3,20	0,360	2,62	1,65	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	2,52	-0,320	-2,33	-1,47	
282	FTIR	3,34	0,500	3,64	2,29	
283	FTIR	3,30	0,460	3,35	2,11	
319	FTIR	2,90	0,060	0,44	0,28	
320	FTIR	2,84	0,000	0,00	0,00	
336	FTIR	2,87	0,030	0,22	0,14	
337	FTIR	2,60	-0,240	-1,75	-1,10	
349	FTIR	2,20	-0,640	-4,66	-2,94	
364	FTIR	2,10	-0,740	-5,39	-3,39	

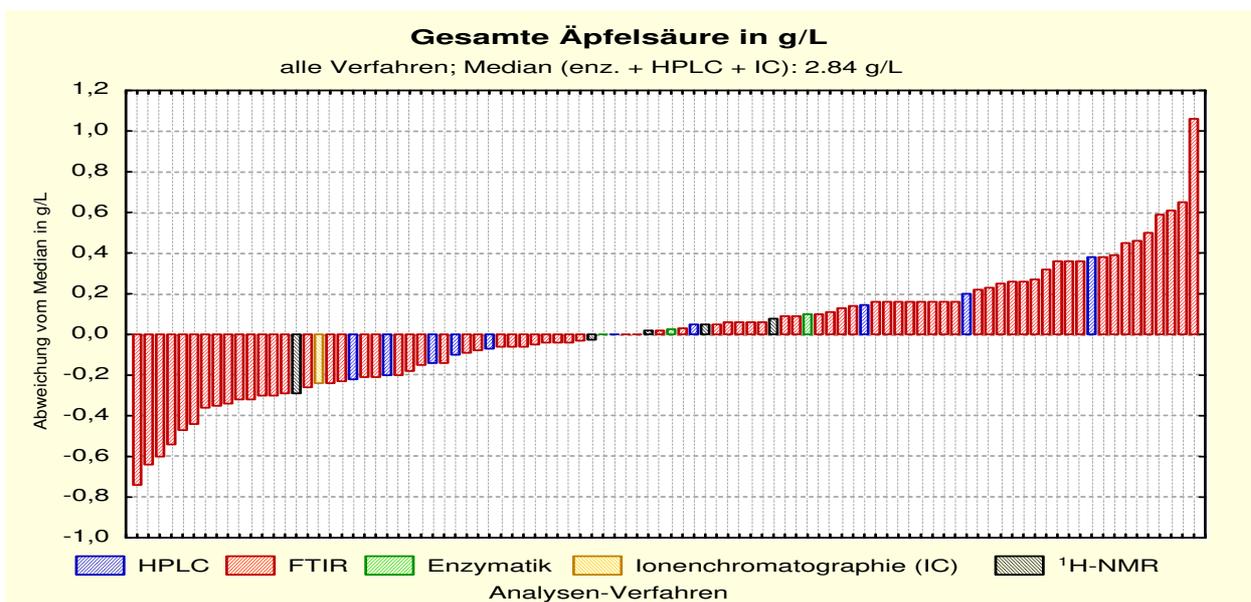
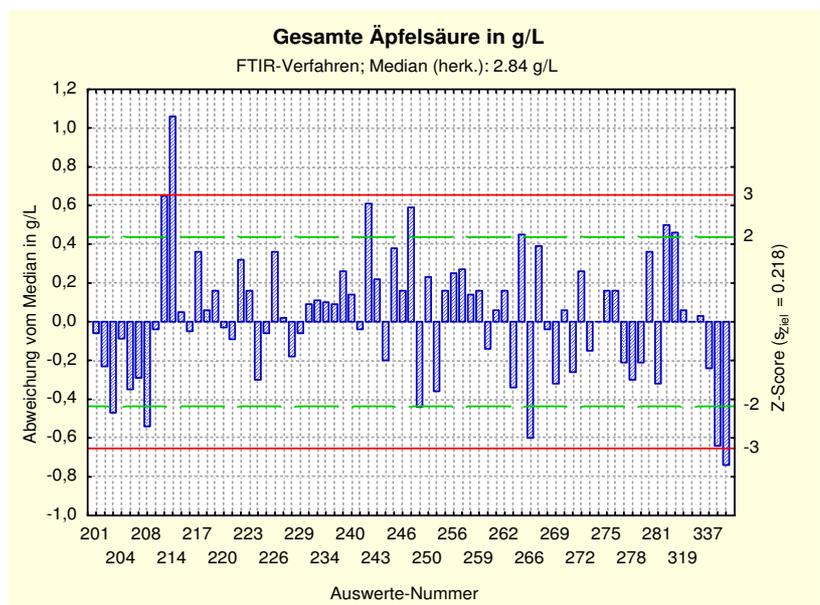
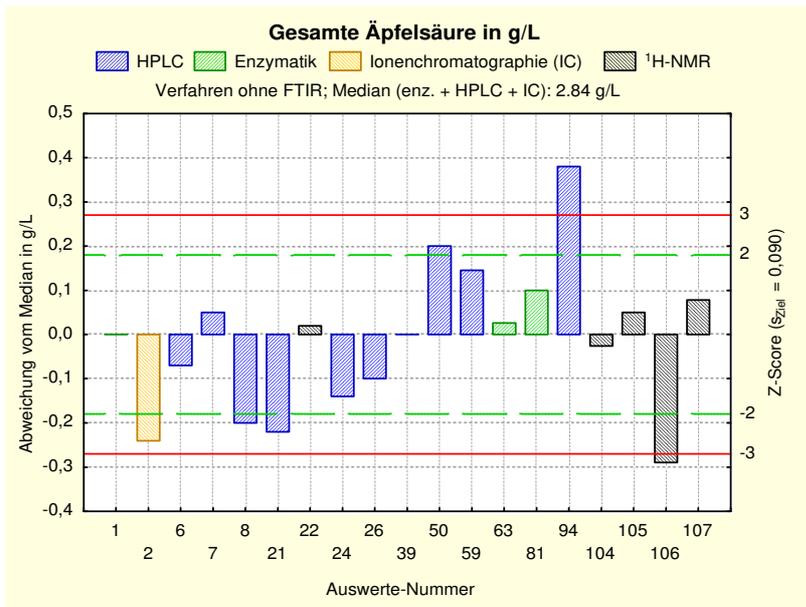
6.17.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

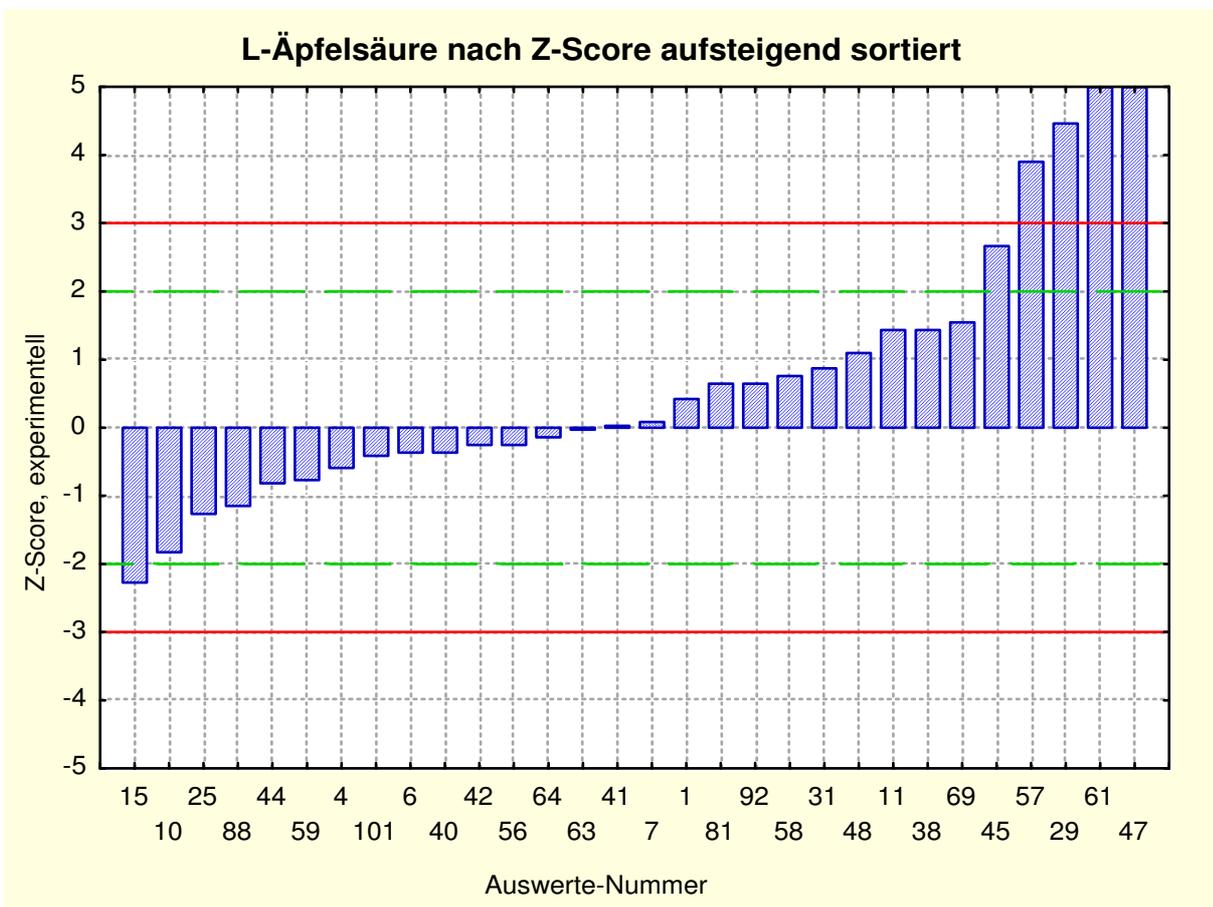
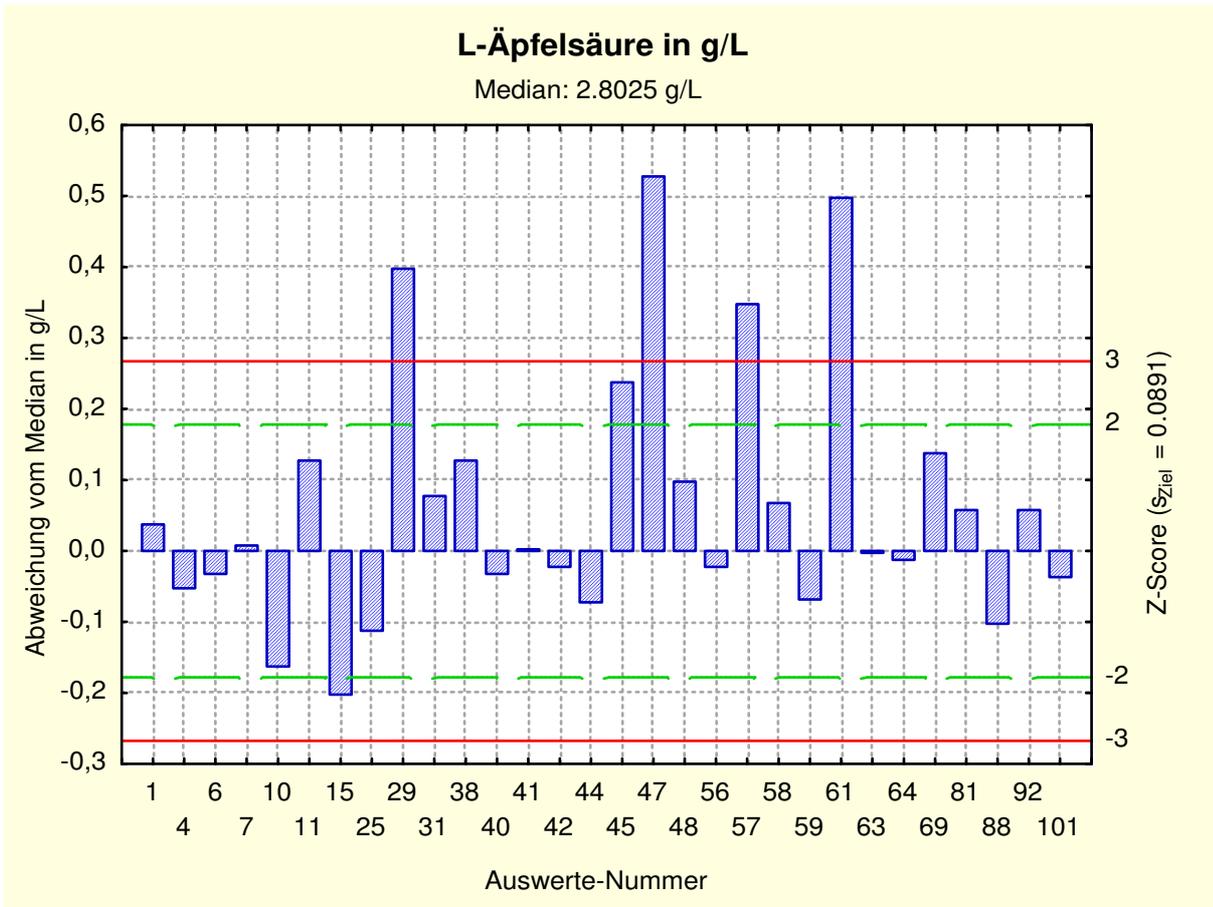
Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten incl. NMR ¹⁾	alle Daten excl. NMR	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	18	14	30	28
Minimalwert	2,60	2,60	2,60	2,60
Mittelwert	2,843	2,835	2,865	2,833
Median	2,850	2,840	2,808	2,803
Maximalwert	3,22	3,22	3,33	3,20
Standardabweichung (s _L)	0,155	0,175	0,179	0,136
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,037	0,047	0,033	0,026
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,138	0,137	0,136	0,136
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,090	0,090	0,089	0,089
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218	0,218		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,13	1,28	1,32	1,00
Quotient (s _L /s _{exp})	1,72	1,95	2,01	1,52
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,71	0,80		
Quotient (u _M /s _H)	0,27	0,34	0,24	0,19
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,40	0,52	0,37	0,29
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,17	0,22		

¹⁾ ohne Auswertenummer 106 (NMR) bei deren Einschluss sich die Streuungswerte erhöhen.

6.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	2,836	0,197
IC	Ionenchromatographie	1	2,600	
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	2,866	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	2	2,890	0,080
	herkömmliche Verfahren	14	2,826	0,176
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	2,863	0,306
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,818	0,140
enz.(L-), autom.	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	26	2,849	0,162
enz.(L-) Hand	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	4	2,814	0,049
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	30	2,839	0,137





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

6.18.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Bewertungsbasis ohne NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
06	enzymat. autom.	0,177	0,033	3,03	
07	HPLC	0,140	-0,004	-0,37	
10	enzymat. autom.	0,148	0,004	0,37	
21	HPLC	0,100	-0,044	-4,03	
22	NMR	0,150	0,006	0,55	
24	HPLC	0,100	-0,044	-4,03	
26	HPLC	<= 0			
39	HPLC	<0,2			
50	HPLC	0,060	-0,084	-7,70	(*)
59	HPLC	0,219	0,075	6,88	(**)
63	enzymat. autom.	0,168	0,024	2,20	
64	enzymat. Hand	0,185	0,041	3,76	
69	enzymat. autom.	0,100	-0,044	-4,03	
81	enzymat. Hand	0,216	0,072	6,60	(**)
88	enzymat. autom.	0,176	0,032	2,93	
92	enzymat. autom.	0,130	-0,014	-1,28	
94	HPLC	0,140	-0,004	-0,37	
101	enzymat. Hand	0,218	0,074	6,79	(**)
104	NMR	<0,2			
105	NMR	<0,2			
106	NMR	<0,2			
107	NMR	<0,2			

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

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

6.18.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enz.(L-) autom.	0,030	-0,040	-6,77	-1,93	
06	enz.(L-) autom.	0,064	-0,006	-1,02	-0,29	
10	enz.(L-) autom.	0,058	-0,013	-2,12	-0,60	
11	enz.(L-) autom.	0,150	0,080	13,54	3,86	
15	enz.(L-) autom.	<= 0				
25	enz.(L-) autom.	0,040	-0,030	-5,08	-1,45	
29	enz.(L-) autom.	0,100	0,030	5,08	1,45	
31	enz.(L-) autom.	<= 0				
38	enz.(L-) autom.	<= 0				
40	enz.(L-) autom.	0,270	0,200	33,85	9,65	(*)
41	enz.(L-) autom.	0,070	0,000	0,00	0,00	
42	enz.(L-) autom.	<= 0				
44	enz.(L-) autom.	<0,2				
45	enz.(L-) autom.	0,070	0,000	0,00	0,00	
47	enz.(L-) autom.	0,080	0,010	1,69	0,48	
48	enz.(L-) autom.	<= 0				
56	enz.(L-) autom.	0,080	0,010	1,69	0,48	
57	enz.(L-) autom.	0,070	0,000	0,00	0,00	
58	enz.(L-) autom.	0,060	-0,010	-1,69	-0,48	
59	enz.(L-) autom.	0,079	0,009	1,52	0,43	
61	enz.(L-) autom.	0,100	0,030	5,08	1,45	
63	enz.(L-) autom.	0,065	-0,005	-0,85	-0,24	
64	enz.(L-) Hand	0,068	-0,003	-0,42	-0,12	
69	enz.(L-) autom.	0,017	-0,053	-8,90	-2,54	
81	enz.(L-) Hand	0,089	0,019	3,22	0,92	
88	enz.(L-) autom.	0,074	0,004	0,68	0,19	
92	enz.(L-) autom.	0,060	-0,010	-1,69	-0,48	
101	enz.(L-) Hand	0,084	0,014	2,43	0,69	

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

6.18.3 FTIR-Laboregebnisse Gesamte Milchsäure

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,180	0,036			
202	FTIR	0,010	-0,134			(*)
203	FTIR	0,040	-0,104			(*)
204	FTIR	-0,125	-0,269			(*)
205	FTIR	0,030	-0,114			(*)
206	FTIR	0,320	0,176			(*)
208	FTIR	0,300	0,156			(*)
211	FTIR	0,110	-0,034			
212	FTIR	0,390	0,246			(*)
214	FTIR	0,100	-0,044			
215	FTIR	0,180	0,036			
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	0,120	-0,024			
218	FTIR	0,130	-0,014			
219	FTIR	<= 0				
220	FTIR	0,370	0,226			(*)
221	FTIR	0,370	0,226			(*)
222	FTIR	0,110	-0,034			
223	FTIR	<= 0				
224	FTIR	<= 0				
225	FTIR	0,360	0,216			(*)
226	FTIR	<= 0				
227	FTIR	-0,180	-0,324			(*)
228	FTIR	0,170	0,026			
229	FTIR	0,190	0,046			
231	FTIR	0,320	0,176			(*)
232	FTIR	-0,090	-0,234			(*)
234	FTIR	0,080	-0,064			(**)
236	FTIR	<= 0				
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	0,010	-0,134			(*)
241	FTIR	-0,100	-0,244			(*)
242	FTIR	0,470	0,326			(*)
243	FTIR	0,140	-0,004			
244	FTIR	0,170	0,026			
245	FTIR	0,350	0,206			(*)
246	FTIR	0,100	-0,044			
247	FTIR	0,270	0,126			(*)
249	FTIR	<= 0				
250	FTIR	0,450	0,306			(*)
252	FTIR	<= 0				
254	FTIR	-0,100	-0,244			(*)
256	FTIR	0,090	-0,054			(**)
257	FTIR	-0,130	-0,274			(*)
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	0,070	-0,074			(*)
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,200	0,056			
262	FTIR	<= 0				
264	FTIR	<= 0				
265	FTIR	0,420	0,276			(*)
266	FTIR	0,360	0,216			(*)
267	FTIR	0,050	-0,094			(*)
268	FTIR	0,300	0,156			(*)
269	FTIR	<= 0				
270	FTIR	0,200	0,056			
271	FTIR	0,300	0,156			(*)
272	FTIR	0,300	0,156			(*)
273	FTIR	0,010	-0,134			(*)
274	FTIR	0,710	0,566			(*)
275	FTIR	0,100	-0,044			
276	FTIR	<= 0				
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	-0,050	-0,194			(*)

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

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
279	FTIR	-0,020	-0,164			(*)
280	FTIR	0,500	0,356			(*)
281	FTIR	0,290	0,146			(*)
282	FTIR	0,100	-0,044			
283	FTIR	<= 0				
319	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,370	0,226			(*)
336	FTIR	<= 0				
337	FTIR	<= 0				
349	FTIR	0,400	0,256			(*)
364	FTIR	<= 0				

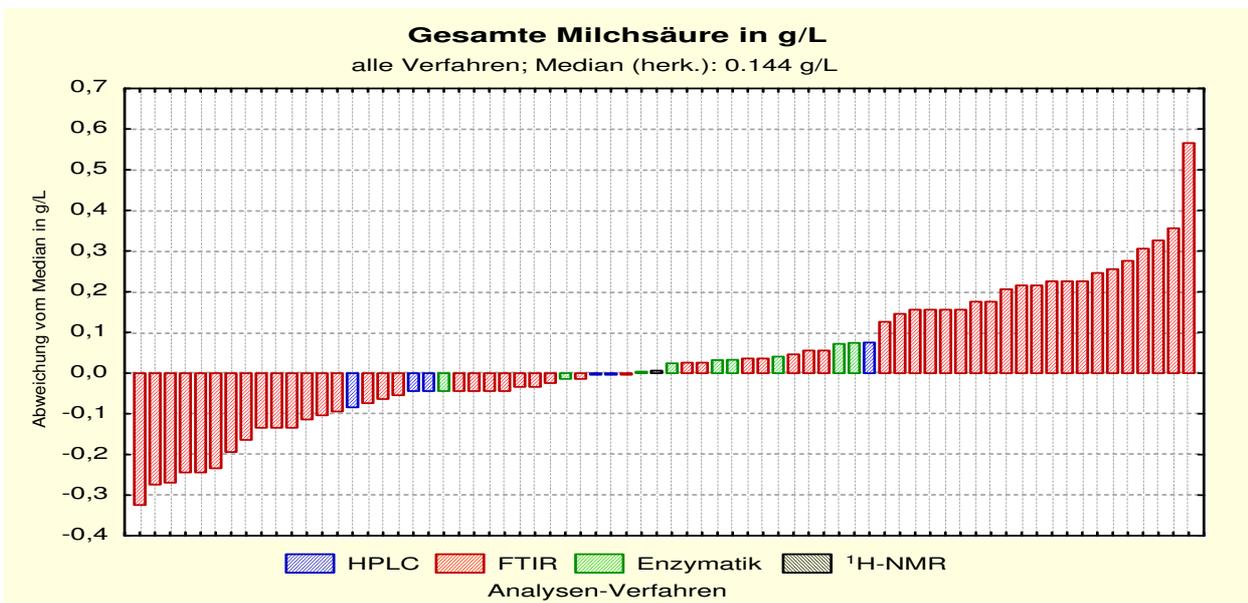
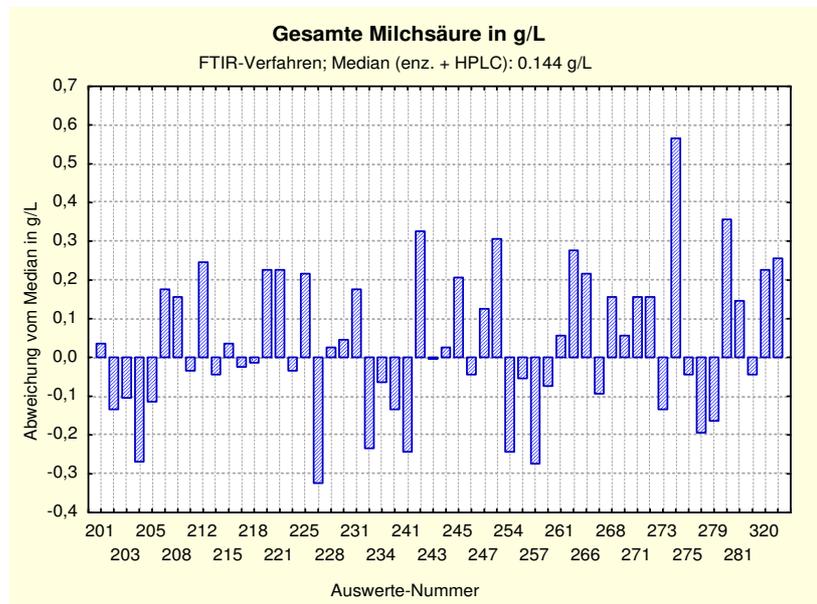
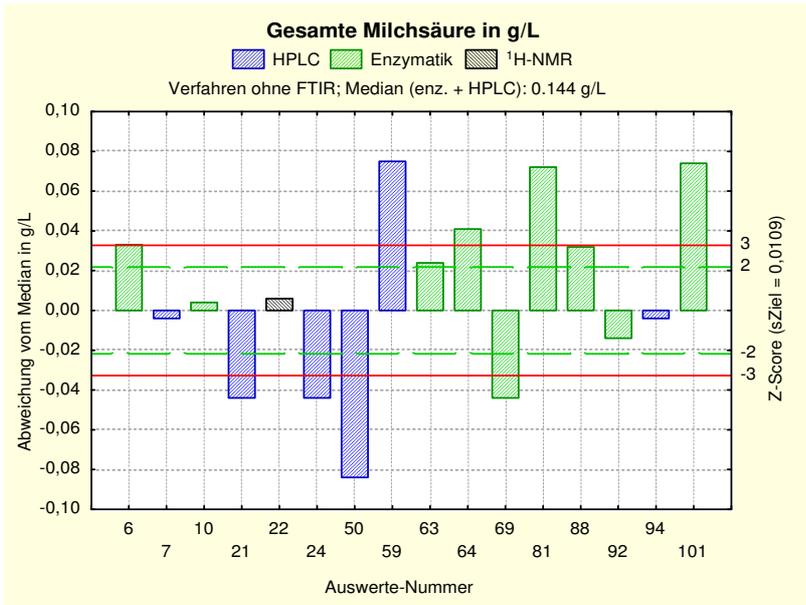
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

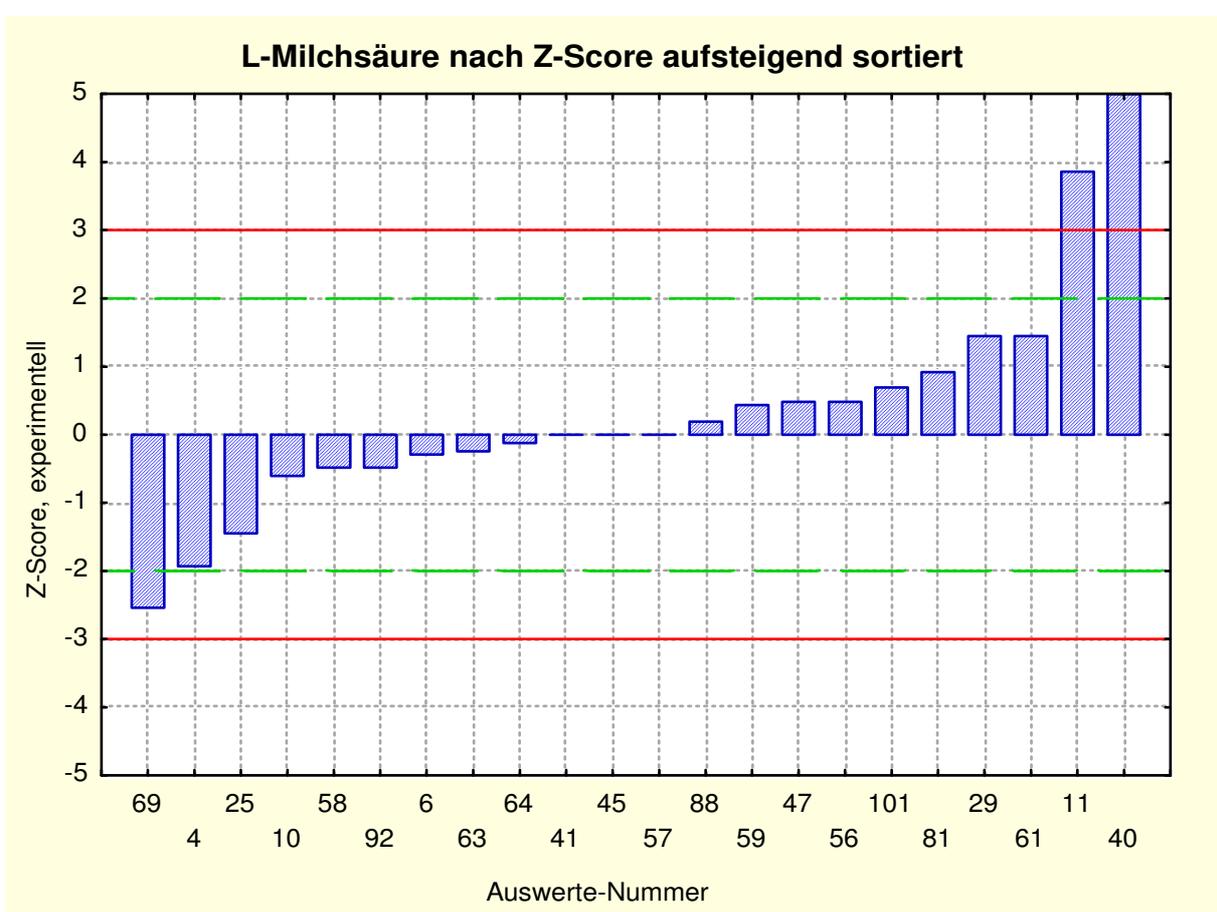
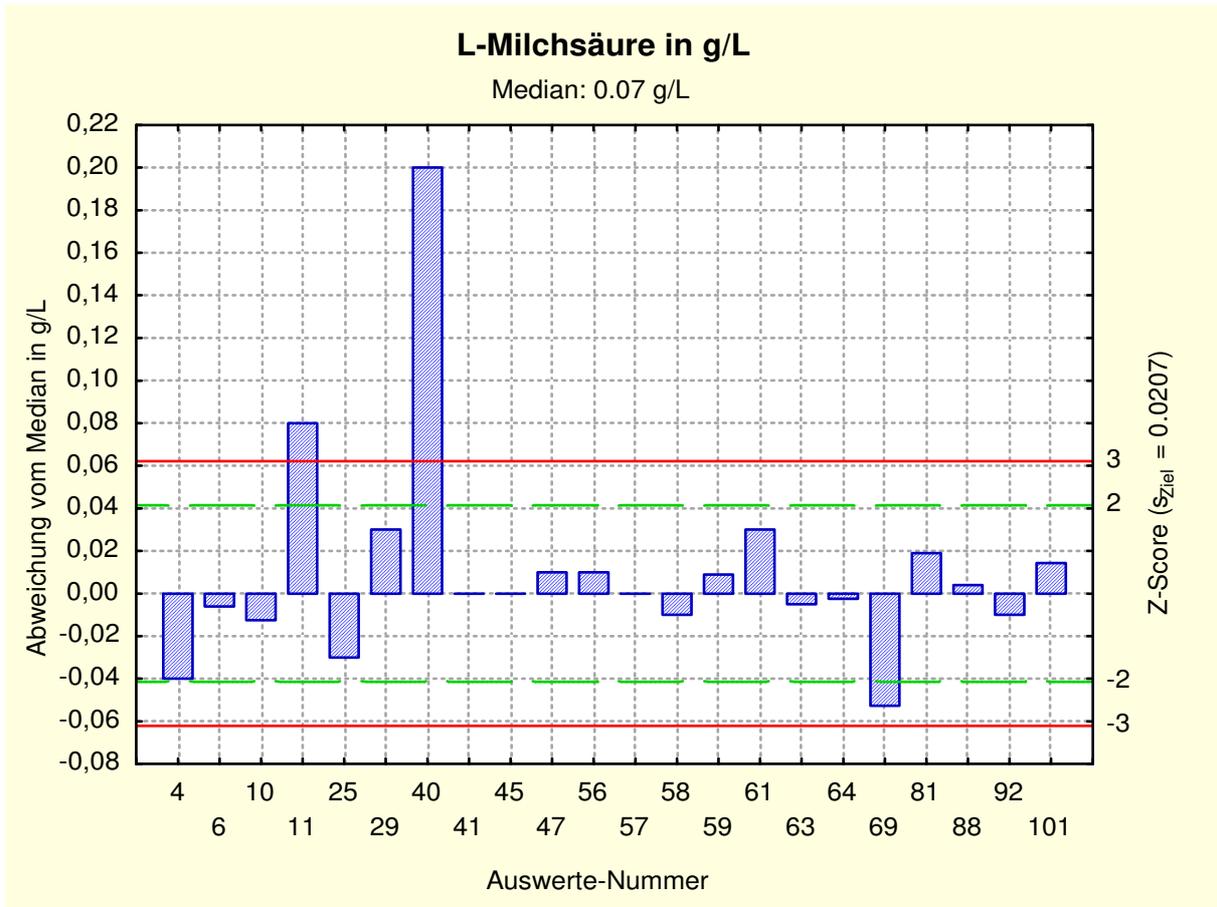
6.18.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L für :	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Werte	ber. Werte	alle Daten
Gültige Werte	15	12	21
Minimalwert	0,10	0,10	0,02
Mittelwert	0,158	0,143	0,072
Median	0,150	0,144	0,070
Maximalwert	0,22	0,19	0,15
Standardabweichung (s_L)	0,041	0,031	0,027
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011	0,009	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,011	0,011	0,006
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})			0,021
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü FTIR}$)	(0,209)	(0,209)	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	3,66	2,83	4,59
Quotient (s_L/s_{exp})			1,31
Quotient ($s_L/s_{Ü FTIR}$)	(0,20)	(0,15)	
Quotient (u_M/s_H)	0,94	0,82	1,00
Quotient ($u_M/s_{exp herk.}$)			0,29
Quotient ($u_M/s_{Ü FTIR}$)	(0,05)	(0,04)	

6.18.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	0,1264	0,0591
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	0,1501	0,0339
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	0,2068	0,0200
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	15	0,1527	0,0530
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	54	0,1784	0,1976
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,1500	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	0,0709	0,0241
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	3	0,0810	0,0116
	alle Verfahren L-Milchsäure	22	0,0725	0,0220





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	5	35,0	-12,50	-2,94	
06	Acetaldehyd/potent.	30	48,0	0,50	0,12	
12	Glyoxal/potentiometr.	15	48,0	0,50	0,12	
13	Glyoxal/potentiometr.		49,3	1,77	0,42	
14	Glyoxal/potentiometr.	10	49,0	1,50	0,35	
15	Glyoxal/Stärke	5	49,0	1,50	0,35	
16	Propionaldehyd/Stärke	5	47,0	-0,50	-0,12	
17	Glyoxal/Stärke	5	50,0	2,50	0,59	
18	Glyoxal/potentiometr.	5	42,4	-5,10	-1,20	
19	Glyoxal/Stärke	5	44,0	-3,50	-0,82	
20	Glyoxal/Stärke	5	48,0	0,50	0,12	
21	Glyoxal/potentiometr.	15	62,0	14,50	3,41	
22	Glyoxal/Stärke	7	40,0	-7,50	-1,76	
23	Glyoxal/Stärke	20	31,0	-16,50	-3,88	
24	Glyoxal/Stärke	5	49,0	1,50	0,35	
25	Glyoxal/potentiometr.	5	54,5	6,98	1,64	
26	Propionaldehyd/Stärke	10	49,0	1,50	0,35	
28	Glyoxal/Stärke	5	44,0	-3,50	-0,82	
29	Glyoxal/Stärke	30	42,0	-5,50	-1,29	
30	Glyoxal/potentiometr.	12	44,0	-3,50	-0,82	
31	Glyoxal/Stärke	5	45,0	-2,50	-0,59	
32	Propionaldehyd/Stärke	5	56,0	8,50	2,00	
33	Glyoxal/potentiometr.		44,0	-3,50	-0,82	
34	Glyoxal/Stärke	5	37,0	-10,50	-2,47	
35	Glyoxal/Stärke	20	42,0	-5,50	-1,29	
36	Glyoxal/Stärke	10	54,0	6,50	1,53	
37	Glyoxal/Stärke	5	46,5	-1,00	-0,24	
38	Glyoxal/Stärke	5	50,0	2,50	0,59	
39	Glyoxal/potentiometr.	10	48,0	0,50	0,12	
40	Glyoxal/Stärke	15	40,0	-7,50	-1,76	
41	Glyoxal/Stärke	10	43,0	-4,50	-1,06	
42	Glyoxal/Stärke	5	34,0	-13,50	-3,18	
43	Glyoxal/Stärke	8	52,0	4,50	1,06	
44	Propionaldehyd/Stärke	10	49,0	1,50	0,35	
45	Glyoxal/potentiometr.	20	49,2	1,72	0,40	
46	Glyoxal/Stärke	5	48,0	0,50	0,12	
48	Glyoxal/Stärke	5	48,0	0,50	0,12	
49	Glyoxal/Stärke	5	46,0	-1,50	-0,35	
50	Glyoxal/potentiometr.		46,5	-1,00	-0,24	
51	Glyoxal/Stärke	5	42,0	-5,50	-1,29	
52	Propionaldehyd/Stärke	5	52,0	4,50	1,06	
54	Glyoxal/Stärke	ca.3	20,0	-27,50	-6,47	(*)
56	Glyoxal/MTT	5	45,5	-2,00	-0,47	
57	Glyoxal/Stärke	6	47,0	-0,50	-0,12	
58	Glyoxal/potentiometr.	5	44,0	-3,50	-0,82	
59	Acetaldehyd/potent.	5	49,7	2,20	0,52	
60	Glyoxal/potentiometr.	5	44,0	-3,50	-0,82	
61	Glyoxal/Stärke	5	43,0	-4,50	-1,06	
62	Glyoxal/Stärke	5	46,0	-1,50	-0,35	
63	Glyoxal/Stärke	5	124,0	76,50	18,00	(*)
64	Glyoxal/Stärke	5	49,0	1,50	0,35	
66	Glyoxal/potentiometr.	5	44,0	-3,50	-0,82	
68	Glyoxal/potentiometr.	10	52,0	4,50	1,06	
69	Glyoxal/potentiometr.	10	53,6	6,06	1,43	
72	Glyoxal/potentiometr.	5	62,0	14,5	3,41	
77	Propionaldehyd/Stärke	5	60,0	12,50	2,94	
78	Glyoxal/potentiometr.	5	46,0	-1,50	-0,35	
79	Glyoxal/potentiometr.	5	47,0	-0,50	-0,12	
80	Glyoxal/potentiometr.	5	44,0	-3,50	-0,82	
81	Glyoxal/Stärke	5	56,7	9,20	2,16	
83	Glyoxal/potentiometr.		53,0	5,50	1,29	
94	Glyoxal/potentiometr.	25	48,9	1,39	0,33	

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

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
101	Glyoxal/Stärke	5	45,0	-2,50	-0,59	
110	Acetaldehyd/Stärke	10	50,0	2,50	0,59	
111	Glyoxal/potentiometr.	10	47,0	-0,50	-0,12	
112	Acetaldehyd/Stärke	10	51,0	3,50	0,82	
113	Glyoxal/Stärke	5	32,0	-15,50	-3,65	
114	Glyoxal/Stärke	10	53,0	5,50	1,29	
115	Glyoxal/potentiometr.	10	49,0	1,50	0,35	
116	Glyoxal/Stärke	5	28,0	-19,50	-4,59	
117	Glyoxal/Stärke	10	45,0	-2,50	-0,59	
118	Glyoxal/potentiometr.	10	42,5	-5,00	-1,18	
119	Glyoxal/Stärke	25	37,0	-10,50	-2,47	
120	Propionaldehyd/Stärke	5	61,0	13,50	3,18	
121	Acetaldehyd/Stärke	30	50,0	2,50	0,59	
122	Glyoxal/Stärke	10	52,0	4,50	1,06	
123	Propionaldehyd/Stärke	10	39,0	-8,50	-2,00	
124	Propionaldehyd/Stärke	5	41,0	-6,50	-1,53	
125	Propionaldehyd/Stärke	5	50,0	2,50	0,59	
126	Propionaldehyd/Stärke	10	48,0	0,50	0,12	
127	Glyoxal/Stärke	30	21,0	-26,50	-6,23	(*)
128	Glyoxal/Stärke	10	48,0	0,50	0,12	
129	Propionaldehyd/Stärke	10	58,0	10,50	2,47	
130	Glyoxal/potentiometr.	20	47,0	-0,50	-0,12	
131	Glyoxal/potentiometr.	10	51,0	3,50	0,82	
132	Glyoxal/Stärke	10	41,0	-6,50	-1,53	
133	Glyoxal/potentiometr.	25	45,0	-2,50	-0,59	
134	Propionaldehyd/Stärke	15	51,0	3,50	0,82	
135	Propionaldehyd/potent.	5	54,0	6,50	1,53	
136	Glyoxal/potentiometr.	ca.3	46,3	-1,20	-0,28	
137	Glyoxal/Stärke	20	48,0	0,50	0,12	
138	Glyoxal/Stärke	10	41,0	-6,50	-1,53	
139	k. A.	7	55,0	7,50	1,76	
140	Acetaldehyd/Stärke	15	52,0	4,50	1,06	
141	Glyoxal/Stärke	5	49,0	1,50	0,35	
142	Glyoxal/Stärke	10	22,0	-25,50	-6,00	(*)
143	Glyoxal/Stärke	5	45,0	-2,50	-0,59	
144	Glyoxal/Stärke	25	42,0	-5,50	-1,29	
145	Glyoxal/potentiometr.	5	52,0	4,50	1,06	
146	Glyoxal/Stärke	5	40,0	-7,50	-1,76	
147	Propionaldehyd/Stärke		53,0	5,50	1,29	
148	Glyoxal/potentiometr.	10	43,0	-4,50	-1,06	
149	Glyoxal/Stärke	5	46,0	-1,50	-0,35	
150	Glyoxal/Stärke	25	44,0	-3,50	-0,82	

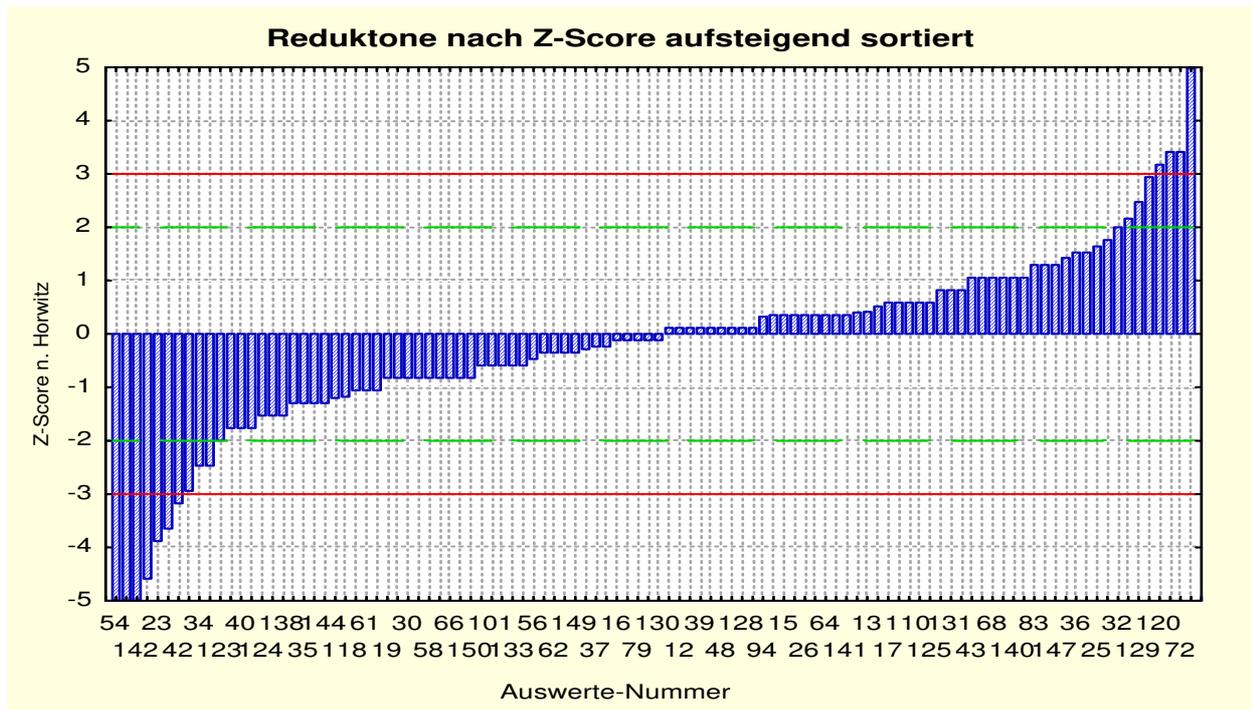
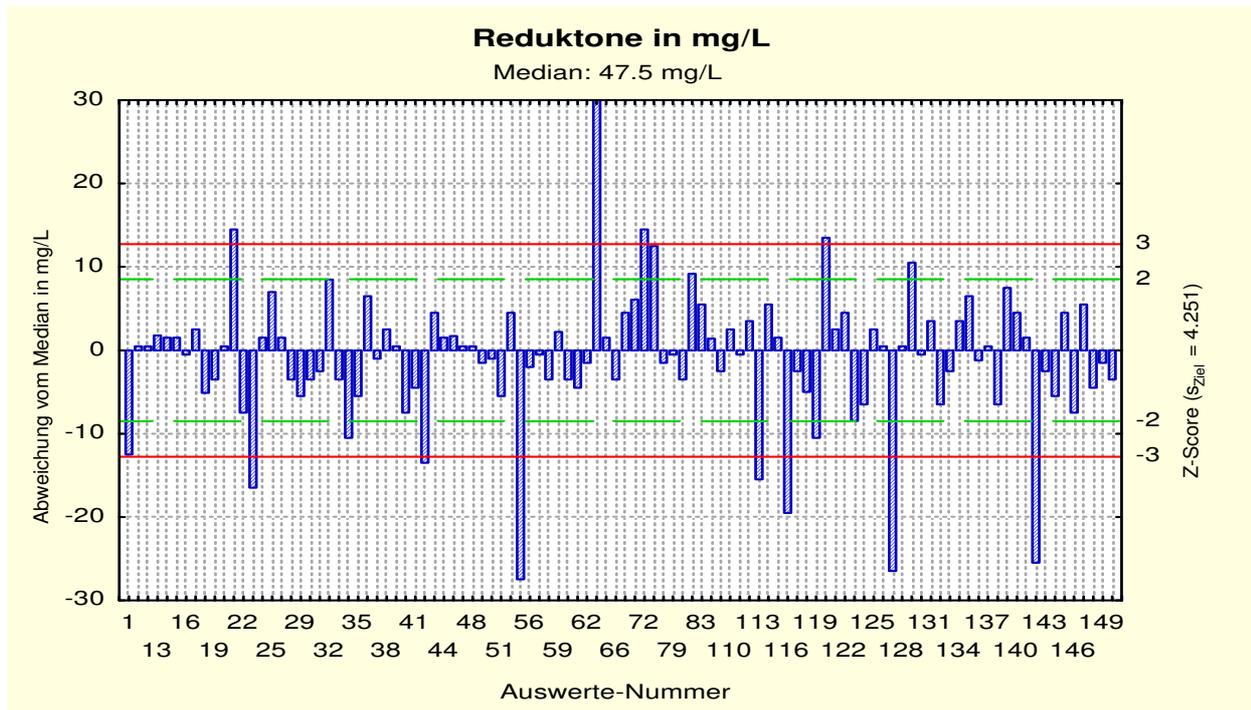
(*) Diese Werte wurden wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.

6.19.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone in mg/L	alle Daten
Gültige Werte	100
Minimalwert	28,0
Mittelwert	47,05
Median	47,50
Maximalwert	62,0
Standardabweichung (s _L)	6,160
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,616
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	4,251
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,45
Quotient (s _L /s _{exp})	
Quotient (u _M /s _H)	0,14
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	

6.19.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	4	50,65	0,90
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	48,85	1,36
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	14	50,99	6,78
Propionaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Platinelektrode	1	54,00	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	50	44,01	6,86
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	31	47,81	4,24
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Farbreaktion mit MTT	1	45,50	
k. A.	keine Angaben	1	55,00	
alle Verfahren		104	46,95	5,61



6.20 Freie Schweflige Säure [mg/L]

6.20.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	64,0	8,00	1,64	
06	LwK 6.2	47,6	-8,40	-1,72	
07	LwK 6.2	53,9	-2,10	-0,43	
10	LwK 6.2	55,4	-0,64	-0,13	
11	LwK 6.4	53,0	-3,00	-0,61	
27	LwK 6.2	60,1	4,10	0,84	
39	LwK 6.2	56,0	0,00	0,00	
44	LwK 6.3	57,0	1,00	0,20	
47	LwK 6.3	48,0	-8,00	-1,64	
48	LwK 6.3	60,0	4,00	0,82	
53	LwK 6.3	56,0	0,00	0,00	
55	LwK 6.4	47,0	-9,00	-1,84	
56	LwK 6.4	53,0	-3,00	-0,61	
57	LwK 6.4	56,0	-0,02	-0,00	
88	LwK 6.2	64,0	8,00	1,64	
92	LwK 6.2	58,0	2,00	0,41	
100	LwK 6.2	54,2	-1,80	-0,37	
113	LwK 6.3	61,0	5,00	1,02	
117	LwK 6.3	61,0	5,00	1,02	
206	LwK 6.5	45,0	-11,00	-2,25	
207	LwK 6.5	52,0	-4,00	-0,82	
209	LwK 6.5	55,3	-0,70	-0,14	
210	LwK 6.5	50,5	-5,50	-1,13	
211	LwK 6.5	49,0	-7,00	-1,43	
218	LwK 6.5	55,5	-0,50	-0,10	
224	LwK 6.5	50,0	-6,00	-1,23	
237	LwK 6.5	49,0	-7,00	-1,43	
251	LwK 6.5	49,0	-7,00	-1,43	
252	LwK 6.5	51,0	-5,00	-1,02	
258	LwK 6.5	54,0	-2,00	-0,41	
262	LwK 6.5	43,0	-13,00	-2,66	
263	LwK 6.5	43,0	-13,00	-2,66	
270	LwK 6.5	39,0	-17,00	-3,48	
319	LwK 6.5	57,0	1,00	0,20	
336	LwK 6.5	56,0	0,00	0,00	
337	LwK 6.5	50,0	-6,00	-1,23	
364	LwK 6.5	52,0	-4,00	-0,82	

6.20.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	80,0	-20,00	-2,50	
12	LwK 6.1 (incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
13	LwK 6.1 (incl.Red.)	103,3	3,27	0,41	
14	LwK 6.1 (incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	
15	LwK 6.1 (incl.Red.)	109,0	9,00	1,13	
16	LwK 6.1 (incl.Red.)	97,0	-3,00	-0,38	
17	LwK 6.1 (incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	101,5	1,50	0,19	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
20	LwK 6.1 (incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	117,0	17,00	2,13	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	104,2	4,17	0,52	
26	LwK 6.1 (incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	94,0	-6,00	-0,75	

Fehlende Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
29	LwK 6.1(incl.Red.)	110,0	10,00	1,25	
30	LwK 6.1(incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
32	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
33	LwK 6.1(incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	95,0	-5,00	-0,63	
35	LwK 6.1(incl.Red.)	105,0	5,00	0,63	
36	LwK 6.1(incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	107,0	7,00	0,88	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	105,0	5,00	0,63	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	97,0	-3,00	-0,38	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	89,0	-11,00	-1,38	
43	LwK 6.1(incl.Red.)	95,0	-5,00	-0,63	
45	LwK 6.1(incl.Red.)	97,5	-2,50	-0,31	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	112,0	12,00	1,50	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	97,0	-3,00	-0,38	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	99,5	-0,50	-0,06	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
52	LwK 6.1(incl.Red.)	102,0	2,00	0,25	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	-30,00	-3,75	
58	LwK 6.1(incl.Red.)	96,0	-4,00	-0,50	
59	LwK 6.1(incl.Red.)	99,7	-0,30	-0,04	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
61	LwK 6.1(incl.Red.)	95,0	-5,00	-0,63	
62	LwK 6.1(incl.Red.)	108,0	8,00	1,00	
63	LwK 6.1(incl.Red.)	176,0	76,00	9,50	(*)
64	LwK 6.1(incl.Red.)	103,0	3,00	0,38	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	96,0	-4,00	-0,50	
68	LwK 6.1(incl.Red.)	107,0	7,00	0,88	
69	LwK 6.1(incl.Red.)	102,9	2,86	0,36	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	135,0	35,00	4,38	
77	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
78	Redox incl.	97,0	-3,00	-0,38	
79	Redox incl.	100,0	0,00	0,00	
80	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
81	LwK 6.1(incl.Red.)	120,8	20,80	2,60	
83	LwK 6.1(incl.Red.)	115,0	15,00	1,88	
98	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
101	LwK 6.1(incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	
110	LwK 6.1(incl.Red.)	103,0	3,00	0,38	
111	LwK 6.1(incl.Red.)	57,0	-43,00	-5,38	(**)
112	LwK 6.1(incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
114	LwK 6.1(incl.Red.)	97,0	-3,00	-0,38	
115	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
116	LwK 6.1(incl.Red.)	86,0	-14,00	-1,75	
118	LwK 6.1(incl.Red.)	101,7	1,70	0,21	
119	LwK 6.1(incl.Red.)	97,0	-3,00	-0,38	
120	LwK 6.1(incl.Red.)	110,0	10,00	1,25	
121	LwK 6.1(incl.Red.)	94,0	-6,00	-0,75	
122	LwK 6.1(incl.Red.)	109,0	9,00	1,13	
123	LwK 6.1(incl.Red.)	77,0	-23,00	-2,88	
124	LwK 6.1(incl.Red.)	92,0	-8,00	-1,00	
125	LwK 6.1(incl.Red.)	103,0	3,00	0,38	
126	LwK 6.1(incl.Red.)	106,0	6,00	0,75	
127	LwK 6.1(incl.Red.)	86,0	-14,00	-1,75	
128	LwK 6.1(incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
129	LwK 6.1(incl.Red.)	98,0	-2,00	-0,25	
130	LwK 6.1(incl.Red.)	102,0	2,00	0,25	
131	LwK 6.1(incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
132	LwK 6.1(incl.Red.)	89,0	-11,00	-1,38	
133	LwK 6.1(incl.Red.)	103,0	3,00	0,38	
134	LwK 6.1(incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	
135	LwK 6.1(incl.Red.)	103,0	3,00	0,38	

Fehlende Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab und blieb unberücksichtigt.
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
136	LwK 6.1 (incl.Red.)	102,5	2,50	0,31	
137	LwK 6.1 (incl.Red.)	105,0	5,00	0,63	
138	LwK 6.1 (incl.Red.)	96,0	-4,00	-0,50	
139	LwK 6.1 (incl.Red.)	102,0	2,00	0,25	
140	LwK 6.1 (incl.Red.)	100,0	0,00	0,00	
141	LwK 6.1 (incl.Red.)	106,0	6,00	0,75	
142	LwK 6.1 (incl.Red.)	80,0	-20,00	-2,50	
143	LwK 6.1 (incl.Red.)	107,0	7,00	0,88	
144	LwK 6.1 (incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
145	LwK 6.1 (incl.Red.)	102,0	2,00	0,25	
146	LwK 6.1 (incl.Red.)	95,0	-5,00	-0,63	
147	LwK 6.1 (incl.Red.)	93,0	-7,00	-0,88	
148	LwK 6.1 (incl.Red.)	99,0	-1,00	-0,13	
149	LwK 6.1 (incl.Red.)	104,0	4,00	0,50	
150	LwK 6.1 (incl.Red.)	101,0	1,00	0,13	

Fehlende Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

6.20.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	45,0	-9,00	-1,90	-1,13	
12	LwK 6.1 (excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	
13	LwK 6.1 (excl.Red.)	54,0	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	60,0	6,00	1,27	0,75	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	54,0	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 6.1 (excl.Red.)	59,1	5,10	1,08	0,64	
19	LwK 6.1 (excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
20	LwK 6.1 (excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	
21	LwK 6.1 (excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	60,0	6,00	1,27	0,75	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	68,0	14,00	2,95	1,75	
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	49,7	-4,31	-0,91	-0,54	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
29	LwK 6.1 (excl.Red.)	68,0	14,00	2,95	1,75	
30	LwK 6.1 (excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	59,0	5,00	1,05	0,63	
32	LwK 6.1 (excl.Red.)	42,0	-12,00	-2,53	-1,50	
33	LwK 6.1 (excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
34	LwK 6.1 (excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
35	LwK 6.1 (excl.Red.)	63,0	9,00	1,90	1,13	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	60,5	6,50	1,37	0,81	
38	LwK 6.1 (excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
42	LwK 6.1 (excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	-11,00	-2,32	-1,38	
45	LwK 6.1 (excl.Red.)	48,3	-5,72	-1,21	-0,71	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	64,0	10,00	2,11	1,25	
49	LwK 6.1 (excl.Red.)	51,0	-3,00	-0,63	-0,38	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	53,0	-1,00	-0,21	-0,13	
51	LwK 6.1 (excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	
52	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
54	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
58	LwK 6.1 (excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
59	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
60	LwK 6.1 (excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	

SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone
Fehlende Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren excl. Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score ^{SH} incl. Red.	Hinweis
61	LwK 6.1(excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
62	LwK 6.1(excl.Red.)	62,0	8,00	1,69	1,00	
63	LwK 6.1(excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	54,0	0,00	0,00	0,00	
66	LwK 6.1(excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	49,3	-4,70	-0,99	-0,59	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	73,0	19,00	4,01	2,38	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-16,00	-3,38	-2,00	
78	Redox (excl.Red.)	51,0	-3,00	-0,63	-0,38	
79	Redox (excl.Red.)	53,0	-1,00	-0,21	-0,13	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	54,0	0,00	0,00	0,00	
81	LwK 6.1(excl.Red.)	64,1	10,10	2,13	1,26	
83	LwK 6.1(excl.Red.)	62,0	8,00	1,69	1,00	
98	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
101	LwK 6.1(excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	
110	LwK 6.1(excl.Red.)	53,0	-1,00	-0,21	-0,13	
111	LwK 6.1(excl.Red.)	10,0	-44,00	-9,28	-5,50	(*)
112	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
114	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	-10,00	-2,11	-1,25	
115	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
116	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
118	LwK 6.1(excl.Red.)	59,2	5,20	1,10	0,65	
119	LwK 6.1(excl.Red.)	60,0	6,00	1,27	0,75	
120	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
121	LwK 6.1(excl.Red.)	44,0	-10,00	-2,11	-1,25	
122	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
123	LwK 6.1(excl.Red.)	38,0	-16,00	-3,38	-2,00	
124	LwK 6.1(excl.Red.)	51,0	-3,00	-0,63	-0,38	
125	LwK 6.1(excl.Red.)	53,0	-1,00	-0,21	-0,13	
126	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
127	LwK 6.1(excl.Red.)	65,0	11,00	2,32	1,38	
128	LwK 6.1(excl.Red.)	52,0	-2,00	-0,42	-0,25	
129	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	-14,00	-2,95	-1,75	
130	LwK 6.1(excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
131	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	-6,00	-1,27	-0,75	
132	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	-6,00	-1,27	-0,75	
133	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
134	LwK 6.1(excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
135	LwK 6.1(excl.Red.)	49,0	-5,00	-1,05	-0,63	
136	LwK 6.1(excl.Red.)	56,2	2,20	0,46	0,28	
137	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
138	LwK 6.1(excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
139	LwK 6.1(excl.Red.)	47,0	-7,00	-1,48	-0,88	
140	LwK 6.1(excl.Red.)	48,0	-6,00	-1,27	-0,75	
141	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
142	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
143	LwK 6.1(excl.Red.)	62,0	8,00	1,69	1,00	
144	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	
145	LwK 6.1(excl.Red.)	50,0	-4,00	-0,84	-0,50	
146	LwK 6.1(excl.Red.)	55,0	1,00	0,21	0,13	
147	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	-14,00	-2,95	-1,75	
148	LwK 6.1(excl.Red.)	56,0	2,00	0,42	0,25	
149	LwK 6.1(excl.Red.)	58,0	4,00	0,84	0,50	
150	LwK 6.1(excl.Red.)	57,0	3,00	0,63	0,38	

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

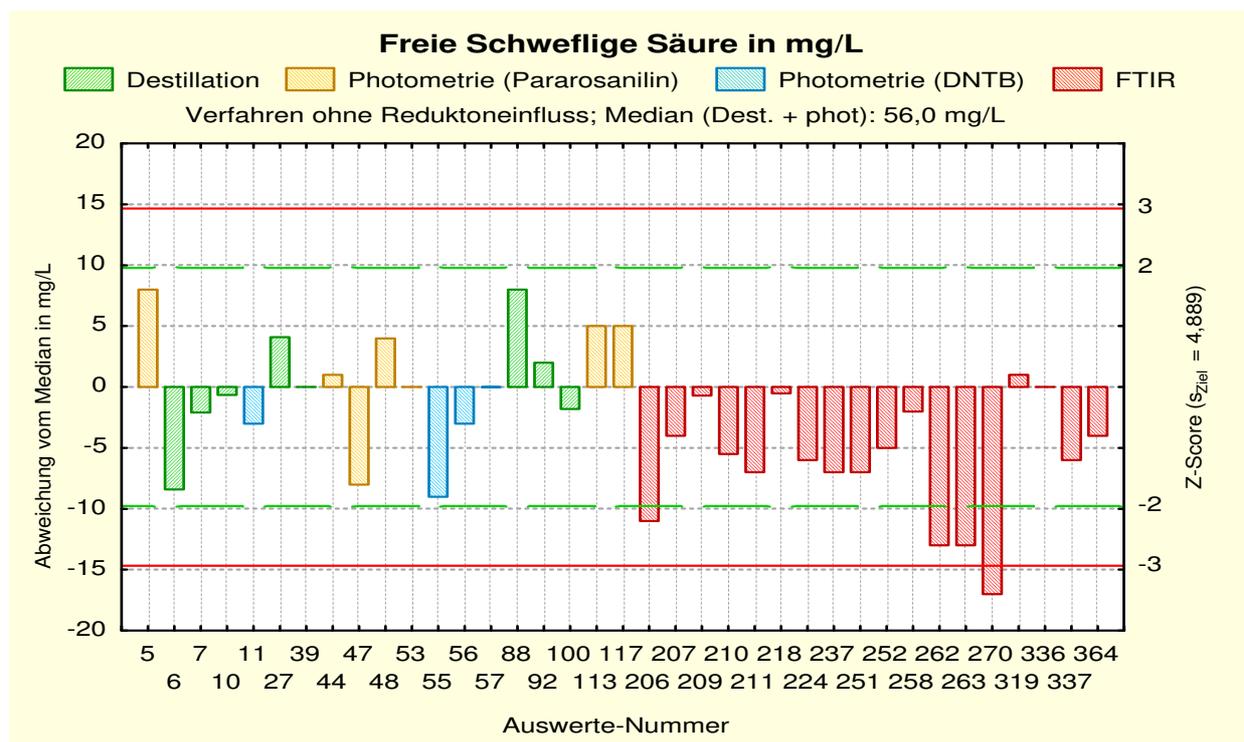
(*) Dieser Wert wurde wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei den Berechnungen nicht berücksichtigt.
Fehlende Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

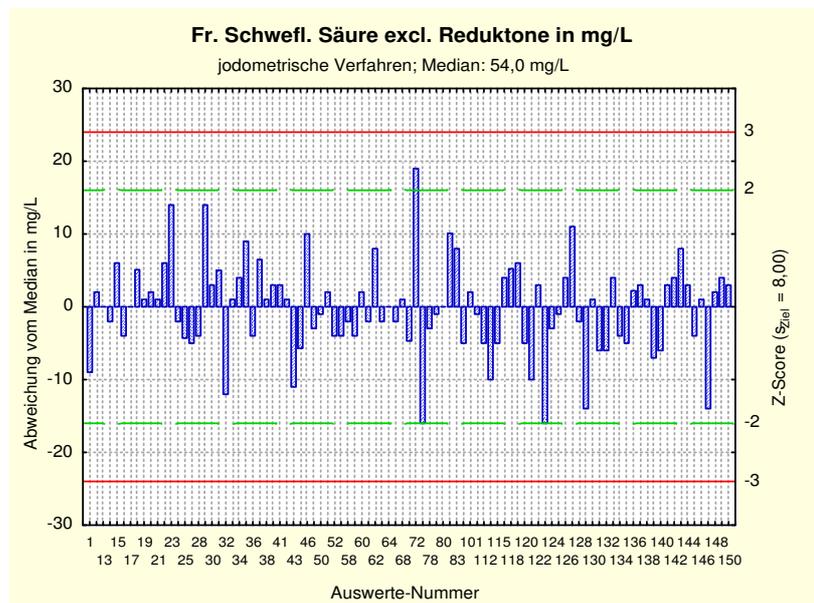
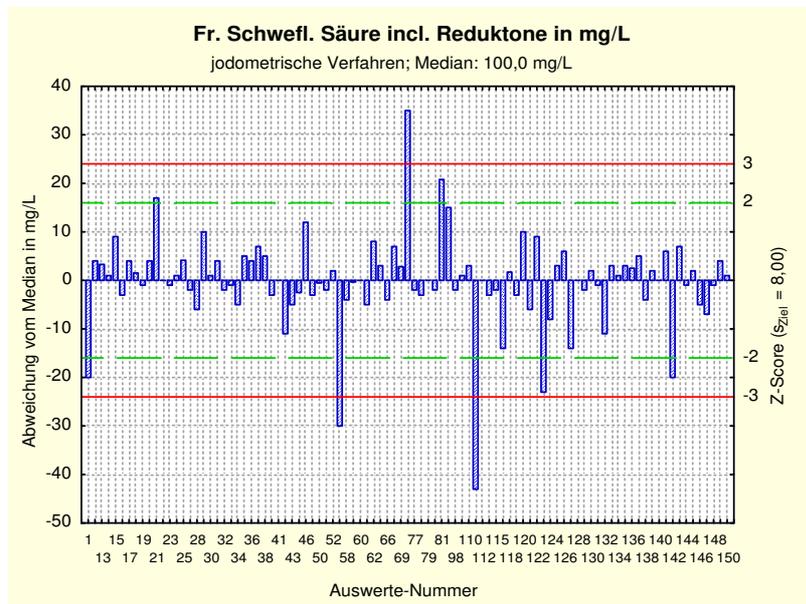
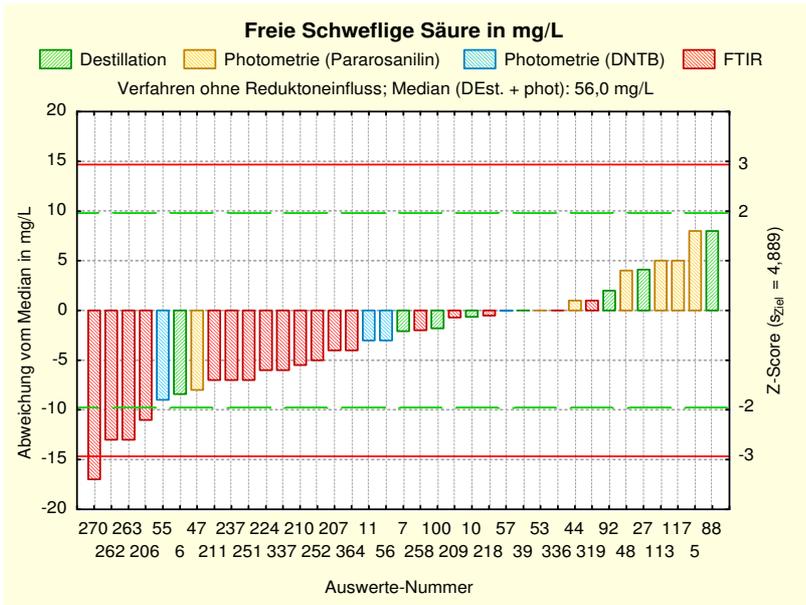
6.20.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone		
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten	
Gültige Werte	19	37	95	94	95
Minimalwert	47,0	39,0	57,0	70,0	38,0
Mittelwert	56,06	53,12	99,73	100,19	53,80
Median	56,00	53,90	100,00	100,00	54,00
Maximalwert	64,0	64,0	135,0	135,0	73,0
Standardabweichung (s _L)	5,041	5,799	9,444	8,384	6,355
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,156	0,953	0,969	0,865	0,652
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	4,889	4,732	8,000	8,000	4,740
- n. Horwitz incl. Reduktone (s _H incl. Red.)					8,000
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,03	1,23	1,18	1,05	1,34
Quotient (s _L /s _{exp})					0,79
Quotient (u _M /s _H)	0,24	0,20	0,12	0,11	0,14
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)					0,08

6.20.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl. Red.)	ohne Abzug der Reduktone	94	100,45	5,74
(excl. Red.)	mit Abzug der Reduktone	94	53,79	5,91
Redox	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und			
(incl. Red.)	der Redoxelektrode ORP ohne Abzug der Reduktone	2	98,50	2,41
(excl. Red.)	mit Abzug der Reduktone	2	52,00	1,60
	alle jodometrischen Verfahren ohne Abzug der Reduktone	96	100,39	5,58
	alle jodometrischen Verfahren mit Abzug der Reduktone	96	53,75	5,81
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	56,24	5,25
LwK 6.3	Pararosanilinmethode (auch automatisiert)	7	58,69	4,58
LwK 6.4	photometrisch mit DNTB (auch automatisiert)	4	52,35	4,06
	Destillations- und photometrische Verfahren	19	56,08	5,49
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	18	50,23	4,97
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	37	53,25	5,80





6.21 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

6.21.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren
(jodometr. Ergebnisse sind nur berücksichtigt, wenn exclusive Reduktone mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	196,0	43,00	3,75	8,03	(**)
04	LwK 7.7	158,4	5,40	0,47	1,01	
05	LwK 7.7	166,0	13,00	1,13	2,43	
06	LwK 7.3	160,0	7,00	0,61	1,31	
07	LwK 7.3	161,6	8,60	0,75	1,61	
10	LwK 7.3	157,4	4,40	0,38	0,82	
11	LwK 7.4.2	153,0	0,00	0,00	0,00	
12	LwK 7.3	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
13	LwK 7.4.2	152,0	-1,00	-0,09	-0,19	
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	163,0	10,00	0,87	1,87	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	148,9	-4,10	-0,36	-0,77	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-7,00	-0,61	-1,31	
20	LwK 7.4.2	160,0	7,00	0,61	1,31	
22	LwK 7.4.2m	166,0	13,00	1,13	2,43	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	161,0	8,00	0,70	1,49	
25	LwK 7.4.2	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
27	LwK 7.3	165,8	12,80	1,11	2,39	
30	LwK 7.5.2(excl. Red.)	172,0	19,00	1,65	3,55	
31	LwK 7.4.1	151,0	-2,00	-0,17	-0,37	
33	LwK 7.4.2	149,0	-4,00	-0,35	-0,75	
37	LwK 7.4.1	132,0	-21,00	-1,83	-3,92	
38	LwK 7.7	155,0	2,00	0,17	0,37	
39	LwK 7.4.2	153,0	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 7.4.1	155,0	2,00	0,17	0,37	
41	LwK 7.4.1	137,0	-16,00	-1,39	-2,99	
42	LwK 7.4.2	155,0	2,00	0,17	0,37	
44	LwK 7.4.2	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
46	LwK 7.3	149,0	-4,00	-0,35	-0,75	
47	LwK 7.4.2	156,0	3,00	0,26	0,56	
48	LwK 7.7	174,0	21,00	1,83	3,92	
49	LwK 7.4.2	159,0	6,00	0,52	1,12	
50	LwK 7.4.2	143,8	-9,20	-0,80	-1,72	
53	LwK 7.7	165,0	12,00	1,05	2,24	
54	LwK 7.4.2	156,0	3,00	0,26	0,56	
55	LwK 7.7	154,0	1,00	0,09	0,19	
56	LwK 7.7	163,6	10,60	0,92	1,98	
57	LwK 7.4.2	144,0	-9,00	-0,78	-1,68	
58	LwK 7.4.2	142,0	-11,00	-0,96	-2,05	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	159,0	6,00	0,52	1,12	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-30,00	-2,61	-5,60	(**)
64	LwK 7.4.2	145,0	-8,00	-0,70	-1,49	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	161,0	8,00	0,70	1,49	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	165,0	12,00	1,05	2,24	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	132,0	-21,00	-1,83	-3,92	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-7,00	-0,61	-1,31	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	147,0	-6,00	-0,52	-1,12	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	153,0	0,00	0,00	0,00	
81	LwK 7.3	116,9	-36,10	-3,14	-6,74	(**)
87	LwK 7.3	157,0	4,00	0,35	0,75	
88	LwK 7.3	170,0	17,00	1,48	3,17	
89	LwK 7.4.2	160,8	7,78	0,68	1,45	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	146,0	-7,00	-0,61	-1,31	
92	LwK 7.3	140,5	-12,50	-1,09	-2,33	
93	LwK 7.4.2	162,0	9,00	0,78	1,68	
95	LwK 7.4.1	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
97	LwK 7.7	158,3	5,25	0,46	0,98	
100	LwK 7.3	157,0	4,00	0,35	0,75	
101	LwK 7.4.2	140,0	-13,00	-1,13	-2,43	
111	LwK 7.5.2(excl. Red.)	167,0	14,00	1,22	2,61	

Mit (**) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.
Derartige Ergebnisse von Destillationsverfahren wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
112	LwK 7.3	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
113	LwK 7.6	159,0	6,00	0,52	1,12	
114	LwK 7.5.2(excl. Red.)	144,0	-9,00	-0,78	-1,68	
117	LwK 7.4.2	151,0	-2,00	-0,17	-0,37	
118	LwK 7.4.2	161,0	8,00	0,70	1,49	
120	IFU 7	157,0	4,00	0,35	0,75	
121	LwK 7.3	147,2	-5,80	-0,51	-1,08	
122	LwK 7.5.1(excl. Red.)	166,0	13,00	1,13	2,43	
123	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	-17,00	-1,48	-3,17	
124	LwK 7.5.1(excl. Red.)	154,0	1,00	0,09	0,19	
126	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	5,00	0,44	0,93	
127	LwK 7.5.1(excl. Red.)	164,5	11,50	1,00	2,15	
128	LwK 7.5.1(excl. Red.)	160,0	7,00	0,61	1,31	
130	LwK 7.1	167,0	14,00	1,22	2,61	
131	LwK 7.5.1(excl. Red.)	156,0	3,00	0,26	0,56	
132	LwK 7.5.1(excl. Red.)	155,0	2,00	0,17	0,37	
133	LwK 7.5.1(excl. Red.)	141,0	-12,00	-1,05	-2,24	
134	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	5,00	0,44	0,93	
135	LwK 7.5.2(excl. Red.)	159,0	6,00	0,52	1,12	
136	LwK 7.4.1	152,3	-0,70	-0,06	-0,13	
139	LwK 7.4.1	158,0	5,00	0,44	0,93	
140	LwK 7.4.1	157,0	4,00	0,35	0,75	
141	LwK 7.4.1	150,0	-3,00	-0,26	-0,56	
142	LwK 7.5.1(excl. Red.)	162,0	9,00	0,78	1,68	
143	LwK 7.5.1(excl. Red.)	151,0	-2,00	-0,17	-0,37	
144	LwK 7.4.2	149,0	-4,00	-0,35	-0,75	
147	LwK 7.1	161,0	8,00	0,70	1,49	
148	LwK 7.4.2	156,0	3,00	0,26	0,56	
150	LwK 7.4.2	149,0	-4,00	-0,35	-0,75	
206	LwK 7.8	155,0	2,00	0,17	0,37	
207	LwK 7.8	177,7	24,70	2,15	4,61	
208	FTIR(direkt)	87,0	-66,00	-5,75	-12,32	(**)
209	LwK 7.8	170,6	17,60	1,53	3,29	
210	LwK 7.8	163,5	10,50	0,91	1,96	
211	LwK 7.8	178,0	25,00	2,18	4,67	
218	LwK 7.8	136,0	-17,00	-1,48	-3,17	
224	LwK 7.8	168,0	15,00	1,31	2,80	
237	LwK 7.8	146,0	-7,00	-0,61	-1,31	
251	LwK 7.8	174,0	21,00	1,83	3,92	
252	LwK 7.8	167,0	14,00	1,22	2,61	
258	LwK 7.8	165,0	12,00	1,05	2,24	
262	LwK 7.8	132,0	-21,00	-1,83	-3,92	
263	LwK 7.8	176,0	23,00	2,00	4,29	
270	LwK 7.8	155,0	2,00	0,17	0,37	
319	LwK 7.8	151,0	-2,00	-0,17	-0,37	
336	LwK 7.8	163,0	10,00	0,87	1,87	
337	LwK 7.8	149,0	-4,00	-0,35	-0,75	
364	LwK 7.8	166,0	13,00	1,13	2,43	

Mit (**) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.
Derartige Ergebnisse von Destillationsverfahren wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.21.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	212,0	15,00	1,05	2,80	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	195,0	-2,00	-0,14	-0,37	
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	170,0	-27,00	-1,90	-5,04	(**)
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	196,0	-1,00	-0,07	-0,19	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	191,3	-5,70	-0,40	-1,06	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	190,0	-7,00	-0,49	-1,31	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	239,0	42,00	2,95	7,84	(**)

Fehlende, exclusive Reduktone mitgeteilte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.
Mit (**) gekennzeichnete Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	180,0	-17,00	-1,19	-3,17	
24	LwK 7.5.2(incl. Red.)	210,0	13,00	0,91	2,43	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	184,0	-13,00	-0,91	-2,43	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	195,0	-2,00	-0,14	-0,37	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	198,0	1,00	0,07	0,19	
30	LwK 7.5.2(incl. Red.)	216,0	19,00	1,34	3,55	
32	LwK 7.5.2(incl. Red.)	190,0	-7,00	-0,49	-1,31	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	197,0	0,00	0,00	0,00	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	206,0	9,00	0,63	1,68	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	219,0	22,00	1,55	4,11	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	176,0	-21,00	-1,48	-3,92	
45	LwK 7.5.1(incl. Red.)	211,0	14,00	0,98	2,61	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	184,0	-13,00	-0,91	-2,43	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	181,0	-16,00	-1,12	-2,99	
59	LwK 7.5.1(incl. Red.)	208,7	11,70	0,82	2,18	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	198,0	1,00	0,07	0,19	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	160,0	-37,00	-2,60	-6,91	(**)
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	190,0	-7,00	-0,49	-1,31	
63	LwK 7.5.1(incl. Red.)	247,0	50,00	3,51	9,33	(**)
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	187,0	-10,00	-0,70	-1,87	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	213,0	16,00	1,12	2,99	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	211,5	14,53	1,02	2,71	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	227,0	30,00	2,11	5,60	(**)
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	192,0	-5,00	-0,35	-0,93	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	192,0	-5,00	-0,35	-0,93	
79	LwK 7.5.1(incl. Red.)	194,0	-3,00	-0,21	-0,56	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	197,0	0,00	0,00	0,00	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	210,0	13,00	0,91	2,43	
90	LwK 7.5.1(incl. Red.)	215,0	18,00	1,26	3,36	
91	LwK 7.5.2(incl. Red.)	195,0	-2,00	-0,14	-0,37	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	217,0	20,00	1,41	3,73	
110	LwK 7.5.1(incl. Red.)	197,0	0,00	0,00	0,00	
111	LwK 7.5.2(incl. Red.)	214,0	17,00	1,19	3,17	
114	LwK 7.5.2(incl. Red.)	197,0	0,00	0,00	0,00	
115	LwK 7.5.1(incl. Red.)	209,0	12,00	0,84	2,24	
116	LwK 7.5.1(incl. Red.)	158,0	-39,00	-2,74	-7,28	(**)
119	LwK 7.5.2(incl. Red.)	201,0	4,00	0,28	0,75	
122	LwK 7.5.1(incl. Red.)	218,0	21,00	1,48	3,92	
123	LwK 7.5.1(incl. Red.)	175,0	-22,00	-1,55	-4,11	
124	LwK 7.5.1(incl. Red.)	195,0	-2,00	-0,14	-0,37	
125	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	-4,00	-0,28	-0,75	
126	LwK 7.5.1(incl. Red.)	206,0	9,00	0,63	1,68	
127	LwK 7.5.1(incl. Red.)	185,5	-11,50	-0,81	-2,15	
128	LwK 7.5.1(incl. Red.)	208,0	11,00	0,77	2,05	
129	LwK 7.5.1(incl. Red.)	196,0	-1,00	-0,07	-0,19	
131	LwK 7.5.1(incl. Red.)	207,0	10,00	0,70	1,87	
132	LwK 7.5.1(incl. Red.)	196,0	-1,00	-0,07	-0,19	
133	LwK 7.5.1(incl. Red.)	186,0	-11,00	-0,77	-2,05	
134	LwK 7.5.1(incl. Red.)	209,0	12,00	0,84	2,24	
135	LwK 7.5.2(incl. Red.)	213,0	16,00	1,12	2,99	
137	LwK 7.5.1(incl. Red.)	208,0	11,00	0,77	2,05	
138	LwK 7.5.2(incl. Red.)	197,0	0,00	0,00	0,00	
142	LwK 7.5.1(incl. Red.)	184,0	-13,00	-0,91	-2,43	
143	LwK 7.5.1(incl. Red.)	196,0	-1,00	-0,07	-0,19	
145	LwK 7.5.1(incl. Red.)	207,0	10,00	0,70	1,87	
146	LwK 7.5.2(incl. Red.)	186,0	-11,00	-0,77	-2,05	
149	LwK 7.5.1(incl. Red.)	186,0	-11,00	-0,77	-2,05	

Fehlende, nur exclusive Reduktone mitgeteilte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

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

Für die nachstehende Tabelle der Ergebnisse jodometrischer Verfahren ausschließlich Reduktone gilt:

Fehlende, nur inclusive Reduktone mitgeteilte Werte wurden vom Auswerter nachberechnet.

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

6.21.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	163,0	8,00	0,69	1,49	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-32,00	-2,76	-5,97	(**)
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	148,9	-6,10	-0,53	-1,14	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	177,0	22,00	1,90	4,11	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	149,0	-6,00	-0,52	-1,12	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	161,0	6,00	0,52	1,12	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	135,0	-20,00	-1,72	-3,73	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	151,0	-4,00	-0,34	-0,75	
29	LwK 7.5.1(excl. Red.)	156,0	1,00	0,09	0,19	
30	LwK 7.5.2(excl. Red.)	172,0	17,00	1,46	3,17	
32	LwK 7.5.2(excl. Red.)	134,0	-21,00	-1,81	-3,92	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	160,0	5,00	0,43	0,93	
35	LwK 7.5.1(excl. Red.)	164,0	9,00	0,78	1,68	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	165,0	10,00	0,86	1,87	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	-31,00	-2,67	-5,79	(**)
45	LwK 7.5.1(excl. Red.)	161,8	6,78	0,58	1,27	
51	LwK 7.5.1(excl. Red.)	142,0	-13,00	-1,12	-2,43	
52	LwK 7.5.2(excl. Red.)	129,0	-26,00	-2,24	-4,85	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	159,0	4,00	0,34	0,75	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	154,0	-1,00	-0,09	-0,19	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,0	-38,00	-3,27	-7,09	(**)
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	144,0	-11,00	-0,95	-2,05	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	-32,00	-2,76	-5,97	(**)
66	LwK 7.5.1(excl. Red.)	143,0	-12,00	-1,03	-2,24	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	161,0	6,00	0,52	1,12	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	2,97	0,26	0,55	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	165,0	10,00	0,86	1,87	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	132,0	-23,00	-1,98	-4,29	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	147,0	-8,00	-0,69	-1,49	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	153,0	-2,00	-0,17	-0,37	
83	LwK 7.5.1(excl. Red.)	157,0	2,00	0,17	0,37	
90	LwK 7.5.1(excl. Red.)	165,7	10,70	0,92	2,00	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
94	LwK 7.5.1(excl. Red.)	168,1	13,11	1,13	2,45	
110	LwK 7.5.1(excl. Red.)	147,0	-8,00	-0,69	-1,49	
111	LwK 7.5.2(excl. Red.)	167,0	12,00	1,03	2,24	
114	LwK 7.5.2(excl. Red.)	144,0	-11,00	-0,95	-2,05	
115	LwK 7.5.1(excl. Red.)	160,0	5,00	0,43	0,93	
116	LwK 7.5.1(excl. Red.)	130,0	-25,00	-2,15	-4,67	
119	LwK 7.5.2(excl. Red.)	164,0	9,00	0,78	1,68	
122	LwK 7.5.1(excl. Red.)	166,0	11,00	0,95	2,05	
123	LwK 7.5.1(excl. Red.)	136,0	-19,00	-1,64	-3,55	
124	LwK 7.5.1(excl. Red.)	154,0	-1,00	-0,09	-0,19	
125	LwK 7.5.1(excl. Red.)	143,0	-12,00	-1,03	-2,24	
126	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	3,00	0,26	0,56	
127	LwK 7.5.1(excl. Red.)	164,5	9,50	0,82	1,77	
128	LwK 7.5.1(excl. Red.)	160,0	5,00	0,43	0,93	
129	LwK 7.5.1(excl. Red.)	138,0	-17,00	-1,46	-3,17	
131	LwK 7.5.1(excl. Red.)	156,0	1,00	0,09	0,19	
132	LwK 7.5.1(excl. Red.)	155,0	0,00	0,00	0,00	
133	LwK 7.5.1(excl. Red.)	141,0	-14,00	-1,21	-2,61	
134	LwK 7.5.1(excl. Red.)	158,0	3,00	0,26	0,56	
135	LwK 7.5.2(excl. Red.)	159,0	4,00	0,34	0,75	
137	LwK 7.5.1(excl. Red.)	160,0	5,00	0,43	0,93	
138	LwK 7.5.2(excl. Red.)	156,0	1,00	0,09	0,19	
142	LwK 7.5.1(excl. Red.)	162,0	7,00	0,60	1,31	
143	LwK 7.5.1(excl. Red.)	151,0	-4,00	-0,34	-0,75	
145	LwK 7.5.1(excl. Red.)	155,0	0,00	0,00	0,00	
146	LwK 7.5.1(excl. Red.)	146,0	-9,00	-0,78	-1,68	
149	LwK 7.5.1(excl. Red.)	140,0	-15,00	-1,29	-2,80	

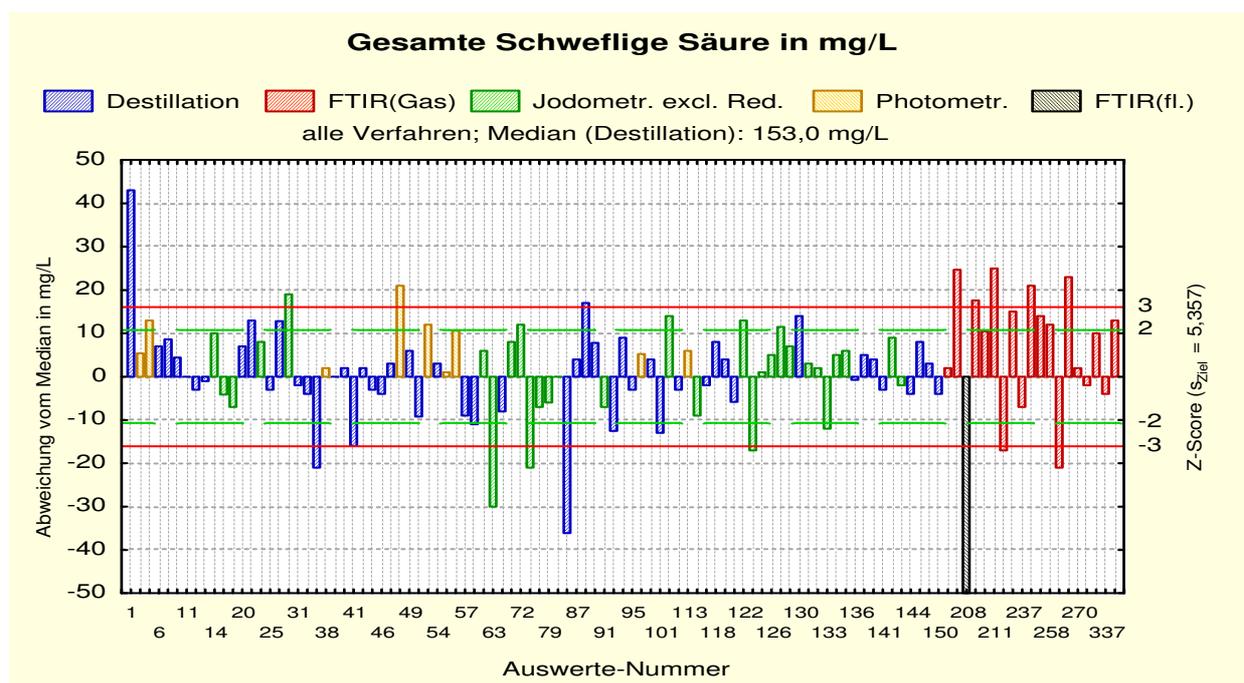
Hinweis: Beachte Anmerkung am Ende der Vorseite!

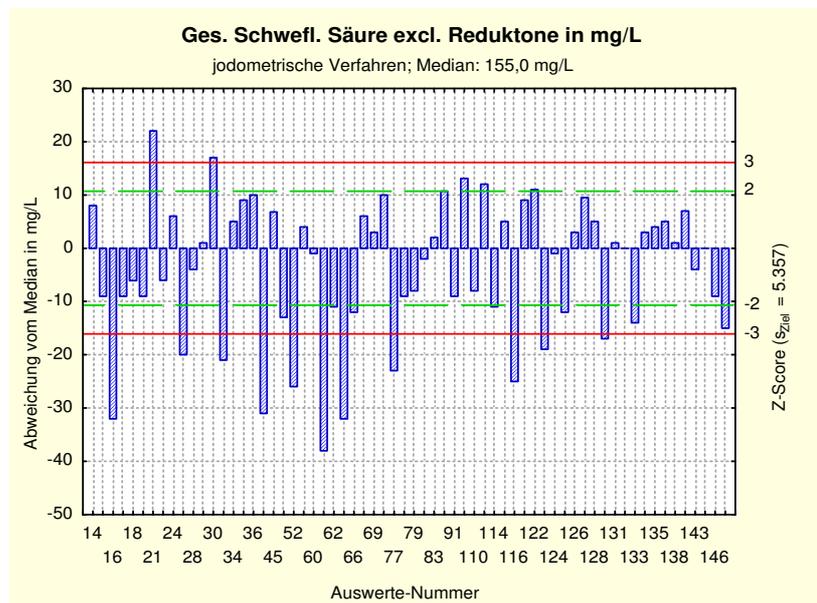
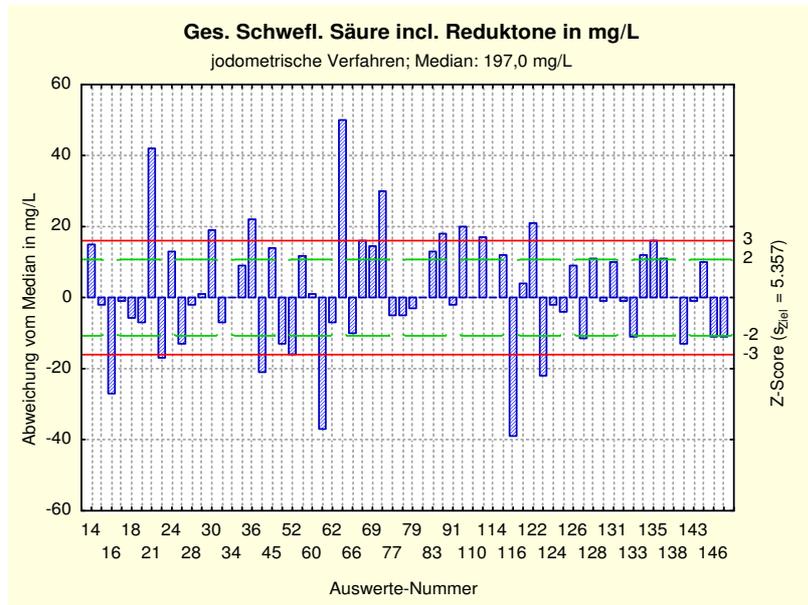
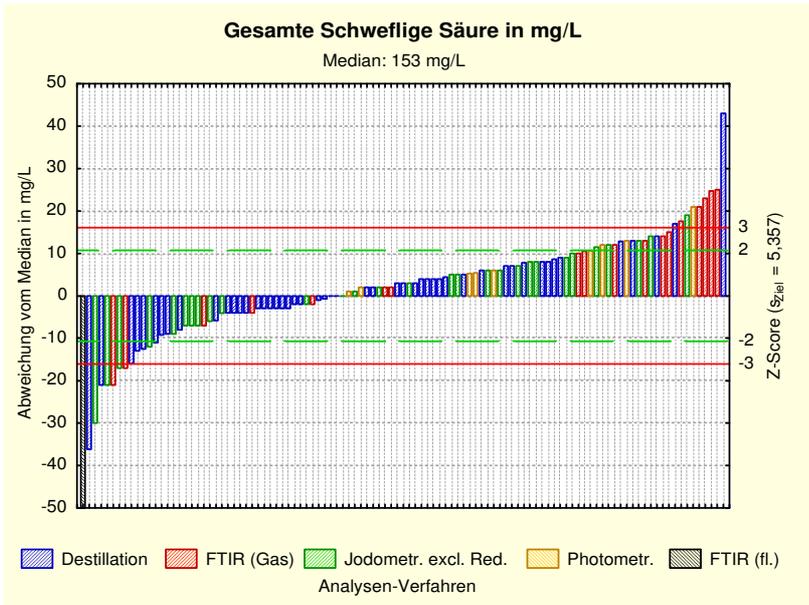
6.21.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillation		Jodometrie			
	alle Daten	ber. Daten	incl. Reduktone		excl. Reduktone	
			alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	50	48	64	58	64	60
Minimalwert	116,9	132,0	158,0	175,0	117,0	129,0
Mittelwert	153,37	153,24	198,78	198,64	150,98	152,93
Median	153,00	153,00	197,00	197,00	154,00	155,00
Maximalwert	196,0	170,0	247,0	219,0	177,0	177,0
Standardabweichung (s _L)	11,174	7,949	16,063	11,485	13,069	10,957
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,580	1,147	2,008	1,508	1,634	1,415
Zielstandardabweichung						
- n. Horwitz (s _H)	11,481	11,481	14,231	14,231	11,545	11,608
- experimentell (s _{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,97	0,69	1,13	0,81	1,13	0,94
Quotient (s _L /s _{exp})	2,09	1,48	3,00	2,14	2,44	2,05
Quotient (u _M /s _H)	0,14	0,10	0,14	0,11	0,14	0,12
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,29	0,21	0,37	0,28	0,30	0,26

6.21.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	2	164,00	4,81
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	13	154,22	10,40
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	9	149,69	8,81
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	24	152,51	7,04
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein modifiziert	1	166,00	
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	157,00	
	alle Destillationsverfahren	50	153,43	8,40
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	52	198,34	15,21
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	12	199,83	12,91
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktionabzug	64	198,69	14,42
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktionabzug	53	151,25	12,50
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktionabzug	11	153,44	15,08
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktionabzug	64	151,67	12,79
LwK 7.6	Pararosanilinverfahren	1	159,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren (z. B. FOSS FIAStar)	8	161,53	6,99
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	18	161,44	13,92
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Flüssigkeit	1	87,00	





6.22 Überdruck [bar]**6.22.1 Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 9.1	2,04	-0,370	-1,72	
06	LwK 9.3	2,50	0,090	0,42	
07	LwK 9.1	2,47	0,060	0,28	
08	LwK 9.1	1,89	-0,520	-2,42	
10	LwK 9.1	2,55	0,140	0,65	
12	LwK 9.3	2,49	0,080	0,37	
15	LwK 9.1	2,44	0,030	0,14	
24	LwK 9.3	2,40	-0,010	-0,05	
25	LwK 9.1	2,80	0,390	1,81	
26	LwK 9.1	1,90	-0,510	-2,37	
27	LwK 9.1	2,15	-0,260	-1,21	
29	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
30	LwK 9.1	2,60	0,190	0,88	
31	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
33	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
35	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
38	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
39	LwK 9.1	2,31	-0,100	-0,47	
40	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
41	LwK 9.1	2,20	-0,210	-0,98	
42	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
43	LwK 9.3	2,71	0,300	1,40	
44	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
45	LwK 9.1	2,10	-0,310	-1,44	
46	LwK 9.1	2,33	-0,080	-0,37	
47	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
48	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
49	LwK 9.1	2,55	0,140	0,65	
50	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
52	LwK 9.1	2,53	0,120	0,56	
53	LwK 9.1	2,54	0,130	0,60	
55	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
56	LwK 9.1	2,60	0,190	0,88	
57	LwK 9.1	2,60	0,190	0,88	
59	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
62	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
63	Steinfurth	2,30	-0,110	-0,51	
64	LwK 9.3	2,52	0,109	0,51	
69	Steinfurth	1,80	-0,610	-2,84	
70	LwK 9.3	2,46	0,050	0,23	
88	LwK 9.1	5,00	2,590	12,05	(*)
101	LwK 9.3	2,45	0,043	0,20	
110	LwK 9.1	2,00	-0,410	-1,91	
111	LwK 9.3	1,80	-0,610	-2,84	
112	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
113	LwK 9.1	2,20	-0,210	-0,98	
114	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
115	LwK 9.1	2,60	0,190	0,88	
116	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
117	LwK 9.1	2,41	0,000	0,00	
118	LwK 9.3	2,39	-0,020	-0,09	
119	LwK 9.1	2,10	-0,310	-1,44	
120	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
122	LwK 9.3	1,80	-0,610	-2,84	
123	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
124	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
125	LwK 9.1	2,50	0,090	0,42	
126	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
127	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
128	LwK 9.1	2,40	-0,010	-0,05	
129	LwK 9.1	2,30	-0,110	-0,51	
130	LwK 9.1	2,70	0,290	1,35	

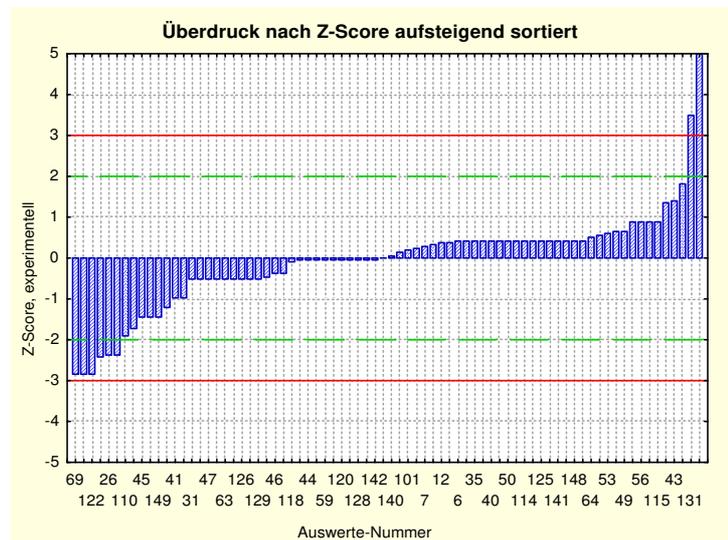
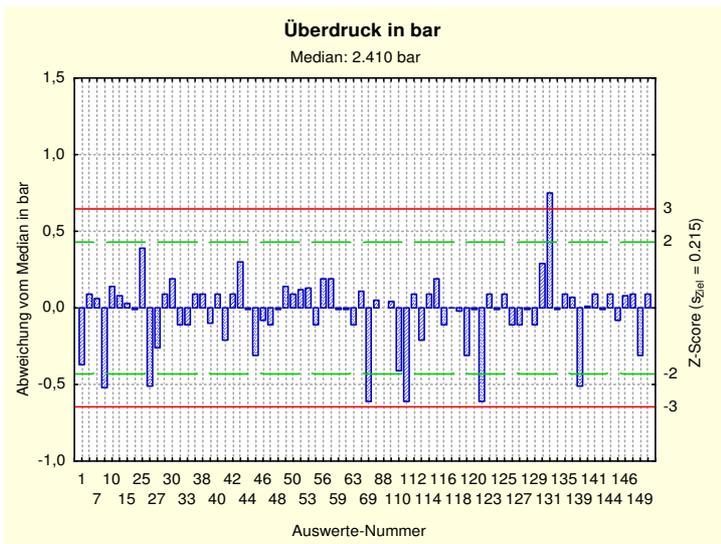
(*) Der markierte Wert weicht um mehr als 50 % vom maßgeblichen Median ab und bleibt unberücksichtigt.

6.22.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Überdruck [bar]	alle Daten
Gültige Werte	75
Minimalwert	1,80
Mittelwert	2,381
Median	2,410
Maximalwert	3,16
Standardabweichung (s_L)	0,232
Standardfehler des Mittelwertes	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, exp. (s_{exp})	0,215
Horvat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient (s_L/s_{exp})	1,08
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient (u_M/s_{exp})	0,12

6.22.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Einstich	Manometer-Messung im Einstichverfahren	33	2,369	0,186
geöffnet	Manometer-Messung an der geöffneten Probe	29	2,434	0,162
Carbo QC	Mehrfach-Volumenexpansion, z.B. CarboQC	11	2,435	0,284
Steinfurth	Messgerät der Fa. Steinfurth	3	2,222	0,356
Alle	alle Verfahren	76	2,404	0,175



6.23 Kohlendioxid (CO₂) in g/L

6.23.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 9.3 (CarboQC)	4,76	-0,025	-0,12	-0,08	
09	LwK 9.2 (OIV, titr.)	5,15	0,365	1,71	1,20	
12	LwK 9.3 (CarboQC)	4,69	-0,095	-0,44	-0,31	
18	Laser-Infrarot(ACM LabCo)	3,13	-1,655	-7,74	-5,43	(**)
24	LwK 9.3 (CarboQC)	4,75	-0,035	-0,16	-0,11	
39	LwK 9.3 (CarboQC)	4,87	0,085	0,40	0,28	
43	LwK 9.3 (CarboQC)	4,78	-0,005	-0,02	-0,02	
63	sonstige	5,00	0,215	1,01	0,70	
64	LwK 9.3 (CarboQC)	4,81	0,025	0,12	0,08	
70	LwK 9.3 (CarboQC)	4,83	0,045	0,21	0,15	
101	LwK 9.3 (CarboQC)	4,67	-0,116	-0,54	-0,38	
111	LwK 9.3 (CarboQC)	4,20	-0,585	-2,74	-1,92	
117	LwK 9.2 (OIV, titr.)	4,99	0,205	0,96	0,67	
118	LwK 9.3 (CarboQC)	4,72	-0,065	-0,30	-0,21	
122	LwK 9.3 (CarboQC)	4,19	-0,595	-2,78	-1,95	
131	LwK 9.3 (CarboQC)	4,79	0,005	0,02	0,02	
136	LwK 9.3 (CarboQC)	4,80	0,015	0,07	0,05	

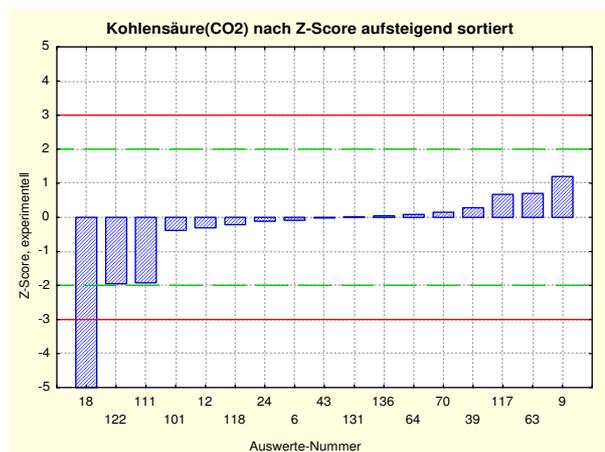
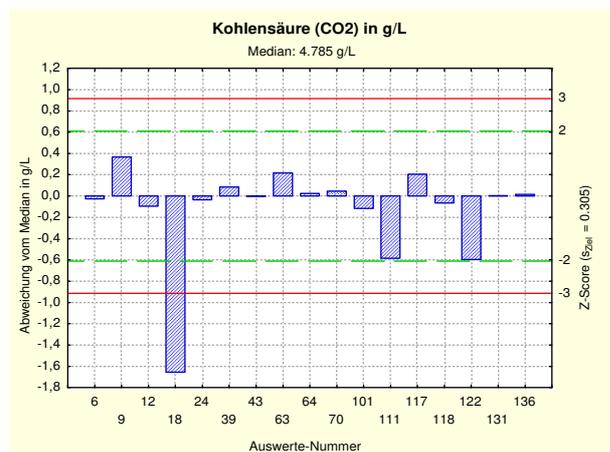
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.23.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Kohlendioxid [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	17	16
Minimalwert	3,13	4,19
Mittelwert	4,655	4,750
Median	4,780	4,785
Maximalwert	5,15	5,15
Standardabweichung (s _L)	0,461	0,250
Standardfehler des Mittelwertes	0,112	0,062
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,214	0,214
Zielstandardabweichung, exp. (s _{exp} herk.)	0,305	0,305
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,16	1,17
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)	1,51	0,82
Quotient (u _M /s _H)	0,52	0,29
Quotient (u _M /s _{exp})	0,37	0,20

6.23.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 9.2 (OIV, titr.)	OIV-MA-AS314-01	2	5,07	0,128
LwK 9.3 (CarboQC)	Mehrfach-Volumenexpansion	13	4,74	0,095
Laser-Infrarot(ACM LabCo)	Laser-Infrarotspektrometrie	1	3,13	
sonstige	Angaben zum Messverfahren fehlen	1	5,00	
Alle	alle Verfahren	17	4,76	0,206



6.24 Kohlensäure-Überdruck (CO₂) in bar

6.24.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 9.3 (CarboQC)	2,31	-0,007	-0,03	
09	LwK 9.2 (OIV, titr.)	2,57	0,256	1,19	
12	LwK 9.3 (CarboQC)	2,26	-0,057	-0,26	
18	Laser-Infrarot(ACM LabCo)	1,18	-1,141	-5,30	(**)
24	LwK 9.3 (CarboQC)	2,30	-0,016	-0,07	
39	LwK 9.3 (CarboQC)	2,38	0,061	0,28	
43	LwK 9.3 (CarboQC)	2,32	0,000	0,00	
63	sonstige	2,47	0,153	0,71	
64	LwK 9.3 (CarboQC)	2,34	0,023	0,11	
69	Steinfurth	1,80	0,517	2,40	
101	LwK 9.3 (CarboQC)	2,25	-0,071	-0,33	
111	LwK 9.3 (CarboQC)	1,92	-0,395	-1,84	
117	LwK 9.2 (OIV, titr.)	2,47	0,149	0,69	
118	LwK 9.3 (CarboQC)	2,28	-0,036	-0,17	
122	LwK 9.3 (CarboQC)	1,91	-0,404	-1,88	
131	LwK 9.3 (CarboQC)	2,32	0,007	0,03	
136	LwK 9.3 (CarboQC)	2,34	0,018	0,09	

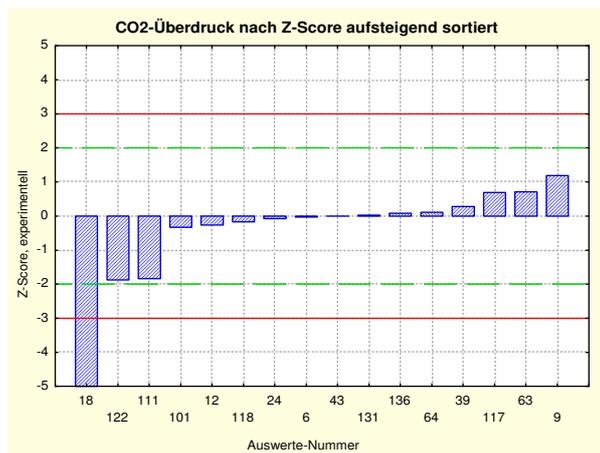
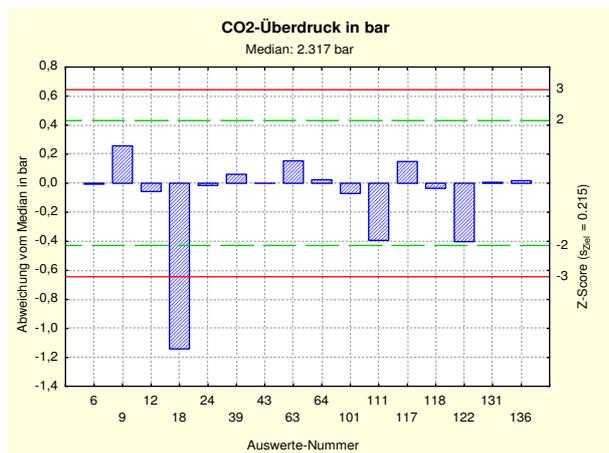
Die Daten zur Auswertenummer 69 lagen zur Zeit der Auswertung nicht vor und sind daher nicht berücksichtigt.

6.24.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Kohlensäure-Überdruck [bar]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	16	15
Minimalwert	1,18	1,91
Mittelwert	2,226	2,296
Median	2,313	2,317
Maximalwert	2,57	2,57
Standardabweichung (s _L)	0,328	0,177
Standardfehler des Mittelwertes	0,082	0,046
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)		
Zielstandardabweichung, exp. (s _{exp} herk.)	0,215	0,215
Horvat-Wert (s _L /s _H)		
Quotient (s _L /s _{exp})	1,53	0,82
Quotient (u _M /s _H)		
Quotient (u _M /s _{exp})	0,38	0,21

6.24.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 9.2 (OIV, titr.)	OIV-MA-AS314-01	2	2,52	0,086
LwK 9.3 (CarboQC)	Mehrfach-Volumenexpansion	12	2,29	0,065
Laser-Infrarot(ACM LabCo)	Laser-Infrarotspektrometrie	1	1,18	
sonstige	Angaben zum Messverfahren fehlen	1	2,47	
Alle	alle Verfahren	16	2,29	0,165



6.25 Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
01	Aussehen: blassgelb, blank, deutliche CO ₂ -Entbindung, schäumend beim Eingießen; Geruch: wenig, leicht alkoholisch, leichtes Pfirsicharoma, Muskatnote; Geschmack: desgleichen, leichtes Perlen auf der Zunge, handelsüblich
12	QZ 3,0; Geruch: gelbe Früchte, Birne, Mirabelle Geschmack: feinperlige Kohlensäure, harmonisch, lebendig
14	Aussehen: Farbe leicht grün-gelb, klar; Geruch: sauber, fehlerfrei, leicht säuerlich aber passend, fruchtbetont wenig; Geschmack: feinherb, feinperliger Kohlensäure schön eingebunden, Säure; harmonisch, füllig, wenig, Mittel im Abgang; Punkte (5 Punkte Skala): 3,0
15	Nase: reife gelbe Früchte, leichte florale Aromen, sauber; Mund: schöne Perligkeit, eher neutral im Geschmack, wenig Nachhall, leichte Aromen von gelben Früchten
16	Im Geruch leicht buttrige Note, jedoch kein BSA. Leichter Geruch + Geschmack nach Schwefel.
17	sensorisch einwandfrei, fruchtig, Kohlensäure deutlich wahrnehmbar,
18	relativ hohe freie SO ₂ , in der Nase fruchtig, im Abgang süßlich/Aprikose/Pfirsich, keine Fehler
20	Geruch: deutlich SO ₂ , ansonsten sauber, neutral, wenig fruchtig; Geschmack: zu viel CO ₂ , ansonsten fehlerfrei, leicht säuerlich; 2,7Punkte
21	fehlerfrei, sauber
22	Farbe: blass bis leicht grüngelb, blank; Bukett: dezente Frucht-Noten, leicht aromatisch, fehlerfrei; Geschmack: leicht fruchtig und aromatisch, dezent säurebetont, harmonisch, fehlerfrei; Punktzahl der Sensorik: 3,0
24	3,0 Punkte
26	In der Nase zunächst etwas reduktiv, verflüchtigt sich dieser Eindruck schnell und Aromen von Mango und Pfirsich treten hervor. Der Perlwein wirkt im Geschmack angenehm leicht, Süße und Säure harmonisieren sehr gut. Die CO ₂ entbindet sich im Mund langsam und für Perlwein sehr cremig. Im 5-Punkte Schema bewerten wir den Wein wie folgt: Geruch: 3,0 Geschmack: 3,5 Harmonie: 3,5 Gesamturteil: 3,33
27	Der Qualitätsperlwein ist sensorisch fehlerfrei. Die Kohlensäure ist feinperliger und gut eingebunden. Leider fehlt dem Perlwein etwas Frucht und Aroma in Geruch und Geschmack.
28	duftig, aromatisch, harmonisch, reif, feines Mousseux
29	Die freie SO ₂ ist im Geruch deutlich wahrnehmbar. Ausreichende Gäraromen, säurelastig, im Abgang leichter Bitterton.
30	Produkt: o.k. aromatisch, saftig, herzhaft, QZ4,0
31	Perlwein hat eine sehr feine Perlage, Farbe hellgelb, im Duft ist er sehr dezent und zeigt schon eine gewisse Reife. Im Geschmack zeigt er eine harmonische Süße/Säure, auf der Zunge und im Abgang zeigt er eine leichte Adstringenz.
32	klare, verhaltene Frucht, fehlerfrei, störende SO ₂ , schlanke Struktur, elegant, schönes süße/saure Spiel
33	Frisch, fruchtig; 3,0-3,5Punkte
34	Aussehen: klar, schwach gelblich. Geruch: dumpf, böckserartige Fehltonen, wenig Frucht. Geschmack: wenig Frucht, dumpf, verschlossen.
35	Frisch, fruchtiger Perlwein, Aromen von Pfirsich, gelben Sommerfrüchten, leicht florale Aromen.
36	Nase: fruchtig, zitrus, etwas stechend (SO ₂ oder CO ₂), Geschmack: harmonisches Süße/Säure Verhältnis; Punkte:3
37	fruchtig, lieblich, leicht bitter, schmelzig
38	Ohne Beanstandung. Leichte SO ₂ -Nase, ansonsten ok.
40	Sensorischer Befund der Probe FT17LnnP01: in Ordnung
41	fruchtig, Blumig, Zuckermelone, grüne Banane, Spritzig, ein wenig Restsüße
42	Nase: dumpf; UTA-Neigung; Geschmack: dünn; schönes Süße-Säure-Spiel; 2,33
44	Nase deutlich SO ₂ und leicht dumpf (0,05g/hl CUSO ₄) / Geschmack sauber
45	gereift, UTA gefährdet, Alterungspotential ausgeschöpft, Qualitätszahl LWK 2,5
46	gelblich-grün, fruchtige Aromatik, ausgewogene Süße-Säure-Balance; 3,75 Punkte von 5
47	Für einen 16er zu weit gereift, sonst fehlerfrei,
48	Der Perlwein entspricht einer einfachen Basisqualität. Die Anforderungen für die Qualitätsweinprüfung sind erfüllt.
50	Citrus, Apfel, Pfirsich = o.K.
51	Schöne CO ₂ . Leichte Alterungsnote. Im Abgang leicht sauer. Grüner Apfel und Maracuja in der Nase. Sauber und fruchtig.
53	Geruch sehr neutral. Frische Säure, nette Restsüße. Mousseux OK.
54	Ohne Beanstandung
56	harmonisch, spritzig, feines Mousseux, reife Art. Der zulässige Druck für Secco ist laut unserer Messung überschritten.

Fortsetzung: Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
57	In der Nase herrschen Aromen nach Quitte und reifer Birne sowie Limette vor. Die Nase wirkt etwas überreif mit teilweise hefigen Noten. Im Geschmack dominiert der Restzucker. Der Secco wirkt etwas körperlos und platt. Im Nachgang ist die Säure deutlich uneingebunden und recht spitz mit leicht metallischem Nachgeschmack.
58	fruchtig, dezentes mousieren , betonte Süße, leicht bitter im Abgang
60	Geruch: 3,0 Punkte, neutral, keine Rebsorte erkennbar, fehlerfrei; Harmonie: 2,5 Punkte, Säure & Restzucker harmonisch; Geschmack: 2,0 Punkte
62	Secco weiß; Zitrusnote im Duft, schlank, mittlere Länge.Gute Balance im Restzucker / Säureverhältnis. In der Ausprägung Riesling-Typ mit geringem Bukettsorten-Verschnittanteil.
68	nicht erfolgt
78	Geruch: 2,0 Punkte; Geschmack: 2,0 Punkte; Harmonie: 1,5 Punkte
79	Geruch: 2,0 Punkte Geschmack: 2,0 Punkte Harmonie: 1,5 Punkte
110	Geruch, Geschmack o.K. Punkte 3,2
111	Geruch: 2,8 Punkte Geschmack 2,8 Punkte // Der Wein präsentiert sich dezent fruchtig und aromatisch. Angenehme Säure und Restzucker
113	leicht bitter, SO2 deutlich wahrnehmbar, sauber
114	schwach in Farbe und Geschmack; kleiner Wein; bestenfalls 1,5 Pkt.
115	Geruch: 3,0 Punkte; Geschmack 3,2 Punkte; Harmonie: 2,3 Punkte; Qualitätszahl:2,83 Punkte
116	Die Probe ist ohne sensorische Beanstandungen
117	2,5-2,5-2,0 (leicht säuerlich im Nachhall); 2,33 Punkte
118	Aussehen: klar, hell, mit leicht gelben Reflexen, moussierend; Geruch: Nase verhalten, dezent fruchtig, mit grünen Noten; Geschmack: trocken, wenig Körper, dezent gelbfruchtig mit Zitrusnoten, verhaltene Säure, im Abgang leicht bitter, Kohlensäure gut eingebunden
119	Keine Beanstandung, entspricht den handelsüblichen Qualitätskriterien.
120	Der Qualitätsperlwein ist sehr fruchtig und sauber in Geruch und Geschmack. Qualitätszahl: 3,5 Punkte
121	In Geruch und Geschmack sauber
122	Geruch: 2,8 Punkte Geschmack 2,8 Punkte // Der Wein präsentiert sich dezent fruchtig und aromatisch. Angenehme Säure und Restzucker
123	Geschmack ist frisch, fruchtig und sauber; feines Bouquet; Druck ist grenzwertig
124	Der Perlwein ist sehr sauber und fruchtig in Geruch und Geschmack; Qualitätszahl: 3,5 Punkte; Die Kohlensäure ist sehr feinperlig und gut eingebunden.
125	entschuldigt
126	keine Beanstandung
127	Sensorischer Befund: Leichter Perlwein mit angenehmer Zucker-Säure-Balance
128	o.k.
129	leichter UTA-Ton
130	Farbe: blass gelb, grüne Reflexe; Geruch: sauber; frisch; gelbe Noten ; Citrus; etwas Apfel; Geschmack: sauber, frisch, Citrus ; gelbe Noten schmeckbare Säure , Abgang schmeckbare Süße; Pkte 3,0; Wein hat natürliche Restsüße; Der Druck überschreitet den gesetzlichen Grenzwert um 0,2bar (2,5bar);
131	sehr fruchtig mit anklängen von Citrus und leichter Muskatnote; Bukettrebsorten, die angenehme Süße harmoniert wunderbar mit der abgepufferten Säure, feinperlig
133	der Qualitätsperlwein ist fein-fruchtig, säurebetont und hat eine angenehme Süße.
135	Sehr fruchtig (Apfel, Grapefruit, Kiwi, Citrus); angenehm leichte Art; harmonisch; belebender Abgang.
137	schöne Perlage. Als 2016er Perlwein sehr gereift, kein Alterungspotential, wenig Frucht, Qualitätszahl:2,5
138	o.k. QZ 2,67
139	ohne nachteiligen sensorischen Befund
140	Fruchtbetont (Citrus, Limette, etwas Weinbergspfirsich), schlank, elegant mit ausgewogener Gesamtsäure, feiner Süße, und erfrischender Kohlensäure (Qualitätszahl: 3,8)
141	frische, junge Apfelblume mit Zitronenfrucht und dezenter Minzenote; zeigt im Geschmack ein feines Musseaux mit einer pikanten Fruchtsüße und schlanker Säurefrische Geruch: 2,0; Geschmack: 2,5; Harmonie: 2,5; QZ: 2,33
143	Farbe: typisch, blank; Geruch und Geschmack: reintonig, fruchtig, aromatisch; feinperlig; fehlerfrei
144	Reintonig sauber, Sensorisch ohne Fehler ; entspricht den Analytischen Anforderungen eines Qualitätsperlwein
146	frisch, fruchtig, leicht reduktive Noten, leichter Böxer, harmonisch Glatt
147	Der Perlwein ist blumit, fruchtig im Geschmack nach Pfirsich, Cassis
148	Keine wesentliche Beanstandung. Frisches, angenehmes Süsse-Säure-Spiel.
149	hellgelb, klar, leicht perlend, fruchtig, leicht, ausgewogen, dezenter Körper, kurzer Abgang.
150	Citrus, gelbe Frucht, Stimming; CO2 lang anhaltend

7 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
ABC-Labor GmbH, Dr.Ralf Lutterbach u. Dr. Cornelia Schröder	54486	Mülheim
Ahr-Winzer eG, Betriebslabor	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Analytisches Labor Anselmann	67483	Edesheim
Analytisches Labor Link, Niederlassung Rheinhessen	67551	Worms-Pfeddersheim
Analytisches Labor Link, Zweigstelle Weisenheim	67256	Weisenheim a.S.
Arauner Paul GmbH & Co KG	97306	Kitzingen/Main
Austria Juice Germany GmbH	55411	Bingen
Baden-Badener Winzergenossenschaft eG	76534	Baden-Baden
Badischer Winzerkeller EG	79206	Breisach
Bay. Landesanstalt für Weinbau und Obstbau, Abt. Oenologie und Analytik	97209	Veitshöchheim
Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit	97082	Würzburg
Bezirksschellerei Markgräflerland eG	79588	Efringen-Kirchen
Binderer St. Ursula GmbH	55387	Bingen
Braun Weinlabor e.K., Inh. Günter Braun	67435	Neustadt/W.
Bundesamt für Weinbau	A-7000	Eisenstadt
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Freiburg	79114	Freiburg
Chemisches und Veterinäruntersuchungsamt Stuttgart	70736	Stuttgart
Coop	CH 4133	Pratteln
Deutsches Weintor eG	76831	Ilbesheim
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum - Rheinhessen-Nahe-Hunsrück	55276	Oppenheim
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum - Rheinpfalz	67435	Neustadt/W.
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum Mosel,		
Abtlg. Oenologie und Kellerwirtschaft	54470	Bernkastel-Kues
Dr. Karl-Heinz Franzen und Hans-Jürgen Franzen	56814	Bremm
Fellbacher Weingärtner eG	70734	Fellbach
Felsengartenkellerei Besigheim eG	74394	Besigheim
Franz Wilhelm Langguth Erben GmbH & Co. KG, Abtlg. Qualitätssicherung	56841	Traben-Trarbach
Gebietswinzergenossenschaft Palmberg eG	67229	Laumersheim
Genossenschaftskellerei Heilbronn-Erlenbach-Weinsberg eG	74076	Heilbronn
Heim'sche Privat-Sektkellerei	67433	Neustadt/W.
Hochschule Geisenheim University	65366	Geisenheim
Institut f. Agrar- u. Umweltanalytik Dipl. Ing. Werner Bannach	06632	Freyburg / Unstrut
Institut für Hygiene und Umwelt Abteilung Lebensmittel II	20539	Hamburg
Institut Heidger KG	54518	Osann-Monzel
Jakob Vogel, Inh. Werner Vogel	65366	Geisenheim
Jordan Analytik	97246	Eibelsstadt
Josef Drathen GmbH & Co KG	56856	Zell
Julius Kühn Institut	76833	Sieboldingen
Keller Oenolab	55278	Dexheim
Klingler Weinlabor	71336	Waiblingen
Kloster Limburg Weinhandel GmbH, Weinlabor Mittelhaardt	67098	Bad Dürkheim
KLUG Fachgroßhandel f. Kellereibedarf GmbH	55450	Langenlonsheim
Kost GmbH & Co. KG	55459	Aspishheim
Lacher Laboratorium	79238	Ehrenkirchen
Landesamt für Verbraucherschutz Sachsen-Anhalt	06128	Halle/Saale
Landesbetrieb Hessisches Landeslabor	65203	Wiesbaden
Landesuntersuchungsamt		
Inst. f. Lebensmittelchemie und Arzneimittelprüfung	55129	Mainz
Lehr- und Forschungszentrum für Wein- und Obstbau	A-3400	Klosterneuburg
PK-Weinlabor	67273	Weisenheim/Berg
Raiffeisen Lagerhaus Absdorf - Ziersdorf eGen Weinbaucenter Langenlois	A-3550	Langenlois / Absdorf
Reh-Kendermann GmbH Betriebslabor Bingen	55411	Bingen
Rheinberg-Kellerei GmbH	55411	Bingen
Rimuss- und Weinkellerei Rahm AG	CH 8215	Hallau / Karlstein
Rolf Willy GmbH	74226	Nordheim
Rotkäppchen-Mumm Sektkellereien GmbH	65343	Eltville
Sektkellerei Am Turm Deidesheim-Speyer GmbH	67346	Speyer
Sektkellerei Henkell & Söhnlein	65187	Wiesbaden
Sektkellerei Schloss Wachenheim AG Labor	67157	Wachenheim
Sektkellerei Schloss Wachenheim, Betriebslabor	54294	Trier
SGS INSTITUT FRESENIUS GmbH	79108	Freiburg
Staatliche Lehr- und Versuchsanstalt	74189	Weinsberg
Thüringer Landesamt für Verbraucherschutz	99947	Bad Langensalza
Tröndlin Önologie GmbH	79418	Schliengen

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
Wagner Vinocare GmbH	67278	Bockenheim
Wein- u. Bodенlabor Dr. Nilles	97332	Volkach
Weinchemisches Labor	76831	Birkweiler
Weinchemisches Labor Schöller	55294	Bodenheim
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG; Betrieb Bönningheim	74357	Bönningheim
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG; Betrieb Brackenheim	74336	Brackenheim
Weingut Graf	76835	Weyher/Pfalz
Weinkellerei Adam Trautwein	55237	Lonsheim
Weinkellerei Andreas Oster	56812	Cochem
Weinkellerei Einig-Zenzen GmbH & Co KG	56759	Kaisersesch
Weinkellerei Hechtsheim GmbH	55129	Mainz
Weinkellerei Müller GmbH & Co KG	69181	Leimen
Weinkellerei Ortwin Welter GmbH & Co KG	55270	Engelstadt
Weinkellerei Peter Herres KG	54292	Trier
Weinkellerei Peter Mertes KG	54470	Bernkastel-Kues
Weinkellerei Schmitt Söhne GmbH	54340	Longuich
Weinkellerei Wangler	74232	Abstatt
Weinlabor Beate Lex, Inh. Rudolf Lex	54340	Klüsserath
Weinlabor Bollig	54349	Trittenheim
Weinlabor Briegel e.K.	67146	Deidesheim
Weinlabor Carl Klein GmbH	97318	Kitzingen
Weinlabor Eckert	67574	Osthofen
Weinlabor Emmel	67483	Edesheim
Weinlabor Frank	55283	Nierstein
Weinlabor Geissel	67169	Kallstadt
Weinlabor J. Neumann	67278	Bockenheim
Weinlabor Jochen Faber	54492	Erden
Weinlabor Keßler	76829	Landau
Weinlabor Kiefer	67487	Maikammer
Weinlabor Klös	67578	Gimbsheim
Weinlabor Kost	76833	Frankweiler
Weinlabor Krauß	55291	Saulheim
Weinlabor Matthias Schreml	55452	Guldental
Weinlabor Michaeli	54453	Nittel
Weinlabor Mies	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Weinlabor Mündel-Börtzler	67487	Maikammer
Weinlabor Peitz	55595	Wallhausen
Weinlabor Porn	54518	Osann-Monzel
Weinlabor Porten , Inh. Mechthild Steck	56814	Bruttig-Fankel
Weinlabor Rößler	55599	Eckelsheim
Weinlabor Schloeder	54347	Neumagen-Dhron
Weinlabor U. Lieser	56841	Traben-Trarbach
Weinlabor Weinbautechniker	54536	Kröv
Weinlabor Welcz	69207	Sandhausen
Weinlaboratorien Dr. E. M. Kleinknecht	55543	Bad Kreuznach
Weinlaboratorien Dr. E. M. Kleinknecht	55232	Alzey
Wine-Analytics	54346	Mehring
Winzergemeinschaft Franken eG	97318	Kitzingen
Winzergenossenschaft Moselland eG	54470	Bernkastel-Kues
Winzergenossenschaft Moselland eG, Betriebslabor Rhodt	76835	Rhodt
Winzergenossenschaft Schliengen-Müllheim	79418	Schliengen
Winzerkeller Hex vom Dasenstein	77876	Kappelrodeck
Winzerkeller Wiesloch eG	69168	Wiesloch
Winzerverein Hagnau	88709	Hagnau
WIV Wein International AG	55450	Langenlonsheim
WSB-Labor Ruzycycki GbR	55278	Hahnheim
WSB-Labor Ruzycycki GbR, Zweigstelle Nierstein	55283	Nierstein
Württembergische Weingärtner-Zentralgenossenschaft e.G.	71696	Mögglingen
Zentrallabor Witowski	55232	Alzey
Zentrallabor Witowski, Zweigst. Bechtheim	67595	Bechtheim
Zimmermann-Graeff&Müller GmbH & Co KG	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH	56856	Zell
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH & Co. - Zwgstelle Werk 2 -	56856	Zell