



**Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz**

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2019“

Teil 1

**Durchführung und Ergebnisse der Untersuchungen
insbesondere eines Rotweins (FT19P01)**

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

Stand: 25.02.2020

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	8
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Auswahl des Untersuchungsmaterials	8
2.1.2	Angaben zu den Prüfgütern	8
2.1.3	Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen	9
2.1.4	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT19P01	10
2.1.5	Verteilung des Untersuchungsgutes	12
2.2	Informationen zur Behandlung und Untersuchung der Proben	13
2.3	Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung	15
2.4	Ergebnisauswertung	17
2.4.1	Bewertung der Laborleistung	17
2.4.2	Untere Grenze des Anwendungsbereiches	18
2.4.3	Spezielle Regelungen für einzelne Parameter	19
2.4.3.1	Vorhandener Alkohol	19
2.4.3.2	Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	19
2.4.3.3	Vergärbare Zucker	20
2.4.3.4	Flüchtige Säure	20
2.4.3.5	Acetat (als Essigsäure)	21
2.4.3.6	Gesamte Äpfelsäure	21
2.4.3.7	Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure	22
3	Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen	23
3.1	Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses	23
3.2	Gesamtergebnis für das Rotweinprüfgut (FT19P01)	25
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	30
4.3	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure	31
4.4	Schweflige Säure und Reduktone	32
4.4.1	Reduktone	32
4.4.2	Freie Schweflige Säure	33
4.4.3	Gesamte Schweflige Säure	34
5	Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen	35
5.1	Spezielle Gegebenheiten für die FTIR-Ergebnisse einzelner Parameter	35
5.1.1	Gesamtalkohol	35
5.1.2	Kodierung der Analysenmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt	35
5.1.3	Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter	35
5.1.4	Vergärbare Zucker	36

5.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	37
5.3	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT19P01	38
5.4	Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter	41
6	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern	42
6.1	Berechnete Parameter	42
6.2	Darstellung der analytischen Ergebnisse	43
6.2.1	Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse	43
6.2.2	Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse	43
6.2.3	Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren	44
6.2.4	Aufbau der Graphiken	44
6.3	Relative Dichte 20 °C/20 °C	46
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	46
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	47
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse	49
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	49
6.4	Gesamtalkohol [g/L]	51
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	51
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse	52
6.4.3	Deskriptive Ergebnisse	53
6.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	53
6.5	Vorhandener Alkohol [g/L]	55
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	55
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	57
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse	58
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	58
6.6	Gesamtextrakt [g/L]	60
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	60
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	61
6.6.3	Deskriptive Ergebnisse	62
6.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	62
6.7	Zuckerfreier Extrakt [g/L]	64
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	64
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	65
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse	66
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	66
6.8	Vergärbare Zucker [g/L]	68
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	68
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	69
6.8.3	Reduktometrische Laborergebnisse	71
6.8.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	71
6.8.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	73
6.8.6	Deskriptive Ergebnisse	74
6.8.7	Angaben zu den Analyseverfahren	74

6.9	Glucose [g/L]	78
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	78
6.9.2	FTIR-Laborergebnisse	79
6.9.3	Deskriptive Ergebnisse	80
6.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	80
6.10	Fructose [g/L]	82
6.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	82
6.10.2	FTIR-Laborergebnisse	83
6.10.3	Deskriptive Ergebnisse	84
6.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	84
6.11	Glycerin [g/L]	86
6.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	86
6.11.2	FTIR-Laborergebnisse	86
6.11.3	Deskriptive Ergebnisse	87
6.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	87
6.12	pH-Wert	89
6.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	89
6.12.2	FTIR-Laborergebnisse	90
6.12.3	Deskriptive Ergebnisse	91
6.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	91
6.13	Gesamtsäure [g/L]	93
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse	93
6.13.1	FTIR-Laborergebnisse	94
6.13.2	Deskriptive Ergebnisse	96
6.13.3	Angaben zu den Analyseverfahren	96
6.14	Weinsäure [g/L]	98
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse	98
6.14.2	FTIR-Laborergebnisse	98
6.14.3	Deskriptive Ergebnisse	100
6.14.4	Angaben zu den Analyseverfahren	100
6.15	Flüchtige Säure [g/L]	102
6.15.1	Herkömmliche Laborergebnisse	102
6.15.2	FTIR-Laborergebnisse	102
6.15.3	Deskriptive Ergebnisse	104
6.15.4	Angaben zu den Analyseverfahren	104
6.16	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	106
6.16.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	106
6.16.2	Deskriptive Ergebnisse	106
6.16.3	Angaben zu den Analyseverfahren	107
6.17	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	108
6.17.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	108
6.17.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	108
6.17.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	109
6.17.4	Deskriptive Ergebnisse	110
6.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	110

6.18	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	113
6.18.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	113
6.18.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	113
6.18.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	114
6.18.4	Deskriptive Ergebnisse	115
6.18.5	Angaben zu den Analyseverfahren	115
6.19	Reduktone [mg/L]	118
6.19.1	Laborergebnisse	118
6.19.2	Deskriptive Ergebnisse	119
6.19.3	Angaben zu den Analyseverfahren	120
6.20	Freie Schweflige Säure [mg/L]	121
6.20.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	121
6.20.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	122
6.20.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	123
6.20.4	Deskriptive Ergebnisse	123
6.20.5	Angaben zu den Analyseverfahren	124
6.21	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	127
6.21.1	Laborergebnisse	127
6.21.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)	129
6.21.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	130
6.21.4	Deskriptive Ergebnisse	131
6.21.5	Angaben zu den Analyseverfahren	131
6.22	Sensorische Befunde	133
7	Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer	135

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 2019 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 02. April und dem 30. April 2019 durchgeführt, während die an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung beteiligten Laboratorien die Untersuchungen bis zum 10. Mai 2019 durchführten, soweit nicht in Einzelfällen ein späterer Abgabetermin vereinbart wurde. Insgesamt 123 zugelassene und eingeladene Laboratorien, da-

von 88 Laboratorien für die FTIR-Laborvergleichsuntersuchung, haben sich zur Teilnahme angemeldet. Alle angemeldeten Teilnehmer legten 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 Rotwein (FT19P01) im Detail.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Auswahl des Untersuchungsmaterials

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

Nach der oben genannten Verwaltungsvorschrift müssen bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassene Laboratorien für die Parameter, zu deren Untersuchung sie zugelassen sind, in einem Turnus von drei Jahren die Teilnahme an einer Laborvergleichsuntersuchung nachweisen. Um den genannten Kriterien für die Auswahl des Untersuchungsgutes und den Vorgaben der Verwaltungsvorschrift auch für Teilnehmer im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse zu genügen, wird als allen Teilnehmern zur Verfügung gestelltes Prüfgut im Turnus von drei Jahren jeweils ein Weißwein, ein Rotwein und ein schäumendes Weinerzeugnis, in der Regel ein Perlwein verwendet. Nachdem im Jahr 2017 ein Perlwein und im Jahr 2018 ein Weißwein als Prüfgut für alle Teilnehmer eingesetzt wurden, war in diesem Jahr ein Rotwein auszuwählen.

2.1.2 Angaben zu den Prüfgütern

Für die Durchführung der Untersuchungen wurde das Probenmaterial (Prüfgüter) in diesem Jahr sowohl als lose Ware, aus einer Herstellung im Technikums-Maßstab und verkaufsfertig aus gewerblicher Herstellung bezogen. Mindestens ein Wein sollte einen erhöhten Gehalt an Flüchtigter Säure aufweisen. Als Besonderheiten wurden zwei Weine des Jahrgangs 2014 und ein Wein aus einem bisher nicht berücksichtigten deutschen Anbaugebiet ausgewählt. Die Proben für die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen wurden als FT19LnnP01 bis FT19LnnP05 kodiert. Hierbei vertreten die Buchstaben "Lnn" eine Teilnehmernummer, die bereits bei der Anmeldung vergeben wird. Sie dient der eindeutigen Identifizierung von Rohdaten der FTIR-

Untersuchung. Bei der Beschreibung der Prüfgüter, der Dokumentation und Besprechung der Ergebnisse entfällt dieser Teil der Probenkodierung. Folgende Prüfgüter wurden eingesetzt:

FT19P01: Verschnitt roter Qualitätsweine der Pfalz. Durch Zusammenführen verschiedener Teilpartien mit unterschiedlichem Restzuckergehalt wurde der gewünschte Gehalt von etwa 5 g/L und damit im Bereich der Zulässigkeit der Geschmacksangabe 'trocken' sowie ein ausreichender Gehalt an Freier Schwefliger Säure eingestellt. Als weitere Verschnittkomponente wurde ein Rotwein der Rebsorte Regent verwendet, um einen etwas höheren Gehalt an Reduktionen zu erreichen. Vorhandener Alkohol 102 g/L, Restzucker 6,0 g/L, Gesamtsäure 5,3 g/L.

FT19P02: 2017er Südafrika, Chenin blanc, sehr trocken. Der in 0,75-L-Flaschen gefüllt erhaltene Wein wurde gestürzt und unverändert ohne Nachschwefeln in die üblichen 0,33-L-Probeflaschen gefüllt. Vorhandener Alkohol 102 g/L, Restzucker 2,9 g/L, Gesamtsäure 5,5 g/L.

FT19P03: 2018er Rheinhessen, Weißburgunder, lieblich. Der trockene Grundwein mit erhöhtem Gehalt an Flüchtiger Säure wurde mit Süßreserve auf einen Zielwert für den Restzucker von 33 g/L dosiert. Vorhandener Alkohol 85,0 g/L, Restzucker 30,1 g/L, Gesamtsäure 5,0 g/L, Flüchtige Säure etwa 0,8 g/L.

FT19P04: 2014er Wein aus Baden zur Prüfung der Robustheit von FTIR-Kalibrierungen gegenüber Alterung des Weines. Unter diesem Kode wurden zwei Weine, ein Grauburgunder und ein Rivaner eingesetzt, bei denen die verfügbare Probenmenge des einzelnen Weines nicht für alle Teilnehmer ausreichte, weil sie aus einer Herstellung im Technikums-Maßstab stammten. Ein Wein wurde bewusst als Prüfgut mit geringem Zuckergehalt und der andere mit relativ hohem Fructosegehalt ausgewählt. Bei der Auswertung werden die Weine als FT19P04a (Grauburgunder) und FT19P04b (Rivaner) unterschieden. FT19P04a: Vorhandener Alkohol 113 g/L, Restzucker 5,9 g/L, Gesamtsäure 7,5 g/L. FT19P04b: Vorhandener Alkohol 88,9 g/L, Restzucker 23,5 g/L, davon Fructose 20,4 g/L, Gesamtsäure 7,0 g/L.

FT19P05: 2017er Bodensee, Spätburgunder Weißherbst, lieblich. Das Prüfgut hat während der Herstellung einen Zusatz von Ascorbinsäure erhalten. Vorhandener Alkohol 85,5 g/L, Restzucker 22,2 g/L, Gesamtsäure 6,8 g/L.

Die Prüfgüter FT19P02, FT19P04 und FT19P05 stammten aus gewerblicher Produktion. Die vorstehenden Angaben zur Zusammensetzung entstammen den während der Produktion bzw. Probenauswahl erstellten Analysen. Sie sind als orientierende Angaben zu betrachten.

2.1.3 Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen

Die Homogenitätsprüfung wurde von den Prüfgütern FT19P01 bis FT19P05 ohne Einschränkungen bestanden. Ein Ausschluss von Ausreißern oder eine Korrektur von Trends der Messdaten waren nicht erforderlich. Die Quotienten s_r/s_{Ziel} lagen mit Ausnahme von geringen Gehalten im Bereich der unteren Grenze der Anwendbarkeit der jeweiligen Analysemethoden unter 0,5. Die Ergebnisse der Varianzanalysen waren damit beweiskräftig. Eine Inhomogenität konnte durch ein mindestens signifikantes Ergebnis der Varianzanalyse nur bei den Parametern Freie und Gesamte Schweflige Säure nachgewiesen werden. Die weiteren Prüfungen zeigten nur für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b, dass diese für die Bestimmung der Freien und der Ge-

samten Schwefligen Säure in der Laborvergleichsuntersuchung nicht geeignet waren. Für diese Prüfgüter wurde daher die Bestimmung dieser Parameter nicht vorgesehen. Die weiteren Prüfungen werden jeweils bei der Behandlung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für die einzelnen Prüfgüter besprochen. Für das Prüfgut FT19P01 z. B. im folgenden Abschnitt 2.1.4. Mit der oben genannten Ausnahme ergaben die Homogenitätsprüfungen, dass die Prüfgüter auch bei geringen Inhomogenitäten für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet waren.

2.1.4 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT19P01

Von dem Prüfgut FT19P01 wurden 391 Flaschen gefüllt. Die Füllung erfolgte in 0,33-L-Bierflaschen. Während der Füllung 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. Aus jeder Probe wurden 4 Serien von je zwei Messproben erstellt. Diese wurden unter Wiederholbedingungen untersucht. Die erste Messung geschah in der Reihenfolge der Auswahl. Für die Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. An einer Probenserie wurde die Relative Dichte mit elektronischer Densitometrie (Biegeschwinger) und der Vorhandene Alkohol mit Nahinfrarotspektroskopie (NIR) bestimmt. Die zweite Serie wurde mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie auf Glucose und Fructose untersucht. Eine dritte Serie diente zur Bestimmung des pH-Wertes und der Gesamtsäure, während die vierte Serie zur jodometrischen Bestimmung von Freier und Gesamter Schwefliger Säure sowie der Reduktone herangezogen wurde. Die Untersuchungen wurden an rechnergesteuerten Systemen mit automatischer Probenzuführung durchgeführt, wodurch eine geringe Wiederholstreuung begünstigt wird. Die erhaltenen Daten sind in der Tabelle 1 aufgeführt.

Die Messergebnisse wurden graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen oder Proben und im Korrelationstest auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge (Lfd.-Nr.) sowie von der Füllreihenfolge (Probe-Nr.) geprüft. Wie häufig zu beobachten, traten bei mehreren Parametern gesicherte Korrelationen zum Messverlauf auf, die aber keine unzureichende Wiederholbarkeit der Messungen vortäuschten und daher ohne Bedeutung sind. Dahingegen war bei den Parametern Freie und Gesamte Schweflige Säure eine gesicherte bzw. schwach gesicherte Korrelation zur Füllreihenfolge nachweisbar. Diese Beobachtungen können bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden varianzanalytischen Untersuchung hilfreich sein. Deren Ergebnisse sind in der Tabelle 2 zusammengefasst.

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, weil anderenfalls eine Inhomogenität unentdeckt bleiben kann. Diese Bedingung ist für alle Parameter erfüllt.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT19P01

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol g/L	Gesamt-extrakt g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Zucker nach Inv. g/L	pH-Wert	Ges. Säure g/L	Reduktone mg/L	Freie SO2 mg/L	Gesamte SO2 mg/L
1	2	0,99581	102,16	32,9	2,41	3,50	5,94	3,68	5,32	10,9	39,1	131,2
2	18	0,99585	102,16	33,0	2,44	3,60	5,99	3,67	5,34	11,3	37,5	127,0
3	5	0,99586	102,16	33,0	2,39	3,50	5,93	3,67	5,36	11,5	40,1	130,9
4	23	0,99582	101,80	32,8	2,40	3,50	5,90	3,70	5,30	11,5	37,0	128,0
5	16	0,99584	101,84	32,8	2,43	3,60	6,04	3,66	5,34	11,5	39,1	132,0
6	12	0,99587	101,84	32,9	2,44	3,60	6,03	3,67	5,34	13,1	39,6	131,9
7	17	0,99587	101,92	32,9	2,41	3,60	5,96	3,66	5,34	11,5	39,6	131,9
8	15	0,99584	101,84	32,8	2,42	3,60	5,99	3,66	5,34	11,7	40,1	134,0
9	24	0,99584	101,84	32,8	2,43	3,60	6,00	3,66	5,34	11,5	38,0	130,0
10	22	0,99584	101,76	32,8	2,54	3,70	6,20	3,66	5,34	11,5	39,6	131,1
11	4	0,99588	101,84	32,9	2,46	3,60	6,05	3,66	5,33	11,3	39,6	131,9
12	21	0,99584	101,76	32,8	2,45	3,60	6,04	3,66	5,34	11,7	36,5	126,6
13	4	0,99581	101,76	32,7	2,58	3,70	6,23	3,64	5,36	11,5	41,2	132,2
14	23	0,99579	101,76	32,7	2,47	3,60	6,07	3,64	5,34	12,2	37,5	126,3
15	12	0,99581	101,76	32,7	2,44	3,60	6,01	3,64	5,37	11,9	40,1	132,5
16	22	0,99579	101,76	32,7	2,44	3,60	6,04	3,64	5,35	12,4	40,1	131,7
17	21	0,99580	101,76	32,7	2,44	3,60	6,00	3,64	5,35	11,5	37,0	128,0
18	18	0,99580	101,76	32,7	2,45	3,60	6,04	3,65	5,38	11,5	37,5	127,8
19	24	0,99585	101,76	32,8	2,42	3,50	5,95	3,64	5,35	10,9	38,0	130,0
20	16	0,99585	101,84	32,8	2,41	3,60	5,98	3,65	5,36	11,5	39,1	132,0
21	2	0,99579	101,76	32,7	2,45	3,50	6,00	3,64	5,32	10,9	40,1	131,7
22	15	0,99584	101,76	32,8	2,44	3,50	5,99	3,64	5,34	11,3	40,1	132,5
23	5	0,99582	101,84	32,8	2,50	3,60	6,11	3,64	5,35	11,5	39,6	131,9
24	17	0,99581	101,76	32,7	2,50	3,60	6,11	3,64	5,34	11,5	40,1	131,7

Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für das Prüfgut FT19P01

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_i)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_z)	s_i/s_z	s_{Pr}/s_z	
Rel. Dichte	0,995830	24	0,5905	0,8041	0,000030		0,000132	0,228		0,000060
Vorh. Alkohol	101,84	24	0,7086	0,7121	0,141		0,535	0,263		0,2512
Gesamtextrakt	32,80	24	0,2727	0,9803	0,115		0,594	0,194		0,2612
Glucose	2,448	24	0,7705	0,6636	0,047		0,109	0,428		0,0615
Fructose	3,583	24	1,5758	0,2231	0,050	0,027	0,140	0,358	0,192	0,0727
Verg. Zucker	6,025	24	0,8699	0,5878	0,081		0,206	0,392		0,1113
pH-Wert	3,655	24	0,1864	0,9955	0,0203		0,0476	0,427		0,0268
Gesamtsäure	5,343	24	1,2915	0,3325	0,016	0,006	0,107	0,145	0,055	0,0453
Reduktone	11,57	24	2,2614	0,0883	0,375	0,298	1,28	0,293	0,233	0,6203
Freie SO ₂	39,01	24	15,354	0,0000	0,46	1,23	3,60	0,128	0,342	1,5041
Gesamte SO ₂	130,62	24	22,384	0,0000	0,64	2,09	5,357	0,120	0,391	2,2297

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

Zeigt die Varianzanalyse bei Erfüllung der Bedingung $s_i/s_z < 0,5$ keine Signifikanz folgt, dass das Untersuchungsmaterial hinsichtlich dieses Parameters als homogen zu betrachten ist. Diese Doppelbedingung ist für 9 der 11 geprüften Parameter erfüllt. Damit ist für diese Parameter eine ausreichende Homogenität zuverlässig nachgewiesen.

Nur bei den Parametern Freie und Gesamte Schweflige Säure zeigt die Varianzanalyse bei sehr guter 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 auf beide Parameter nicht zu. Es bestehen daher Zweifel an einer ausreichenden 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 Proben (Spalte "Proben (s_{Pr})") den in der Spalte "Maximal tolerierter Wert für s_{Pr} " ausgewiesenen Betrag nicht überschreiten. Beide Werte sind in der Tabelle 2 blau markiert und zeigen, dass dieses Prüfkriterium noch eingehalten wird. Somit gilt auch für diese Parameter 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 25.03.2019 abgesandt. Die zur Abholung der Proben angemeldeten Laboratorien konnten somit ab dem 02.04.2019 das Untersuchungsgut bei der jeweils von ihnen gewählten Prüfstation in Empfang nehmen. Insgesamt wurde einschließlich einer Reserve bei den Prüfstationen Material für 30 Laboratorien mit je 3 Flaschen zu je 0,33 L bereitgestellt. Je Labor wurde dieselbe Probenmenge an weitere 11 Laboratorien, die um Zusendung gebeten hatten, am 25.03.2019 abgesandt. Die 88 Teilnehmer an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung erhielten das Prüfmaterial per Paketdienst eben-

falls zu dieser Zeit. An diese Teilnehmer wurden außer dem Rotwein FT19P01 vier weitere Prüfgüter mit je 2 bis 3 Flaschen zu je 0,33 L bzw. 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 zur 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 als Hilfsmittel zur Bearbeitung der Proben im Labor: Diese konnten im Ausnahmefall auch zur Ergebnismitteilung benutzt werden. Als Regelform zur Mitteilung der Untersuchungsergebnisse erhielten alle Teilnehmer eine auf den Umfang ihrer Teilnahme abgestimmte Exceldatei per E-Mail zugesandt. Sie enthielt eine Nutzungsanleitung. Ihre Verwendung erleichtert Zusatzangaben, die fachlich für die Bewertung der Untersuchungsergebnisse erforderlich sind, und die Weiterverarbeitung der Daten.

Den Laboratorien, die **ausschließlich im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse** unter Anwendung herkömmlicher Untersuchungsverfahren an der Untersuchung des Rotweins FT19P01 teilnahmen, wurden als zu bestimmende Parameter Relative Dichte 20°C/20°C, Vorhandener Alkohol, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Freie und Gesamte Schweflige Säure benannt. Ferner wurde die Mitteilung der für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt berechneten Werte gefordert. Für den Fall, dass der Gehalt an Schwefliger Säure jodometrisch bestimmt werden sollte, wurde darauf hingewiesen, dass bei Rotwein als Prüfgut eine Bestimmung der Reduktone erforderlich ist. Der Gehalt an Schwefliger Säure sollte nach den Regeln des Labors für die Mitteilung an Kunden bzw. nach den Regeln des Qualitätsmanagements berichtet werden. Im Fall der Mitteilung jodometrisch unter Abzug der Reduktone bestimmter Werte sollte jedoch zusätzlich der Reduktonwert mitgeteilt werden. Obwohl in der amtlichen Qualitätsweinanalytik nicht mehr gefordert, wurde die Abgabe eines Untersuchungsergebnisses für den Parameter Glucose ermöglicht. Weiterhin wurde auf die Regeln zur Auswahl der Untersuchungsmethoden hingewiesen. Das Untersuchungsgut sollte als "2017er Qualitätswein Pfalz trocken (ohne Rebsortenangabe)" betrachtet und einer sensorischen Prüfung unterzogen werden. Für Teilnehmer ohne E-Mailadresse wurde die Datei zur Ergebnismitteilung auf der Website der Landwirtschaftskammer zum Herunterladen bereitgestellt. Sofern diese nicht genutzt werden konnte, wurde gebeten, das Formblatt für die Amtliche Qualitätsweinprüfung als Standardform der Ergebnismitteilung zu benutzen. Außerhalb Rheinland-Pfalz ansässige Laboratorien wurden auf die Fundstelle des Methodenkatalogs der Landwirtschaftskammer und der Kodierungen der Untersuchungsverfahren im Internet (www.lwk-rlp.de) hingewiesen.

Die Teilnehmer an den **FTIR-Untersuchungen** erhielten neben dem Informationsschreiben über die Aufgabenstellung eine spezielle Anleitung zur Durchführung der FTIR-Messungen sowie zum Export der für die Auswertung erforderlichen Daten. Es wurde gebeten, die FTIR-Messungen im Kalibriermodus, d. h. unter Aufzeichnung der spektralen Rohdaten, durchzuführen. Es sollten sowohl die auf dem Bildschirm dargestellten Ergebnisse als auch die Rohdaten ex-

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

Die FTIR-Untersuchung war an 5 Prüfgütern durchzuführen. Das für alle bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Teilnehmer gemeinsame Prüfgut war über die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus mit anderen als der FTIR-Methode zu untersuchen. Die hierzu eingesetzten Methoden, bevorzugt Referenzmethoden, werden im Folgenden mit Ausnahme der ¹H-Kernresonanzspektroskopie (¹H-NMR) als "herkömmliche Methoden" zusammengefasst. Es sollten Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Flüchtige Säure, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure bestimmt werden, soweit dies dem jeweiligen Labor aufgegeben und möglich war. Außerdem wurde die Möglichkeit geboten, die Ergebnisse der 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 mit herkömmlichen Methoden zu untersuchenden Proben. Auf die genannten Parameter waren von den Teilnehmern an den FTIR-Untersuchungen jeweils mindestens zwei der fünf Proben zusätzlich mit diesen Methoden zu untersuchen. Die Untersuchung aller Proben war anheimgestellt. Eine ausreichende Anzahl Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden war für alle fünf Proben erforderlich, weil die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Bezugnahme auf den Median der Untersuchungsergebnisse mit den herkömmlichen Methoden bewertet werden.

Als Abgabetermin für die Laboratorien, die ausschließlich mit herkömmlichen Methoden im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse untersuchten, wurde der 30.04.2019 und als Ausschlussstermin der 03.05.2019 benannt. Für Laboratorien, die eine umfangreichere Aufgabenstellung zu bearbeiten hatten, wurde der Abgabetermin auf den 10.05.2019, der Ausschlussstermin auf den 15.05.2019 festgesetzt. In begründeten Einzelfällen konnte eine darüber hinaus gehende Abgabefrist vereinbart werden.

2.3 Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung

Im Wesentlichen erfolgte die Ergebnisübermittlung termin- und formgerecht, d. h. wie erbeten als Dateien per E-Mail oder auf den vorgegebenen Formularen. Aus dem Kreis der unmittelbar von der Landwirtschaftskammer betreuten Teilnehmer berichteten termingerecht 29 Teilnehmer mit der zugesandten Exceldatei, während 6 Laboratorien ihre Ergebnisse schriftlich an die Landwirtschaftskammer oder als PDF-Datei an den Auswerter einsandten, sodass letztlich 35 Laborergebnismitteilungen vorlagen. Alle 88 angemeldeten Teilnehmern der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung übermittelten ihre Ergebnisdateien unmittelbar an den Auswertenden. Sechs Teilnehmer waren an dem erweiterten Parameterumfang interessiert und beteiligten sich nur mit Untersuchungen nach anderen als der FTIR-Methode. Zwei weitere Teilnehmer des erweiterten Ringversuchs beschränkten sich vereinbarungsgemäß auf die Parameter der amtlichen Qualitätsweinprüfung. Vier Teilnehmer aus Laboratorien, die nur das FTIR-Verfahren einsetzen, konnten keine Ergebnisse mit anderen als der FTIR-Methode mitteilen. Ebenfalls vier Teilnehmer teilten Ergebnisse zu einer oder mehreren Proben mit, die sie mit zwei Kalibrierungen gemessen hatten. Daher konnten insgesamt bis zu 84 FTIR-Messergebnisse vorliegen. Von 20 Teilnehmern gingen 27 Produktkalibrierungen (PRD-Dateien), davon aus 5 Laboratorien für Rot- und Weißweine unterschiedliche Dateien ein. Rohdaten-Dateien (CSV- und FSS-Dateien) sandten 60 Teilnehmer ein.

Nach der Bezeichnung wurden erweiterte, d. h. alle gängigen Parameter der FTIR-Untersuchung umfassende Produktkalibrierungen auf der Basis der Kalibrierung AP_2011 von 12 Teilnehmern eingesetzt. 1 Teilnehmer beschränkte 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 für die FTIR-Untersuchungsergebnisse 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.

Für die Mitteilung der Untersuchungsergebnisse mit herkömmlichen Methoden enthielt die Datei zur Ergebnisübermittlung 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 für einzelne oder mehrere Parameter zusätzliche Ergebnisse mit weiteren Methoden an derselben Probe mitgeteilt, obwohl die Teilnehmer nur einen Untersuchungsbefund für jede mit herkömmlichen Methoden zu bestimmende Probe/Parameter-Kombination einsenden sollen. Hierfür dürften vor allem Anforderungen aus der Akkreditierung der Labors auslösend sein. Für alle 20 Teilnehmer, die das zweite Registerblatt zur Mitteilung von Ergebnissen mit anderen Methoden als auf dem ersten Registerblatt nutzten, wurden zusätzliche Auswertenummern aus dem Wertebereich 89 bis 108 zugeteilt, während unter den Auswertenummern 111 bis 116 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. Rund 73 %, d. h. 58 der 80 Einsender von FTIR-Untersuchungsergebnissen, nutzten diese Möglichkeit. Soweit zusätzlich eine vom Bildschirm exportierte Ergebnisdatei übermittelt wurde, sind die auf dem FTIR-Ergebnisblatt der Ergebnismappe eingetragenen Werte als maßgebliches Laborergebnis behandelt worden. Ausgenommen sind offensichtliche Fehlübertragungen, die auf dieser Grundlage vom Auswerter korrigiert werden können.

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

Der Bitte um Mitteilung des sensorischen Befundes an der Probe, die von allen bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien zu untersuchen war, entsprachen 64 der 87 Laboratorien. Die sensorischen Befunde sind ohne Bewertung im Abschnitt 6.22 wiedergeben. Überwiegend wurde der Rotwein zufriedenstellend beschrieben und bewertet. Nur in einzelnen Fällen wurden im Widerspruch zu anderen stehende Beschreibungen mitgeteilt oder nicht vorhandene Fehler angegeben. Die weitere Auswertung bleibt den einzelnen Teilnehmern überlas-

sen, 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 der Landwirtschaftskammer unter dem Link "<https://www.lwk-rlp.de/de/weinbau/wein/qualitaetsweinpruefung/>" in der Rubrik "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. Auch Ergebnisse der ¹H-Kernresonanzspektroskopie werden grundsätzlich nicht einbezogen. Damit wird beachtet, dass sowohl nach wissenschaftlichen wie nach praktischen Erwägungen generell und auch bei den FTIR-Untersuchungsergebnissen die Ergebnisse der herkömmlichen Referenzanalytik maßgeblich sind.

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 Labora-

torium 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 werden 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 wurden. 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 Ergebnisse herkömmlicher Verfahren auch zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse anzuwenden, falls ihr Wert gleich oder größer ist als der Wert der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung. Diese Empfehlung wurde bei der Berechnung der Z-Scores 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 Messverfahren anzuwenden. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss bereits anlässlich der 6. Sitzung (2009) empfohlen, in diesem Grenzbereich keine Z-Scores zu berechnen. In diesem Konzentrationsbereich können bei der FTIR-Untersuchung auch negative Messergebnisse auftreten. Diese Empfehlung wurde anlässlich der 7. Sitzung (2010) dahingehend fortentwickelt, dass für die Ergebnisse an der unteren Grenze des Anwendungsbereiches **aller** Messverfahren keine Z-Scores berechnet werden. Diese gilt als erreicht, wenn das Dreifache der experimentell entwickelten Zielstandardabweichung den Betrag des Bezugswertes erreicht oder überschreitet.

Generell ist in diesem Zusammenhang darauf hinzuweisen, dass die Wiedergabe eines Untersuchungsergebnisses durch den **Wert Null nicht korrekt** ist. Bei Laborvergleichsuntersuchun-

gen müssen solche Ergebnisse in der Form '< NG (Zahlenwert der Nachweisgrenze)' oder '< BG (Zahlenwert der Bestimmungsgrenze)' mitgeteilt werden, weil in den statistischen Auswertungsprogrammen eine Null als Zahl behandelt wird und somit für die Gesamtheit der Untersuchungsergebnisse und laborspezifisch zu fehlerhaften Auswertungsergebnissen führt. Ebenso sind die Angaben 'n.n.' für "nicht nachweisbar" oder 'n.b.' für nicht bestimmbar unkorrekt, weil diese Angaben ohne den Zahlenwert der Nachweis- bzw. Bestimmungsgrenze nicht mit dem Median aller Laborergebnisse verglichen und somit als richtiges oder falsches Untersuchungsergebnis bewertet werden können. In den Laborergebnismitteilungen wurde im Bedarfsfall in Form einer laborspezifischen Anmerkung auf diese Mängel 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-Scores 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 FT19P01 durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien mitzuteilen. Daher sind für das Prüfgut FT19P01 auf allen Ergebnis-Registerblättern der Ergebnismitteilungsdatei Eingabefelder für diese Parameter vorgegeben. Dabei wird davon ausgegangen, dass auf den Registerblättern 'herk. Ergebnisse (1)' und 'herk. Ergebnisse (2)' nur Berechnungsergebnisse eingetragen werden, die ausschließlich auf herkömmlich bestimmten Werten beruhen. Dies ist auch darin begründet, dass insbesondere für den Parameter Gesamtextrakt die Ergebnisse nach herkömmlichen Methoden auch die Grundlage zur Bewertung der, z. B. mit einer geeigneten Parameterkalibrierung, unmittelbar aus den Infrarotspektren abgeleiteten Messergebnisse bilden. Deshalb ist dessen Mitteilung für alle fünf Prüfgüter vorgesehen. Zu den besonderen Gegebenheiten bei der Berechnung der hier angesprochenen Parameter auf der Grundlage von FTIR-Messergebnissen siehe die Abschnitte 5.1.1 und 5.1.2.

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 der OIV (OIV-MA-AS311-02, früher Anlage zur VO(EG) 2676/90 Nr. 7, LwK Nr. 4.5) verwendet. Diese ist mit 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 FT19P01 bei 35 von insgesamt 100 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 verschiedenen Parameter zu erreichen, wird der Parameter "Acetat (als Essigsäure)" zusätzlich zum Parameter "Flüchtige Säure" angeboten. Diese Präzisierung er-

möglicht 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-Scores zu verwenden.

2.4.3.5 Acetat (als Essigsäure)

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

2.4.3.6 Gesamte Äpfelsäure

Die Bestimmung der Gesamten Äpfelsäure erfolgt überwiegend mittels HPLC. Für dieses Verfahren ist keine aus einem methodenprüfenden Ringversuch abgeleitete Vergleichsstandardabweichung bekannt. Daher wird für diesen Parameter die Zielstandardabweichung aus der Vergleichsstandardabweichung des enzymatischen Bestimmungsverfahrens nach Methode OIV-MA-AS313-11 abgeleitet. Da in Laborvergleichsuntersuchungen regelmäßig erhöhte Werte des Quotienten (s_L/s_{Ziel}) beobachtet werden, stellt sich allerdings die fachliche Frage, ob diese Zielstandardabweichung unter primär analytischem Gesichtswinkel bei normaler Sorgfalt nicht eingehalten werden kann und damit zu streng ist oder ob aus önologischen bzw. wirtschaftlichen Gründen die vorliegende Streuung der Laborergebnisse akzeptiert wird. In diesem Fall ist die Empfehlung aus den Vorjahren zu wiederholen, dass für diesen Parameter ein geeignetes Leistungskriterium in Form einer Standardabweichung entwickelt werden sollte.

2.4.3.7 Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure

Zur Bestimmung der Schwefligen Säure finden im Reaktionsprinzip und ihrer Spezifität unterschiedliche Bestimmungsverfahren Anwendung. Während bei den jodometrischen Bestimmungsverfahren grundsätzlich über die Schweflige Säure hinaus, andere unter den Bedingungen des Untersuchungsverfahrens mit Jod reagierende Stoffe, die Reduktone, 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 Flüchtiger Säure oder bei bestimmten photometrischen Verfahren die Farbstoffe der Rotweine stören. Dies erschwert sowohl die Ermittlung eines geeigneten Bezugswertes als auch die Anwendung einer sachgerechten Zielstandardabweichung und damit letztlich die Bewertung der Laborleistung durch gültige Z-Scores.

Bei der Anwendung jodometrischer Verfahren zur Bestimmung der Schwefligen Säure wird berücksichtigt, dass in Weiß- und Roséweinen ohne Zusatz von Ascorbinsäure der Gehalt an Reduktonen im Bereich der Bestimmungsgrenze der jodometrischen Verfahren liegt und daher gemäß Abschnitt 2.4.2 keine sinnvolle Bewertung der Laborergebnisse durch Z-Scores möglich ist. Daher wird im Begleitschreiben zu den Proben mitgeteilt, ob im Fall der Anwendung jodometrischer Verfahren eine Bestimmung der Reduktone erforderlich ist bzw. ein Zusatz von Ascorbinsäure erfolgte. Ergänzend wird für Weiß- und Roséweine wegen der Oxydationsempfindlichkeit der Ascorbinsäure bei rascher Abbindung freier Schwefliger Säure durch Aldehyde eine Reaktionszeit von 5 Minuten, dahingegen für Rotweine wegen der verzögerten Abbindung eine Reaktionszeit von 20 Minuten für die Reduktonbestimmung empfohlen.

Für die Mitteilung der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen wurde im Begleitschreiben und dessen Anlage 2 vorgegeben, dass die Mitteilung der Ergebnisse stets so erfolgen sollte, wie dies gegenüber den Kunden in einer **fachlich sachgerechten Form** bzw. nach den Regeln des laboreigenen Qualitätsmanagements geschieht. Dies schließt ein, dass die Ergebnisse hinsichtlich der Berücksichtigung der Reduktone eindeutig zu kennzeichnen sind.

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

Die Berechnung einer Zielstandardabweichung nach Horwitz auf der Basis des stets niedrigeren Median der Werte nach Abzug der Reduktone widerspricht der allgemeinen praktischen Erfahrung, nach der bei der Differenzbildung aus zwei streuenden Untersuchungsergebnissen keine Abnahme der Streuung des resultierenden Wertes zu erwarten ist, es sei denn, dass die

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

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

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 FT19P01 und im folgenden Abschnitt 4 auf prüf-
güterübergreifende Ergebnisse für einzelne Parameter eingegangen.

3.1 Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses

Einen laborübergreifenden Überblick über die Untersuchungsergebnisse gibt für jedes Prüfgut eine Zusammenstellung deskriptiv-statistischer Ergebnisse wie hier für die Probe FT19P01 in der nachstehenden Tabelle 3. Soweit in diesen Tabellen zu einem Parameter mehrere Varianten der deskriptiven Berechnungsergebnisse aufgeführt sind, werden diese – sofern nicht selbsterklärend – bei der Diskussion des jeweiligen Parameters besprochen. Bei der Berechnung der beschreibenden statistischen Daten wurde ein Einfluss der Laborergebnisse mit dem FTIR-Verfahren ausgeschlossen. Die Tabellen beschreiben somit das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung mit herkömmlichen Verfahren (Definition siehe Abschnitt 2.2, Seite 14) 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-Scores nimmt sowohl für die Ergebnisse herkömmlicher als auch der FTIR-Untersuchungen Bezug auf den Median dieser Ergebnisse als 'wahren Wert'. Die Berechnung der Z-Scores erfolgt jedoch in der Regel für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse mit unterschiedlichen Zielstandardabweichungen. Daher enthält Tabelle 3 wie die entsprechenden Tabellen für die weiteren Prüfgüter für Parameter, die mit dem FTIR-Verfahren bestimmt wurden, in jeder der beiden Spalten „Zielstdabw. exp. herk. s_{exp} “ und „Zielstdabw. exp. FTIR $s_{\bar{u}}$ “ einen Eintrag. Dies berück-

sichtigt 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 der einfachen Unsicherheit (u_M) bzw. dem Standardfehler ($s_L/\sqrt{N} = u_M$) 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 allen Berechnungen nicht zu berücksichtigen, gelten Ergebnisse, die in fehlerhaften Einheiten mitgeteilt wurden. Unberücksichtigt bleiben auch Ergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abweichen. Sofern solche Werte vorlagen, ist ihre Anzahl in der Spalte "Alle Werte" der Tabellen der deskriptiv-statistischen Kennzahlen, hier der Tabelle 3, in Klammern angegeben und nicht in der davor stehenden Anzahl enthalten. Bei der Bewertung des Gesamterfolges ausgeschlossen werden ferner Ergebnisse, die um mehr als das Fünffache der Zielstandardabweichung vom Median abweichen und daher mit einem Z-Score, dessen Absolutbetrag den Wert 5 überschreitet ($|z| > 5$), bewertet werden. Die Tabellen enthalten dann zu dem jeweiligen Parameter in den Spalten „Alle Werte“ und „Gültige Werte“ unterschiedliche Zahlen. Der Anteil der wegen überhöhter Z-Scores oder mehr als 50 % Abweichung vom Median ausgeschlossenen Ergebnisse soll weniger als 22,2 % betragen.

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.

Die Quotienten aus der Laborstandardabweichung und der experimentell ermittelten, Matrix Effekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung für die FTIR-Ergebnisse ($s_L/s_{\bar{U}}$) sind – meist deutlich – niedriger als die vorstehend besprochenen, weil diese Zielstandardabweichungen mit wenigen Ausnahmen einen größeren Betrag als die Zielstandardabweichungen für die Ergebnisse der herkömmlichen Analytik aufweisen. Daher ist unter diesem Aspekt die Gültigkeit der Z-Scores 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-Scores uneingeschränkt gültig, wenn der Quotient (bei Rundung auf eine Stelle) nicht über 0,3 liegt. Dann ist gewährleistet, dass die Unsicherheit des Bezugswertes die Bewertung nicht beeinträchtigt. Liegt der Quotient zwischen 0,3 und 0,5 wird auf die eingeschränkte Sicherheit des Bezugswertes hingewiesen. Quotienten im angesprochenen Bereich treten gehäuft auf, wenn nur eine geringe Anzahl und zugleich eine relativ große Streuung der Laborergebnisse vorliegen. Für die Bewertung der FTIR-Messergebnisse wird ausweislich der Werte in der Spalte " $u_M/s_{\bar{U}}$ " der Tabellen für alle Proben die erforderliche Zuverlässigkeit problemlos erreicht.

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

3.2 Gesamtergebnis für das Rotweinprüfgut (FT19P01)

Bei dem Prüfgut FT19P01 traten bei der Mehrzahl der Parameter keine oder bis zu zwei auszuschließende Laborergebnisse auf. Es handelte sich sowohl um grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte als auch Laborergebnisse mit einem absoluten Betrag des Z-Score über 5. Eine höhere Anzahl als zwei auszuschließende Laborergebnisse ergab sich für die Parameter **Gesamtalkohol**, **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)** und **Reduktone**. Bei dem Parameter **Gesamtalkohol** wichen zwei der vier ausgeschlossenen Ergebnisse um mehr als 50 % vom Median ab, weil offensichtlich anstelle des gewünschten Wertes das Untersuchungsergebnis für **Vergärbare Zucker** eingetragen wurde. Bei der gesonderten Auswertung der 35 reduktometrisch bestimmten Werte für **Vergärbare Zucker** unter der Bezeichnung **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)** ergab sich ein Ausschluss von 9 Laborergebnissen, dies entspricht 25,7 %, wegen einer Abweichung um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median, während beim Parameter **Reduktone** 14 Ergebnisse um mehr als 50 % vom Median abwichen und ein weiteres einen Z-Scorebetrag über 5 aufwies. Mit 15 von 99 Laborergebnissen wurde somit ein Anteil von 15 % der Laborergebnisse ausgeschlossen. Der Höchstanteil von 22 % wurde nur bei den reduktometrisch bestimmten Werten für **Vergärbare Zucker** überschritten.

Der Richtwert von 1,5 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} wurde bei den Ergebnissen herkömmlicher Analytik ganz überwiegend eingehalten. Im Toleranzbereich erhöhte Werte für den Quotienten s_L/s_{Ziel} ergaben sich bei den Parametern **Vorhandener Alkohol**, **Fructose**, **Flüchtige Säure**, **Acetat**, **Gesamte Milchsäure**, **L-Milchsäure** sowie allen Varianten der Bestimmungen der **Freien** und **Gesamten Schwefligen Säure**. Der Höchstwert von 2,0 wurde nur bei den Para-

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für die Rotweinprobe (FT19P01)

Parameter	alle Werte	gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. S _L	Labor-Stdfehler u _M	Zielstandardabweichungen			Quotienten					
							n. Horwitz S _H	exp. herk. S _{exp}	exp. FTIR S _Ü	S _L /S _H	S _L /S _{exp}	S _L /S _Ü	u _M /S _{Ziel}	u _M /S _Ü	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	104	102	0,99578	0,99578	0,000098	0,000010			0,000132	0,000190		0,74	0,68	0,07	0,07
Gesamtalkohol (g/L)	85 (2)	83	103,43	103,33	1,046	0,115	2,908	1,063			0,36	0,98		0,11	
Vorhandener Alkohol (g/L)	39	39	100,09	100,10	0,928	0,149	2,831	0,535	0,886		0,33	1,73	1,05	0,28	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	97	97	32,21	32,20	0,521	0,0529	1,080	0,594			0,48	0,88		0,09	
Zuckerfreier Extrakt (g/L)	92	92	26,18	26,40	0,967	0,101	0,912	1,048			1,06	0,92		0,10	
Vergärbare Zucker (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	65	63	5,581	5,500	0,280	0,0352	0,241	0,191	0,584		1,16	1,46	0,48	0,18	0,06
- (reduktom.) (g/L)	35	26	6,968	7,050	0,578	0,113	0,297	0,233	0,584		1,94	2,48	0,99	0,49	0,21
Glucose (g/L)	60	59	2,429	2,426	0,116	0,0152	0,120	0,108	0,408		0,97	1,07	0,29	0,14	0,04
Fructose (g/L)	60	59	3,152	3,060	0,256	0,0334	0,146	0,126	0,330		1,75	2,04	0,78	0,27	0,10
Glycerin (g/L)	20	20	8,514	8,500	0,215	0,0480	0,348		0,348		0,62		0,62		0,14
pH-Wert	56	55	3,621	3,620	0,0644	0,0087		0,0476	0,0493			1,35	1,31	0,18	0,18
Gesamtsäure (g/L)	100	99	5,386	5,400	0,135	0,0136	0,237	0,107	0,145		0,57	1,26	0,93	0,13	0,09
Weinsäure (g/L)															
- HPLC + IC	13 (1)	13	1,841	1,820	0,0976	0,0271	0,0941		0,227		1,04		0,43	0,29	0,12
- alle herkömmlichen Verfahren	31 (1)	31	1,902	1,900	0,137	0,0246	0,0976		0,227		1,41		0,60	0,25	0,11
Flüchtige Säure (g/L)	30 (1)	29	0,5358	0,5460	0,0584	0,0108	0,0338		0,0286	0,0891	1,73	2,04	0,66	0,38	0,12
Acetat als Essigsäure (g/L)	31	31	0,4711	0,4600	0,0556	0,0100	0,0292				1,90			0,34	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	11 (2)	11	0,3203	0,3100	0,0342	0,0103	0,0209	0,0258	0,218		1,64	1,33	0,16	0,40	0,05
L-Äpfelsäure (g/L)	32 (1)	32	0,3050	0,3000	0,0338	0,0060	0,0203	0,0255			1,66	1,33		0,23	
Gesamte Milchsäure (g/L)	20	18	2,494	2,495	0,222	0,0524	0,123		0,209		1,81		1,06	0,43	0,25
L-Milchsäure (g/L), alle	32	30	1,996	1,997	0,172	0,0315	0,102	0,107			1,69	1,62		0,30	
Reduktone (mg/L)	85 (14)	84	16,16	16,00	4,19	0,457	1,69				2,48			0,27	
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillation, Photometrie + FTIR	49 (1)	49	35,09	35,00	6,44	0,920	3,28				1,96			0,28	
- Destillation + Photometrie	21 (1)	21	34,51	33,50	6,17	1,35	3,16				1,95			0,43	
- Destillation	8 (1)	8	40,13	39,30	6,37	2,25	3,62				1,76			0,62	
- Photometrie	13 (1)	14	31,55	31,00	5,20	1,44	2,96				1,762			0,49	
- jodometrisch incl. Reduktone	61	60	40,66	41,00	6,17	0,797	3,75				1,65			0,21	
- jodometrisch excl. Reduktone	33	33	25,67	27,00	6,52	1,14	2,63	3,75			2,48	1,74		0,30	
- wie vor, Basis erweitert	90 (2)	90	24,23	25,00	6,13	0,647	2,46	3,75			2,49	1,64		0,17	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	52	50	111,62	111,00	8,38	1,19	8,74	5,36			0,96	1,56		0,22	
- jodometrisch incl. Reduktone	39	39	114,49	116,00	8,21	1,31	9,07	5,36			0,90	1,53		0,25	
- jodometrisch excl. Reduktone	18	18	108,29	108,50	10,25	2,42	8,57	5,36			1,20	1,91		0,45	
- wie vor, Basis erweitert	54	54	100,29	100,50	10,36	1,41	8,03	5,36			1,29	1,93		0,26	

metern **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)** und **Reduktone** überschritten, wobei die Laborergebnisse für Vergärbare Zucker ausschließlich auf der Basis des Median der Laborergebnisse mit den spezifischen Methoden der HPLC und enzymatischer Bestimmung bewertet werden.

Trotz erhöhter Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} resultieren bei den Parametern **Vorhandener Alkohol, Fructose, Flüchtige Säure** (bei Bewertung auf der Basis der Zielstandardabweichung nach Horwitz), **Acetat, L-Milchsäure** und **Reduktone**, bedingt durch die große Anzahl vorliegender Laborergebnisse, unauffällige Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} ". Die Zuverlässigkeit der Bezugswerte ist gegeben. Dahingegen weisen die Parameter **Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Gesamte Milchsäure** und **Freie Schweflige Säure** (Destillations- und photometrische Verfahren) sowie **Freie** und **Gesamte Schweflige Säure** – jeweils jodometrisch nach Abzug der Reduktone bei Berücksichtigung nur der in dieser Form mitgeteilten Werte – zugleich mäßig erhöhte Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " auf. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist ferner eingeschränkt für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure**. Diese Einschränkung ist bei einer kritischen Betrachtung der Z-Scores zugunsten des Teilnehmers zu berücksichtigen.

Bei zusammenfassender Betrachtung aller Kriterien zur Ermittlung **gültiger Z-Scores** ergibt sich, dass für **alle Parameter** – ausgenommen Reduktone – **eine aussagekräftige Bewertung** der Laborleistung **durch die Z-Scores** gegeben ist.

Von den 87 teilnehmenden Laboratorien, die durch die Landwirtschaftskammer zugelassen sind, wurden die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden zwischen einmal (Dichte, Gesamtsäure) und achtundzwanzigmal (Vergärbare Zucker) nicht erfolgreich bestimmt, d. h. der Absolutbetrag des Z-Scores überschritt den Wert 3 ($|Z| > 3$). Dazwischen lagen die Laborergebnisse für Gesamte Schweflige Säure (4 falsche Ergebnisse) und Vorhandenem Alkohol und Freie Schweflige Säure (je acht falsche Ergebnisse). Es ergab sich also eine Häufung fehlerhafter Ergebnisse für den Parameter Vergärbare Zucker. Diese ist vor allem durch Ergebnisse mit der reduktometrischen Schnellmethode nach Rebelein bedingt, die

Erläuterungen zur Tabelle 3:

Blau markierte Daten sind auffällig und werden diskutiert. **Rot** markierte Daten weisen auf die Überschreitung von im Abschnitt 3.1 genannten 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 ($s_{\ddot{u}}$) = 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 ($s_L/s_{\ddot{u}}$) = 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 ($u_M/s_{\ddot{u}}$) = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes (u_M) und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

bei Rotwein systematisch zu hoch ausfallen. Insgesamt ist die Fehlerhäufigkeit mit 51 fehlerhaften Werten etwa dreimal so hoch wie im Vorjahr.

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 bei den Prüfgütern **FT19P02**, **FT19P04a**, **FT19P04b** und **FT19P05** die Zielstandardabweichung $\pm 0,029$ g/L angewandt. Bei den Prüfgütern **FT19P01** und **FT19P03** wurde die Zielstandardabweichung nach Horwitz berechnet. Kein Prüfgut enthielt Sorbinsäure, sodass mit der Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure die Anforderungen der Methode OIV-MA-AS313-02 erfüllt waren.

Eine Zusammenfassung der Gesamtergebnisse zu diesem Parameter für alle Prüfgüter gibt die Tabelle 4. In dieser sind die Anzahl der berücksichtigten Laborergebnisse, der jeweilige Mittelwert, die Standardabweichung der Laborergebnisse (StdAbw s_L) und die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_{Ziel}) und Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel}) zusammengefasst.

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}
FT19P01	29 (2)	0,536	0,0584	1,73	0,32
FT19P02	25 (1)	0,449	0,0516	1,81	0,36
FT19P03	23 (1)	0,782	0,0828	1,80	0,38
FT19P04a	11 (0)	0,394	0,0243	0,85	0,26
FT19P04b	11 (1)	0,396	0,0517	1,81	0,55
FT19P05	24 (2)	0,406	0,0720	2,52	0,51

(*) In den Tabellen 4 bis 10 steht in Klammern zusätzlich die Anzahl ausgeschlossener Laborergebnisse.

Die in der Spalte 'Gültige Werte' jeweils in Klammern angegebene Anzahl an (zusätzlichen) Laborergebnissen wurde ausgeschlossen, weil der absolute Betrag des Z-Scores über 5 lag bzw. bei den Prüfgütern FT19P01 und FT19P05 jeweils ein Laborergebnis um mehr als 50 % vom Median abwich. Der Richtwert 1,5 für den Quotienten aus Laborstandardabweichung und Zielstandardabweichung s_L/s_Z wurde mit Ausnahme des Prüfgutes FT19P04a stets und der Höchstwert 2,0 bei dem Prüfgut FT19P05 überschritten. Die Zuverlässigkeit der Bezugswerte ist bei vier der sechs Prüfgüter eingeschränkt. Augenfällig ist bei praktisch gleichem Gehalt an Flüchtiger Säure der Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b, die jeweils nur von einem Teil der Teilnehmer untersucht wurden, der erheblich unterschiedliche Wert der Standardabweichung

der Laborergebnisse und daraus folgend des Quotienten s_L/s_{Ziel} . Dies zeigt, dass die Beherrschung der Bestimmungsmethode in den Laboratorien deutlich unterschiedlich und es möglich ist, die als Zielstandardabweichung verwendete Vergleichsstandardabweichung des OIV-Verfahrens einzuhalten. Zwar wurden für die Prüfgüter – **mit Ausnahme des Prüfgutes FT19P05** (noch) **gültige Z-Scores** erhalten, doch zeigen diese unterschiedlichen Befunde bei den Prüfgütern FT19P04a und Ft19P04b ebenso wie der Befund an dem Prüfgut FT19P03 mit einem Gehalt, der önologische Maßnahmen erfordert, dass die Bestimmungsmethode nicht befriedigend beherrscht wird. Maßnahmen zur Verbesserung der Vergleichbarkeit sind angezeigt.

4.1.2 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

Für diesen Parameter wurden je Prüfgut unter Zusammenfassung der Ergebnisse für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b und Einschluss von je 6 FTIR-Untersuchungsergebnissen zwischen 38 und 45 Laborergebnisse eingesandt. Jeweils 18 bis 23 Laborergebnisse wurden automatisiert enzymatisch bestimmt. Weitere 13 bis 14 Ergebnisse wurden mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie (^1H -NMR), Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und manueller enzymatischer Bestimmung erhalten, worin jeweils 6 Ergebnisse mit ^1H -NMR – auch für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b – enthalten sind.

Bei gemeinsamer Auswertung aller Laborergebnisse prägen die automatisierten enzymatischen Ergebnisse den Bezugswert. Es ergeben sich Quotienten (s_L/s_{Ziel}), deren Wert stark erhöht oder für die Ermittlung gültiger Z-Scores zu hoch ist. Untersuchungen haben gezeigt, dass die Ergebnisse des vorherrschenden Verfahrens der automatisierten Bestimmung vom pH-Wert bzw. Gesamtsäuregehalt des Prüfgutes abhängig sind. Das Gesamtergebnis einer getrennten Auswertung der beiden Ergebnisgruppen zeigt Tabelle 5.

Tabelle 5: Gesamtergebnisse der Bestimmung von Acetat [g/L]

Prüfgut	enzymatisch, automatisiert				HPLC, ^1H -NMR, enzymatisch manuell				t-Test
	gültige Werte	Mittelwert	Quotienten		gültige Werte	Mittelwert	Quotienten		
			s_L/s_{Ziel}	u_M/s_{Ziel}			s_L/s_{Ziel}	u_M/s_{Ziel}	
FT19P01	23	0,467	1,64	0,34	13 (1)	0,458	1,67	0,46	-
FT19P02	18	0,461	1,44	0,34	8 (0)	0,390	0,68	0,24	++
FT19P03	18	0,818	1,19	0,28	13 (0)	0,753	1,04	0,29	++
FT19P04a	7	0,419	2,02	0,76	9 (2)	0,325	1,84	0,61	-
FT19P04b	11	0,416	1,42	0,43	8 (1)	0,321	0,96	0,34	+
FT19P05	20	0,381	1,95	0,44	13 (1)	0,297	1,76	0,49	++

Wenn man von den Ergebnissen für das Prüfgut FT19P04a mit einer sehr geringen Anzahl der Ergebnisse und zugleich relativ großer Streuung absieht, waren bei getrennter Auswertung die Quotienten s_L/s_{Ziel} unauffällig bis mäßig erhöht und entsprechend die Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben bzw. leicht eingeschränkt. Wie bei den vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen seit mehreren Jahren beobachtet, lagen die Mittelwerte der automatisierten enzymatischen Bestimmungen stets zumindest numerisch höher als die Mittelwerte der Gruppe der anderen Verfahren (ohne FTIR). Eine Signifikanz des Unterschiedes der Mittelwerte war in der Regel nachweisbar. Ausgenommen sind lediglich Mittelwerte für die Prüfgüter FT19P01 und FT19P04a. Bei letzterem Prüfgut ist, insbesondere beim Vergleich mit dem Er-

gebnis für das Prüfgut FT19P04b, davon auszugehen, dass die Signifikanz des Unterschiedes lediglich infolge der Kombination von geringer Ergebnisanzahl und relativ großer Ergebnisstreuung nicht nachweisbar war. Daher erfolgte, ausgenommen das Prüfgut FT19P01, wie im Vorjahr eine getrennte Auswertung der beiden Ergebnisgruppen. Es konnten für alle Daten-
gruppen auf der Basis der Quotienten s_L/s_{Ziel} **gültige Z-Scores** ermittelt werden, vor deren Bewertung zu Lasten eines Labors gegebenenfalls die Einschränkungen der Zuverlässigkeit der Bezugswerte zu berücksichtigen sind.

4.2 Gesamte und L-Äpfelsäure

Für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure**, liegen je Prüfgut mit 13 bis 15 nur eine geringe Anzahl gültiger Laborergebnisse vor. Diese wurden meist mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie erhalten. Die Spanne der in den Prüfgütern vorliegenden Gehalte deckt den Bereich der in der Praxis auftretenden Werte sehr gut ab. Die Quotienten s_L/s_{Ziel} liegen jedoch in der Regel im mäßig erhöhten Bereich zwischen 1,5 und 2,0. Die Übereinstimmung der Laborergebnisse ist damit wieder geringer als im Vorjahr und entspricht den langjährigen Beobachtungen. Die **Zuverlässigkeit** der Bezugswerte ist infolge der geringen Ergebnisanzahl in der Regel eingeschränkt und bei den Prüfgütern FT19P04a und FT19P04b nicht gegeben. 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 bestätigt ein Vergleich der in Tabelle 6 mit den in Tabelle 7 zusammengestellten Mittelwerten für alle Prüfgüter. Die Mittelwerte für L-Äpfelsäure sichern damit die Bezugswerte für die Bewertung der Laborergebnisse für Gesamte Äpfelsäure ab. Aus fachlicher Sicht sind daher die **Z-Scores** für alle Prüfgüter **gültig**. Unabhängig von diesen Überlegungen ist für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse die gegebene Unsicherheit des Bezugswertes in Anbetracht der angewandten, Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung stets ausreichend.

Tabelle 6: Ergebnisse der Bestimmung von Gesamter Äpfelsäure [g/L]

Probe	gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT19P01	11 (2)	0,320	0,034	1,33	0,40
FT19P02	13 (0)	2,018	0,135	1,96	0,54
FT19P03	13 (1)	0,926	0,079	1,90	0,53
FT19P04a	6 (1)	3,536	0,184	1,72	0,70
FT19P04b	7 (0)	2,524	0,144	1,75	0,66
FT19P05	13 (2)	5,159	0,211	1,43	0,40

Die Gesamtergebnisse für den überwiegend automatisiert enzymatisch bestimmten Parameter **L-Äpfelsäure** sind in der Tabelle 7 zusammengefasst. Die Quotienten s_L/s_{Ziel} streuen um den Richtwert 1,5 und sind damit zum Teil leicht erhöht und gegenüber dem Vorjahr unverändert. Infolge der gegenüber dem Parameter Gesamte Äpfelsäure etwa dreimal so hohen Anzahl an Laborergebnissen ist die Zuverlässigkeit der Bezugswerte stets gegeben. Die **Z-Scores** sind **uneingeschränkt gültig**.

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

Probe	gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT19P01	32 (1)	0,305	0,034	1,33	0,23
FT19P02	29 (1)	2,028	0,105	1,51	0,28
FT19P03	27 (1)	0,938	0,065	1,56	0,30
FT19P04a	14 (0)	3,495	0,098	0,91	0,24
FT19P04b	16 (1)	2,590	0,094	1,11	0,28
FT19P05	31 (1)	5,277	0,262	1,72	0,31

4.3 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure

Die Gehalte an **Gesamter Milchsäure** lagen bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfgütern – mit Ausnahme des essigstichigen Prüfgutes FT19P03 – in den, für die jeweilige Weinart, typischen Bereichen. Je Prüfgut – ausgenommen FT19P04a und FT19P04b – wurden rund 20 Laborergebnisse mitgeteilt, die etwa zu gleichen Anteilen mittels HPLC und enzymatisch ermittelt wurden. Die Tabelle 8 gibt eine Übersicht der Gesamtergebnisse für alle Prüfgüter.

Tabelle 8: Ergebnisse der Bestimmung von Gesamter Milchsäure [g/L]

Probe	gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT19P01	18 (2)	2,494	0,222	1,81	0,43
FT19P02	13 (3)	0,222	0,035	2,32	0,64
FT19P03	19 (1)	1,761	0,131	1,42	0,33
FT19P04a	7 (3)	0,341	0,023	1,97	0,74
FT19P04b	7 (1)	0,201	0,038	2,64	1,00
FT19P05	10 (5)	0,178	0,027	2,04	0,64

Da überwiegend Prüfgüter eingesetzt wurden, bei denen kein Äpfelsäureabbau stattgefunden hatte, ergab sich eine Häufung geringer Gehalte an Milchsäure. Bei den Prüfgütern FT19P02, FT19P04b und FT19P05 lag der Gehalt an Gesamter Milchsäure offensichtlich im Bereich der Bestimmungsgrenze des HPLC-Verfahrens, deren Unterschreiten jeweils von mehreren Laboratorien mitgeteilt wurde. Bei dem Prüfgut FT19P04a lag der Gehalt allenfalls knapp über dem Bereich dieser Bestimmungsgrenze. Für diese vier Prüfgüter wurden auf der Basis der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichungen jeweils erheblich erhöhte Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} erhalten. Bei den Prüfgütern FT19P02 und FT19P04b wurde der Höchstwert 2,0 deutlich überschritten und zugleich keine ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes erreicht. Für das Prüfgut **FT19P02** konnten daher **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden. Wegen der geringen Anzahl an Laborergebnissen kann bei dem Prüfgut **FT19P04b** ein Zufallsbefund nicht ausgeschlossen werden. Daher wurde für die endgültige Bewertung dieser Daten (siehe Abschnitt 5.14.3 in Teil 3 des Berichtes über diese Laborvergleichsuntersuchung) ausnahmsweise die für die Bewertung von Ergebnissen der L-Milchsäure eingesetzte experimentelle Zielstandardabweichung angewendet. Diese weist bei niedrigen Gehalten einen höheren Wert als die Zielstandardabweichung nach Horwitz auf. Mit dieser experimentellen Zielstandardabweichung wurden bei erhöhter Unsicherheit des Bezugswertes **noch gültige Z-Scores** erhalten. Eine **erhebliche Einschränkung der Gültigkeit der Z-Scores** ergibt sich für die

Prüfgüter **FT19P04a** und **FT19P05**, während für die Prüfgüter **FT19P01** und **FT19P03** **uneingeschränkt gültige Z-Scores** erhalten wurden.

Zum Parameter **L-Milchsäure** wurden – unter Zusammenfassung der Ergebnisanzahl für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b – jeweils rund 30 Laborergebnisse mitgeteilt. Die Tabelle 9 gibt eine Übersicht über die statistisch auswertbaren Ergebnisse.

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

Probe	gültige Werte	Mittelwert	StdAbw s_L	Quotient s_L/s_{Ziel}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT19P01	30 (2)	1,996	0,172	1,62	0,30
FT19P02	25 (0)	0,1154	0,0400	1,78	0,36
FT19P03	25 (3)	1,348	0,0754	0,97	0,19
FT19P04a	13 (0)	0,1916	0,0483	1,85	0,51
FT19P04b	10 (0)	0,0428	0,0293	1,56	0,49
FT19P05	24 (0)	0,0640	0,0284	1,43	0,29

Die nach dem Augenschein niedrigeren Zahlen der gültigen Werte resultieren bei den Prüfgütern FT19P02, FT19P04a, FT19P04b und FT19P05 daraus, dass bei diesen Prüfgütern mit niedrigen Gehalten, wie für den Parameter Gesamte Milchsäure, stets eine Anzahl von Laborergebnissen als unterhalb der Bestimmungsgrenze liegend mitgeteilt wurde. Die Gehalte liegen damit offensichtlich im Bereich der unteren Anwendungsgrenze des Bestimmungsverfahrens. Die Quotienten s_L/s_{Ziel} sind überwiegend mäßig erhöht, überschreiten aber anders als bei dem Parameter Gesamte Milchsäure nicht den Höchstwert 2,0 und auch die Quotienten u_M/s_{Ziel} zeigen nur eine geringe bis mäßige Einschränkung der Zuverlässigkeit des Bezugswertes an. Die **Z-Scores** sind für alle Prüfgüter zumindest formal **gültig**. Insgesamt präsentiert sich das Gesamtergebnis für diesen Parameter etwas besser als für den Parameter Gesamte Milchsäure.

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 2.4.3.6 behandelt. Nachfolgend werden deren Einhaltung sowie das laborübergreifende Gesamtergebnis für diese Parameter besprochen.

4.4.1 Reduktone

Bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfgütern war kein Zusatz von Ascorbinsäure bekannt. Daher waren bei den Weißwein- und Rosé-Prüfgütern Gehalte unter der Bestimmungsgrenze und in der Folge keine Ermittlung gültiger Z-Scores zu erwarten. Es wurde daher nur für das Rotwein-Prüfgut FT19P01 die Bestimmung der Reduktone unter Empfehlung einer Reaktionszeit von 20 Minuten für die Bindung der Freien Schwefligen Säure erbeten. Ungeachtet dessen wurden zu den Prüfgütern, für die keine Bestimmung der Reduktone notwendig war, zwischen 20 und 24 Laborergebnisse vorgelegt, während für das Rotwein-Prüfgut 99 Laborergebnisse eingesandt wurden. Einzelne Ergebnisse der Reduktonbestimmung wurden auch für die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b eingesandt, die wegen ihrer geringen Anzahl nicht ausgewertet wurden. Das Gesamtergebnis der Reduktonbestimmungen ist in der Tabelle 10 zusammengefasst.

Tabelle 10: Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s _L)	Quotient s _L /s _H	Quotient u _M /s _{Ziel}
FT19P01	84 (15)	16,16	4,19	2,48	0,27
FT19P02	14 (9)	5,39	1,66	2,64	0,71
FT19P03	14 (10)	5,08	1,40	2,23	0,60
FT19P05	16 (4)	12,30	2,66	2,01	0,50

Bei den Prüfgütern FT19P01 und FT19P05 wurden 15 % bzw. 20 % der Laborergebnisse wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei der Auswertung nicht berücksichtigt. Bei den Prüfgütern FT19P02 und FT19P03 mit Medianwerten bei 5 mg/L – und damit im Bereich des Blindwertes – betrug die Ausschlussquote über 35 % und überschritt damit den Höchstwert von 22,2 % für die Ermittlung gültiger Z-Scores deutlich. Für die Prüfgüter **FT19P01 bis FT19P03** ergaben sich Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} zwischen 2,2 und 2,5. Es konnten somit – auch für das Rotwein-Prüfgut – **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden. Lediglich im Fall des Prüfgutes **FT19P05**, bei dem der Quotient s_L/s_{Ziel} mit 2,0 den Höchstwert erreichte, wobei die Zuverlässigkeit des Bezugswertes beeinträchtigt war, konnten formal **noch gültige Z-Scores** ermittelt werden. Deren Aussagekraft ist in Anbetracht des Gesamtergebnisses jedoch aus fachlicher Sicht zweifelhaft ist.

Ergänzend wird angemerkt, dass bei dem Prüfgut FT19P01 zu 88 Laborergebnissen die Reaktionszeit zur Bindung der Freien Schwefligen Säure mitgeteilt wurde, aber nur 46 Teilnehmer, mithin 52 % die Empfehlung einer Reaktionszeit von mindestens 20 Minuten beachteten. Bei den 35 Laboratorien, die nur im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalytik teilnahmen, wurde die Empfehlung sogar nur bei 6 der 31 mitgeteilten Reaktionszeiten eingehalten. Insgesamt sind damit die Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone wie in der Regel in Laborvergleichsuntersuchungen wenig befriedigend. Eine weitergehende Präzisierung und Vereinheitlichung der Methodik der Reduktonbestimmung bleibt erforderlich.

4.4.2 Freie Schweflige Säure

Die Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure** wurden bei den Prüfgütern **FT19P01** und **FT19P05** mit bestimmbarem Reduktongehalt in Anbetracht der durch die Bestimmungsverfahren geprägten Unterschiede in drei Gruppen aufgeteilt. In der ersten wurden durch **Destillations-** oder **photometrische Verfahren** bestimmte Laborergebnisse zusammengefasst. Diese Zusammenfassung erfolgt, da verfahrensbedingt keine Abhängigkeit der Ergebnisse vom Gehalt an Reduktonen im Prüfgut besteht, obwohl Unterschiede der Verfahrensmittelwerte und Streuungen gegeben sind. Dies ist z. B. im Abschnitt 6.20.5 für das Prüfgut FT19P01 gut ersichtlich. Es besteht ein deutlicher Unterschied zwischen den Ergebnissen des Destillationsverfahrens und den Ergebnissen der photometrischen Verfahren. Die Anzahl der Ergebnisse je Verfahren ist jedoch für eine getrennte Auswertung zu gering.

Die zweite Gruppe bildeten die Ergebnisse **jodometrischer Bestimmungen ohne Abzug der Reduktone** und die dritte Gruppe die Laborergebnisse aus **jodometrischen Bestimmungen unter Abzug der Reduktone**. Für die Bewertung dieser, häufig nur in geringer Anzahl mitgeteilten Laborergebnisse wird gegebenenfalls, hier bei dem Prüfgut FT19P05, die Basis erweitert,

indem zusätzliche Werte aus ohne Reduktionabzug mitgeteilten Laborergebnissen und zugehörigen Reduktionwerten vom Auswerter berechnet wurden. Die Bewertung erfolgte unter Bezug auf den Median der jeweiligen Datengruppe mit Leistungskriterien, die gemäß den im Abschnitt 2.4.3.7 dargestellten Regeln als Zielstandardabweichung berechnet wurden. Bei den Prüfgütern **FT19P02** und **FT19P03** ohne bestimmbarer Reduktongehalt, bei denen sich auch die Mittelwerte der Ergebnisse unter Einschluss bzw. Ausschluss der Reduktone nicht signifikant unterschieden, wurden die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen zusammengefasst und auf der Grundlage des Median der einschließlich der Reduktone mitgeteilten Laborergebnisse und der daraus nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung bewertet.

Bei der Mehrzahl der für die Bewertung gebildeten Datengruppen lag der Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} zwar über dem Richtwert 1,5 aber unter dem Höchstwert 2,0 und es wurde eine zumindest ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes erreicht. Somit konnten für den Parameter Freie Schweflige Säure **in der Regel gültige Z-Scores** erhalten werden. Nur bei dem Prüfgut **FT19P02** wurde sowohl bei den Laborergebnissen mit Verfahren ohne Reduktoneinfluss wie bei den jodometrischen Laborergebnissen der Höchstwert 2,0 des Quotienten überschritten. Daher konnten für dieses Prüfgut **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden.

4.4.3 Gesamte Schweflige Säure

Wie im Abschnitt 2.4.3.7 ausgeführt, ergibt sich die Bewertung der Laborergebnisse mit herkömmlichen Verfahren 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 11 zusammengefasst.

Tabelle 11: Ergebnisse von Destillationsverfahren zur Bestimmung der Gesamten Schweflige Säure [mg/L]

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Quotient s_L/s_{exp}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT19P01	50 (2)	111,62	8,38	1,56	0,22
FT19P02	31 (2)	87,97	7,28	1,36	0,24
FT19P03	28 (1)	99,80	7,54	1,41	0,27
FT19P05	25 (3)	171,94	8,95	1,67	0,33

Für **alle Prüfgüter** wurden **gültige Z-Scores** erhalten, wobei die Quotienten s_L/s_{Ziel} um den Richtwert 1,5 streuten, aber stets unter 2,0 lagen und die Zuverlässigkeit der Bezugswerte stets gegeben war.

Zusätzlich wurde für das Prüfgut **FT19P01** zur fachlichen Orientierung, z. B. im Rahmen einer Fehlerursachensuche, für die **jodometrisch bestimmten** Gehalte an Gesamter Schwefliger Säure eine Bewertung der Laborergebnisse unter Einschluss bzw. unter Ausschluss der Reduktone bei Bezug auf den Median der jeweiligen Datengruppe durchgeführt aber nicht in die Laborergebnismitteilung aufgenommen. Die Ergebnisse nach Ausschluss der Reduktone zeigen gegenüber den Ergebnissen ohne Reduktonausschluss erhöhte Werte der Quotienten s_L/s_{Ziel} und u_M/s_{Ziel} und damit den nachteiligen Einfluss der mangelhaften Vergleichbarkeit der Reduktionwerte an. Sie sind vollständig im Abschnitt 6.21 enthalten.

5 Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen

5.1 Spezielle Gegebenheiten für die FTIR-Ergebnisse einzelner Parameter

5.1.1 Gesamtalkohol

Der Wert des Standardparameters Gesamtalkohol der amtlichen Qualitätsweinanalyse wird aus den ermittelten Werten für Vorhandenen Alkohol und Vergärbare Zucker berechnet. Da die Bestimmung beider Parameter mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) durch die Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassen ist, kann der Wert für Gesamtalkohol auch aus den mittels FTIR ermittelten Werten für Vorhandenen Alkohol und Vergärbare Zucker berechnet und soll durch die zur Anwendung des FTIR-Verfahrens zugelassenen Laboratorien in dieser Laborvergleichsuntersuchung mitgeteilt werden. Daher wurde die Möglichkeit zur Mitteilung dieses Wertes für das Prüfgut FT19P01 und eine entsprechende Auswahl des Methoden-Codes auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' der Datei zur Ergebnismitteilung vorgesehen.

5.1.2 Kodierung der Analysenmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt

Auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' werden seit dessen Einführung im Vergleich zur Erfahrung über die Verbreitung spezifischer Parameterkalibrierungen auffällig viele Ergebnisse für beide Extrakt-Parameter mitgeteilt. 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 und FTIR-Messwerten (Weg 3) berechnet werden. Bei Weg 3 bestehen verschiedene Kombinationsmöglichkeiten. In der Dropdown-Liste zur Methodenangabe wurden verschiedene Kombinationsmöglichkeiten zur Auswahl gestellt aber relativ häufig offensichtlich unzutreffend ausgewählt. Teilweise wurde die Auswahl einer Methode unterlassen. Daher wurde von einer Prüfung abgesehen, ob sich bei Anwendung der verschiedenen Ermittlungswege wesentliche Unterschiede der erhaltenen Werte ergeben. Die vorliegenden Daten sind aber, z. B. für das Prüfgut FT19P01 in den Abschnitten 6.6.4 und 6.7.4 dieses Berichtes dokumentiert.

5.1.3 Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter

Die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse erfolgte – falls verfügbar – mit einer Zielstandardabweichung, die den Matrixeinfluss auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse berücksichtigt, als Leistungskriterium (siehe Abschnitt 2.4.1). Generell bei dem Parameter **Gesamtextrakt** sowie bei den Prüfgütern **FT19P03**, **FT19P04b** und **FT19P05** für die Parameter **Vergärbare Zucker** und **Fructose** erfolgte die Berechnung der Z-Scores 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** und **Freie Schweflige Säure** wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Laborergebnisse der herkömmlichen Bestimmungsmethoden, da keine die eventuellen Einflüsse der Matrix berücksichtigenden Zielstandardabweichungen bekannt sind.

Die Z-Scores für den Parameter **Gesamte Schweflige Säure** wurden entsprechend einer in der Besprechung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses am 07.03.2018 aufgrund der Ergebnisse des Methoden prüfenden Ringversuches und der Erfahrungen aus den zurückliegenden Laborvergleichsuntersuchungen ausgesprochenen Empfehlung mit der nach der Regel von Horwitz zu erwartenden Vergleichsstandardabweichung und nicht mehr wie bisher mit der Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens als Leistungskriterium berechnet. Dies bedeutet geringere Beträge der Z-Scores und damit fachlich gerechtfertigte, geringere Anforderungen als bei den bisherigen Laborvergleichsuntersuchungen.

5.1.4 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 Parameterbezeichnung **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 ($s_{\bar{0}}$) verwendet, die Matrixeffekte statistisch, d. h. gemäß einer Zufallsverteilung berücksichtigt. Liegt kein ausgeprägter Matrixeffekt vor, charakterisieren die erhaltenen Z-Scores unmittelbar die Leistungsfähigkeit der eigenen Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Bei ausgeprägten Matrixeffekten wird diese Aussage, gegebenenfalls nur für einzelne Parameter, beeinträchtigt.

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 der Betrag der zusätzliche Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung $s_{\bar{0}}$. Wird keine einheitliche Kalibrierung eingesetzt, so kann die mögliche Vergleichbarkeit von FTIR-Ergebnissen untereinander nicht erreicht werden.

Für jedes Prüfgut werden daher in einer eigenen Tabelle, z. B. für das Prüfgut FT19P01 in der nachfolgenden Tabelle 12, 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 (Algorithmus A nach DIN ISO 5725-5). 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-Scores 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-Scores für den Vergleich der FTIR-Ergebnisse untereinander nach der Formel „Z-Score = (Messwert – Medianwert)/ s_{FTIR} “ berechnen. Diese werden daher im Abschnitt 6 dieses Berichtes nicht wiedergegeben und sind in den Ergebnismitteilungen für die einzelnen Laboratorien ebenfalls nicht enthalten.

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

5.3 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT19P01

Für das Prüfgut FT19P01 zeigt der in Tabelle 12 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 im Einzelfall, z. B. Gesamtextrakt und Gesamtsäure, ein vergleichbarer Wert, d. h. $s_L/s_H < 1,5$, erreicht wurde. Das Ergebnis ist noch ungünstiger bei einem Vergleich der Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit den Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw exp. FTIR, s_{FTIR} "). Wie die Daten in Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR} " zeigen, wurde nur bei dem Parameter Gesamte Schweflige Säure der Wert 1,5 eingehalten, während bei den übrigen Parametern der Richtwert bzw. der Höchstwert von 2,0 überschritten wurde. Daraus folgt, dass bei den FTIR-Untersuchungen die Leistungsfähigkeit des Verfahrens bei weitem nicht erreicht wurde. Als Ursache der größeren Streuung kommen unzureichende Slope-Interzept-Korrekturen und vor allem weniger geeignete Parameterkalibrierungen in Betracht. Es kann sich allerdings auch ein schlechterer Pflegezustand des Gerätes auswirken.

Im vorliegenden Fall ist nur das unbefriedigende Gesamtergebnis für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure** nicht beachtlich, weil der Gehalt unter der Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens liegt und daher keine zuverlässige Bestimmung möglich ist. Aus diesem Grund werden für diesen Parameter weder im Abschnitt 6.17.3 noch in den Laborergebnismitteilungen Z-Scores ausgewiesen.

Tabelle 12: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut (FT19P01)

Parameter	alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Zielstdabw exp. FTIR s_{FTIR}	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	80	0,99595	0,995910	0,000271		0,000146		1,85	0,21
Vorhandener Alkohol (g/L)	84	100,109	100,100	1,164	2,831	0,739	0,41	1,57	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	40	32,791	32,800	0,843	1,097	0,415	0,77	2,03	0,32
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	74	6,506	6,530	1,060	0,279	0,354	3,81	2,99	0,35
Vergärbare Zucker(S) (g/L)	69	6,052	6,110	0,920	0,263	0,354	3,50	2,60	0,31
Glucose (g/L)	78	2,689	2,695	0,701	0,131	0,288	5,34	2,44	0,28
Fructose (g/L)	78	3,328	3,290	0,484	0,156	0,222	3,11	2,18	0,25
Glycerin (g/L)	60	8,065	8,010	0,511	0,331	0,265	1,54	1,93	0,25
pH-Wert	80	3,591	3,600	0,065		0,0188		3,43	0,38
Gesamtsäure (g/L)	83	5,401	5,400	0,178	0,237	0,0816	0,75	2,18	0,24
Weinsäure (g/L)	74	1,927	1,950	0,239	0,100	0,132	2,40	1,81	0,21
Flüchtige Säure (g/L)	75	0,556	0,550	0,0790	0,0340	0,0427	2,32	1,85	0,21
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	75	0,105	0,010	0,256	0,0011	0,0975	226,22	2,62	0,30
Gesamte Milchsäure (g/L)	74	2,190	2,165	0,288	0,109	0,0805	2,64	3,58	0,42
Freie Schweflige Säure (mg/L)	28	35,67	35,50	6,91	3,32	3,32	2,08	2,08	0,39
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	28	107,33	107,00	10,25	8,47	8,47	1,21	1,21	0,23

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 12:

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

Durch die Verwendung der Zielstandardabweichung $s_{\bar{y}}$ 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 Prüfzut, hier FT19P01.

Hierzu sind in Tabelle 13 die Abweichungen der Mediane der FTIR-Ergebnisse von den Medianen der Ergebnisse herkömmlicher Methoden sowie die $Z_{\bar{y}}$ -Scores zusammengestellt, die nach Division der Differenz durch die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung ($s_{\bar{y}}$) erhalten werden. Bei dem Parameter Gesamtextrakt wurde nicht die strengere Übereinstimmungsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens sondern wie bei der Bewertung der Laborergebnisse die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet.

Tabelle 13: Vergleich herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfzuges FT19P01

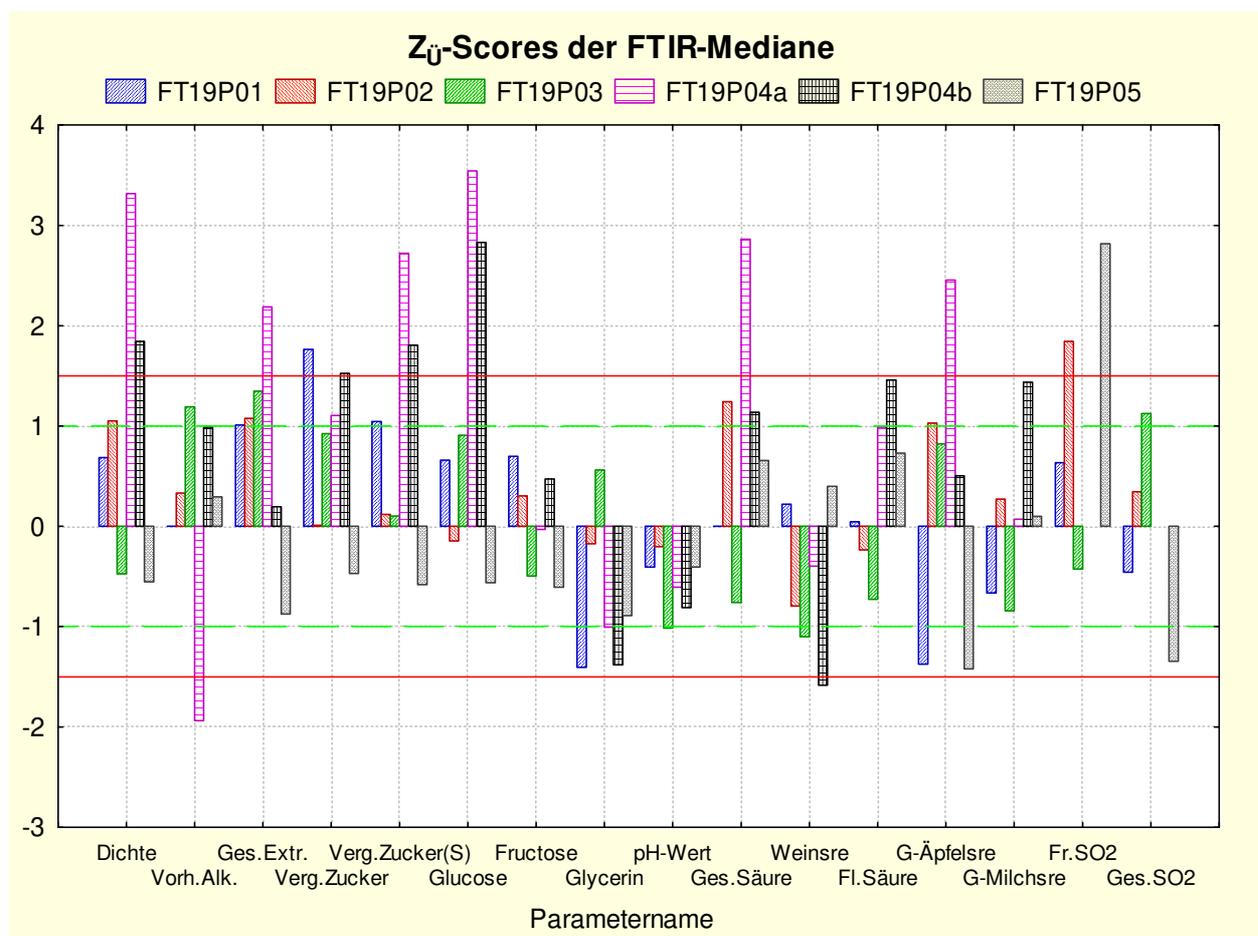
	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $s_{\bar{y}}$	$Z_{\bar{y}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,995910	0,99578	0,000130	0,000190	0,68
Vorhandener Alkohol [g/L]	100,100	100,100	0,000	0,886	0,00
Gesamtextrakt [g/L]	32,800	32,200	0,600	0,594	1,01
Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') [g/L]	6,530	5,500	1,030	0,584	1,76
reduktometrisch [g/L]	6,530	7,050	-0,520	0,584	-0,89
(Summe) [g/L]	6,110	5,500	0,610	0,584	1,04
Glucose [g/L]	2,695	2,426	0,269	0,408	0,66
Fructose [g/L]	3,290	3,060	0,230	0,330	0,70
Glycerin [g/L]	8,010	8,500	-0,490	0,348	-1,41
pH-Wert	3,600	3,620	-0,020	0,049	-0,41
Gesamtsäure [g/L]	5,400	5,400	0,000	0,145	0,00
Weinsäure [g/L]	1,950	1,900	0,050	0,227	0,22
Flüchtige Säure [g/L]	0,550	0,5460	0,004	0,089	0,04
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	0,0100	0,310	-0,300	0,218	-1,38
Gesamte Milchsäure [g/L]	2,356	2,495	-0,139	0,209	-0,67
Freie Schweflige Säure [mg/L]	35,50	33,50	2,00	3,160	0,63
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	107,00	111,00	-4,00	8,742	-0,46

Wie aus der Tabelle 13 ersichtlich, liegen die $Z_{\bar{y}}$ -Scores der Mediane der FTIR-Ergebnisse in der Regel deutlich unter 1 und überschreiten den Wert 1,5 nur für den Parameter Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt'). 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 **$Z_{\bar{y}}$ -Scores der FTIR-Laborergebnisse** sind – ausgenommen der Parameter Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') – **aussagekräftig** und zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen geeignet. Bei dem Parameter Glycerin ist ein geringer und bei dem Parameter Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') ein erheblicher Matrixeffekt zu berücksichtigen. Letzterer ist für Rotweine, insbesondere mit geringem Zuckergehalt, typisch und zeigt an, dass die weithin übliche Slope-Interzept-Korrektur der Basiskalibrierung mit den Ergebnissen enzymatischer und HPLC-Bestimmungen nicht genügt,

um die Ergebnisse der mit reduktometrischen Zuckerwerten erstellten Basiskalibrierung ausreichend der geänderten Definition des Zuckerbegriffes anzupassen.

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 die nachstehende Abbildung analog zur Tabelle 13 für alle Prüfgüter. Sie zeigt für die Gesamtheit der eingesetzten Kalibrierungen die $Z_{\bar{U}}$ -Scores der Mediane der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Medianen der herkömmlichen Ergebnisse und gibt eine Orientierung über das Ausmaß der (mittleren) Matrixeffekte für jeden Parameter bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfmaterialien. Die kritischen Grenzen für die $Z_{\bar{U}}$ -Score sind in der Graphik durch grüne bzw. rote Linien markiert. Liegt der absolute Betrag der dargestellten $Z_{\bar{U}}$ -Scores über 1, ist ein erhöhter Anteil von FTIR-Untersuchungsergebnissen mit unbefriedigendem, über dem Absolutbetrag von 2, d. h. mit über + 2 bzw. unter -2, liegenden $Z_{\bar{U}}$ -Scores zu erwarten. Wenn der $Z_{\bar{U}}$ -Score des Median über 1,5 liegt, kann der unbefriedigende $Z_{\bar{U}}$ -Score eines einzelnen Laborergebnisses nicht ohne kritische, alle Umstände umfassende Betrachtung als zutreffende Beschreibung der Laborleistung bewertet werden.



Zunächst zeigt eine globale Betrachtung der Graphik, dass bei der Mehrzahl der Parameter systematische Abweichungen ($|Z_{\bar{U}}| > 1$) zwischen den herkömmlichen und den FTIR-

Ergebnissen auftreten. Hierbei sind vor allem die aus dem Jahrgang 2014 stammenden Prüfgüter FT19P4a und FT19P04b auffällig. Für die meisten Parameter/Prüfgut-Kombinationen (59 von 92) liegen jedoch vernachlässigbare Matrixeffekte vor. Keine Hinweise auf wesentliche systematische Unterschiede liegen für alle Prüfgüter jedoch nur bei den Parametern Fructose und pH-Wert vor. Bei diesen Parametern und bei allen unauffälligen Parameter/Prüfgut-Kombinationen charakterisieren die Z-Scores der eigenen Messergebnisse unmittelbar und aussagekräftig die Leistungsfähigkeit der eigenen FTIR-Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Daher zeigen erhöhte Z-Scorebeträge bei diesen Kombinationen eindeutig Schwächen der eigenen Parameterkalibrierung oder des Gerätezustandes an.

Insgesamt liegen 33 Parameter/Prüfgut-Kombinationen vor, bei denen der Betrag des $Z_{\bar{0}}$ -Scores ($|z_{\bar{0}}| > 1$) den Wert eins erreicht oder überschreitet. 11 von 14 Parameter/Prüfgut-Kombinationen, bei denen der Betrag des $z_{\bar{0}}$ -Scores den Wert 1,5 überschreitet, und 6 von 19 Parameter/Prüfgut-Kombinationen, bei denen der Betrag des $z_{\bar{0}}$ -Scores zwischen 1,0 und 1,5 liegt, entfallen auf die Prüfgüter FT19P04a und FT19P04b. Daneben ergibt sich für das aus ausländischem Wein bestehende Prüfgut FT19P02 mit 5 Parameter/Prüfgut-Kombinationen und das aus essigstichigem Grundwein hergestellte Prüfgut FT19P03 mit 4 Parameter/Prüfgut-Kombinationen mit Beträgen des $Z_{\bar{0}}$ -Scores über 1,0 noch eine Häufung auffälliger $Z_{\bar{0}}$ -Scores. Es liegt nahe anzunehmen, dass hierfür bei den Prüfgütern FT19P04a und FT19P04b altersbedingte Veränderungen der Matrix und damit des FTIR-Spektrums ursächlich sind. Bei dem Prüfgut FT19P02 können herstellungsbedingte Unterschiede in der Matrix ursächlich sein, während sie bei dem Prüfgut FT19P03 in der mikrobiologischen Geschichte des Erzeugnisses begründet sein dürften. War derartiges Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen nicht ausreichend vertreten, so werden diese Einflüsse auf das Messergebnis durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen. Außerdem können Messergebnisse aus dem Bereich der unteren Anwendungsgrenze des FTIR-Verfahrens zu auffälligen Abweichungen von den Ergebnissen der herkömmlichen Methoden (siehe Freie Schweflige Säure bei den Prüfgütern FT19P02 und FT19P05) führen. Unbefriedigende Z-Scores der FTIR-Laborergebnisse sind bei derartigen Prüfgütern nicht ungewöhnlich. Die Z-Scores der eigenen FTIR-Messergebnisse sind daher unter Berücksichtigung dieser Hinweise zu bewerten.

6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern

6.1 Berechnete Parameter

Bei dem Prüfgut Rotwein (FT19P01) wurden von allen Laboratorien die Angaben zu den berechneten Parametern gefordert. Diese Angaben erfolgten – auch durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien – nicht vollständig. Von diesen 87 Teilnehmern fehlte die Angabe eines Gesamtalkoholwertes bei 6 Teilnehmern völlig, während 3 Teilnehmer nur einen Wert auf der Grundlage von FTIR-Messwerten mitteilten. Die mitgeteilten Daten wurden nicht rechnerisch nachgeprüft, da erfahrungsgemäß Fehler äußerst selten auftreten. Grundsätzlich erscheint eine eigene Bewertung der berechneten Parameter mittels Z-Score

nicht erforderlich, da dieser erfahrungsgemäß durch systematische Abweichungen bei den Ausgangsgrößen geprägt wird. Aus den bereits im Abschnitt 2.4.3.2 näher dargelegten Gründen wurde für die Parameter Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und zuckerfreier Extrakt bei dem Prüfgut FT19P01 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.

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:	Horvat-Wert (s_L/s_H): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 8
Zeile 12:	Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 9
Zeile 13:	Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$): 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

In der Tabelle 'Deskriptive Ergebnisse' werden die beschreibenden statistischen Werte angegeben, die aus allen einbezogenen (Daten, die nicht mehr als 50 % vom Median abweichen), mit herkömmlichen Methoden erhaltenen Laborwerten (Spalte: alle Daten) bzw. den nach Aus-

schluss stark abweichender Ergebnisse ($Z\text{-Score} > |5|$) verbleibenden Daten (Spalte: ber. Daten) berechnet wurden. Sie beschreiben die Grundlage der Bewertung der Laborleistungen.

Schließlich werden in der Tabelle 'Angaben zu den Analyseverfahren' die Kodierungen der Analyseverfahren durch eine Kurzbeschreibung erläutert, die Häufigkeit ihrer Verwendung sowie der robuste Mittelwert und die robuste Standardabweichung der Laborergebnisse zusammengefasst.

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

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

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. Wird für alle dargestellten Ergebnisse nur eine Zielstandardabweichung verwendet, so werden die Z-Score-Grenzen eingezeichnet. Da die Bewertungen der Abweichungsbeträge durch die für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse in der Regel unterschiedlichen Zielstandardabweichungen ungleich und damit die Z-Scores methodenabhängig sind, werden in diesen Fällen in die Graphik keine Z-Score-Grenzen eingezeichnet.

6.3 Relative Dichte 20 °C/20 °C

6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99565	-0,000130	-0,98	
03	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
04	LwK 8.4	0,99574	-0,000040	-0,30	
05	LwK 8.4	0,99573	-0,000050	-0,38	
06	LwK 8.4	0,99574	-0,000040	-0,30	
09	LwK 8.4	0,99577	-0,000010	-0,08	
11	LwK 8.4	0,99565	-0,000130	-0,98	
12	LwK 8.4	0,99571	-0,000070	-0,53	
13	LwK 8.4	0,99579	0,000010	0,08	
14	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
15	LwK 8.4	0,99578	0,000000	0,00	
17	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
18	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
19	LwK 8.4	0,99601	0,000230	1,74	
20	LwK 8.4	0,99581	0,000030	0,23	
21	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
22	LwK 8.4	0,99583	0,000050	0,38	
23	LwK 8.4	0,99575	-0,000030	-0,23	
24	LwK 8.4	0,99583	0,000050	0,38	
25	LwK 8.4	0,99574	-0,000040	-0,30	
26	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
27	LwK 8.4	0,99579	0,000010	0,08	
28	LwK 8.1	0,99550	-0,000280	-2,12	
29	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
30	LwK 8.4	0,99585	0,000070	0,53	
31	LwK 8.4	0,99582	0,000040	0,30	
32	LwK 8.1	0,99580	0,000020	0,15	
33	LwK 8.4	0,99557	-0,000210	-1,59	
34	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
36	LwK 8.4	0,99571	-0,000070	-0,53	
37	LwK 8.3	0,99493	-0,000850	-6,44	(**)
38	LwK 8.4	0,99588	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
40	LwK 8.4	0,99566	-0,000120	-0,91	
41	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
42	LwK 8.4	0,99573	-0,000050	-0,38	
43	LwK 8.4	0,99572	-0,000060	-0,45	
44	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
45	LwK 8.4	0,99579	0,000010	0,08	
46	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
47	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
48	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
49	LwK 8.4	0,99581	0,000030	0,23	
50	LwK 8.4	0,99577	-0,000010	-0,08	
51	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
52	LwK 8.4	0,99573	-0,000053	-0,40	
53	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
55	LwK 8.4	0,99578	0,000000	0,00	
56	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
57	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
58	LwK 8.4	0,99577	-0,000010	-0,08	
59	LwK 8.4	0,99578	0,000000	0,00	
60	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
61	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
62	LwK 8.3	0,99560	-0,000180	-1,36	
65	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
66	LwK 8.4	0,99610	0,000320	2,42	
70	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
74	LwK 8.4	0,98336	-0,012420	-94,09	(**)
75	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
82	LwK 8.4	0,99595	0,000170	1,29	
83	LwK 8.2	0,99590	0,000120	0,91	
85	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
86	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
87	LwK 8.4	0,99576	-0,000020	-0,15	
90	LwK 8.1	0,99571	-0,000070	-0,53	
98	LwK 8.1	0,99575	-0,000030	-0,23	
100	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
106	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
121	LwK 8.4	0,99550	-0,000280	-2,12	
122	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
123	LwK 8.4	0,99572	-0,000060	-0,45	
124	LwK 8.4	0,99600	0,000220	1,67	
125	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
126	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
127	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
128	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
129	LwK 8.4	0,99575	-0,000030	-0,23	
130	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
131	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
132	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
133	LwK 8.1	0,99600	0,000220	1,67	
134	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
135	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
136	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
137	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
138	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
139	LwK 8.1	0,99587	0,000090	0,68	
140	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
141	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
142	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
143	LwK 8.4	0,99573	-0,000050	-0,38	
144	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
145	LwK 8.1	0,99570	-0,000080	-0,61	
146	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
147	LwK 8.4	0,99581	0,000030	0,23	
148	LwK 8.4	0,99589	0,000110	0,83	
149	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	
150	LwK 8.4	0,99570	-0,000080	-0,61	
151	LwK 8.4	0,99590	0,000120	0,91	
152	LwK 8.2	0,99560	-0,000180	-1,36	
153	LwK 8.4	0,99577	-0,000010	-0,08	
154	LwK 8.1	0,99560	-0,000180	-1,36	
155	LwK 8.4	0,99580	0,000020	0,15	

6.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99570	-0,000080	-0,42	
202	FTIR	0,99572	-0,000060	-0,32	
203	FTIR	0,99612	0,000340	1,79	
204	FTIR	0,99570	-0,000080	-0,42	
205	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
206	FTIR	0,99593	0,000150	0,79	
207	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
208	FTIR	0,99569	-0,000090	-0,47	
209	FTIR	0,99564	-0,000140	-0,74	
210	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
211	FTIR	0,99630	0,000520	2,74	
212	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
214	FTIR	0,99560	-0,000180	-0,95	
215	FTIR	0,99560	-0,000180	-0,95	
216	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
217	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
218	FTIR	0,99591	0,000130	0,68	
219	FTIR	0,99630	0,000520	2,74	
220	FTIR	0,99570	-0,000080	-0,42	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	0,99606	0,000280	1,47	
222	FTIR	0,99576	-0,000020	-0,11	
223	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
224	FTIR	0,99580	0,000020	0,11	
225	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
226	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
227	FTIR	0,99583	0,000050	0,26	
228	FTIR	0,99550	-0,000280	-1,47	
229	FTIR	0,99576	-0,000020	-0,11	
231	FTIR	0,99570	-0,000080	-0,42	
232	FTIR	0,99580	0,000020	0,11	
234	FTIR	0,99584	0,000060	0,32	
235	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
236	FTIR	0,99591	0,000130	0,68	
237	FTIR	0,99615	0,000370	1,95	
240	FTIR	0,99588	0,000100	0,53	
241	FTIR	0,99580	0,000020	0,11	
242	FTIR	0,99586	0,000080	0,42	
243	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
244	FTIR	0,99630	0,000520	2,74	
245	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
247	FTIR	0,99591	0,000130	0,68	
249	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
250	FTIR	0,99580	0,000020	0,11	
251	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
252	FTIR	0,99621	0,000430	2,26	
254	FTIR	0,99620	0,000420	2,21	
255	FTIR	0,99620	0,000420	2,21	
256	FTIR	0,99594	0,000160	0,84	
257	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
258	FTIR	0,99540	-0,000380	-2,00	
259	FTIR	0,99586	0,000080	0,42	
260	FTIR	0,99640	0,000620	3,26	
261	FTIR	0,99620	0,000420	2,21	
262	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
263	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	
264	FTIR	0,99560	-0,000180	-0,95	
265	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
266	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
267	FTIR	0,99560	-0,000180	-0,95	
268	FTIR	0,99581	0,000030	0,16	
269	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
270	FTIR	0,99540	-0,000380	-2,00	
271	FTIR	0,99610	0,000320	1,68	
272	FTIR	0,99555	-0,000230	-1,21	
273	FTIR	0,99586	0,000080	0,42	
275	FTIR	0,99680	0,001020	5,37	(***)
276	FTIR	0,99570	-0,000080	-0,42	
277	FTIR	0,99560	-0,000180	-0,95	
278	FTIR	0,99640	0,000620	3,26	
279	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
280	FTIR	0,99640	0,000620	3,26	
281	FTIR	0,99620	0,000420	2,21	
282	FTIR	0,99630	0,000520	2,74	
283	FTIR	0,99600	0,000220	1,16	
284	FTIR	0,99580	0,000020	0,11	
285	FTIR	0,99685	0,001070	5,63	(***)
287	FTIR	0,99660	0,000820	4,32	
288	FTIR	0,99660	0,000820	4,32	
320	FTIR	0,99510	-0,000680	-3,58	
337	FTIR	0,99618	0,000400	2,11	
365	FTIR	0,99590	0,000120	0,63	

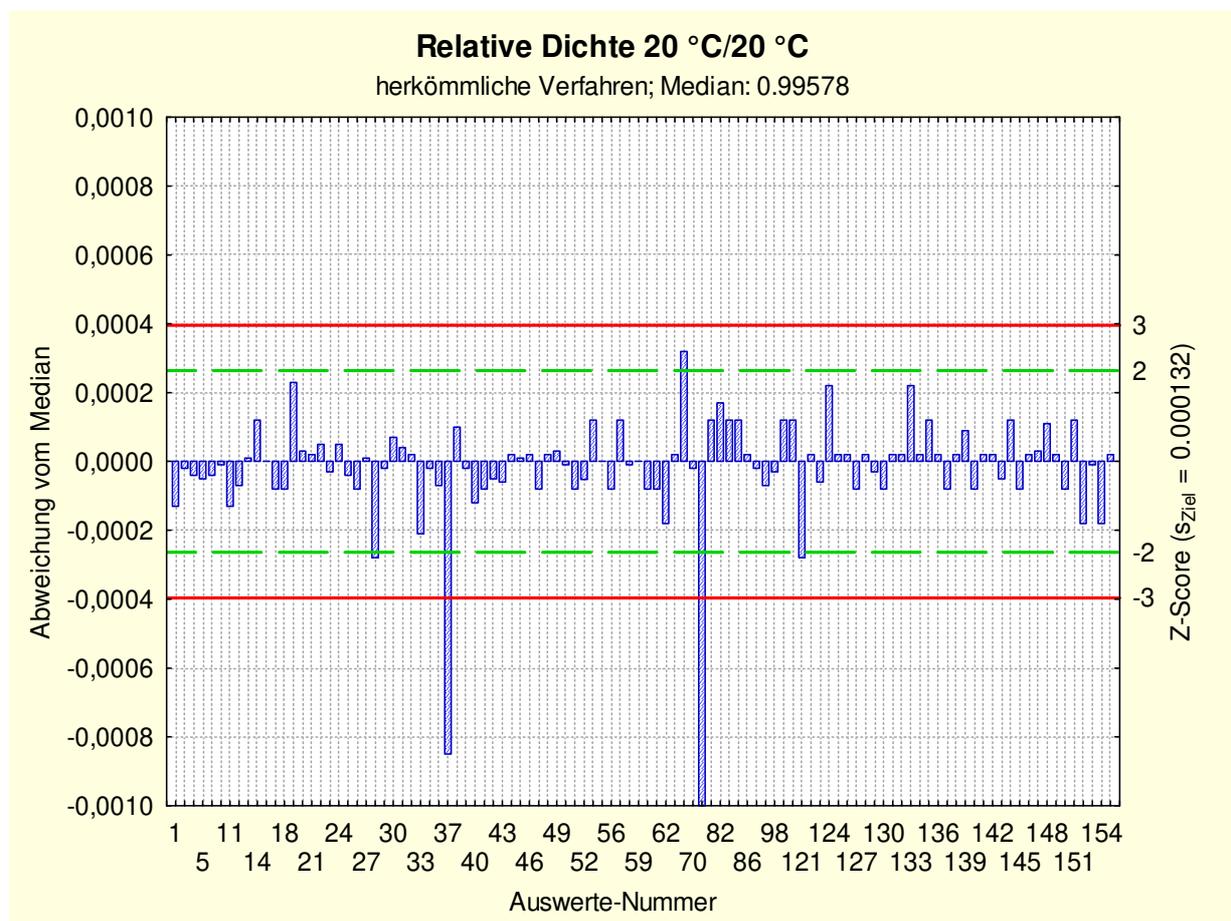
(***) Diese Messwerte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

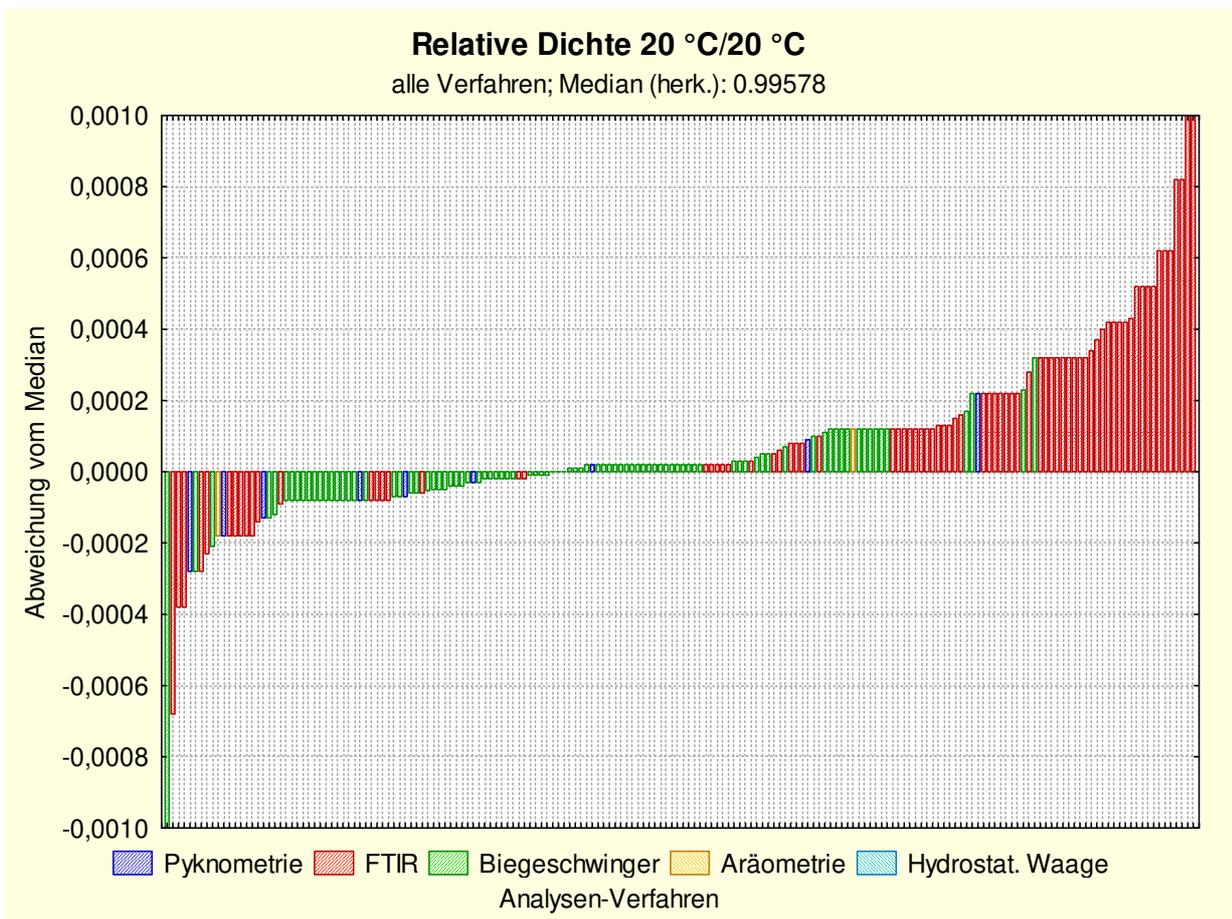
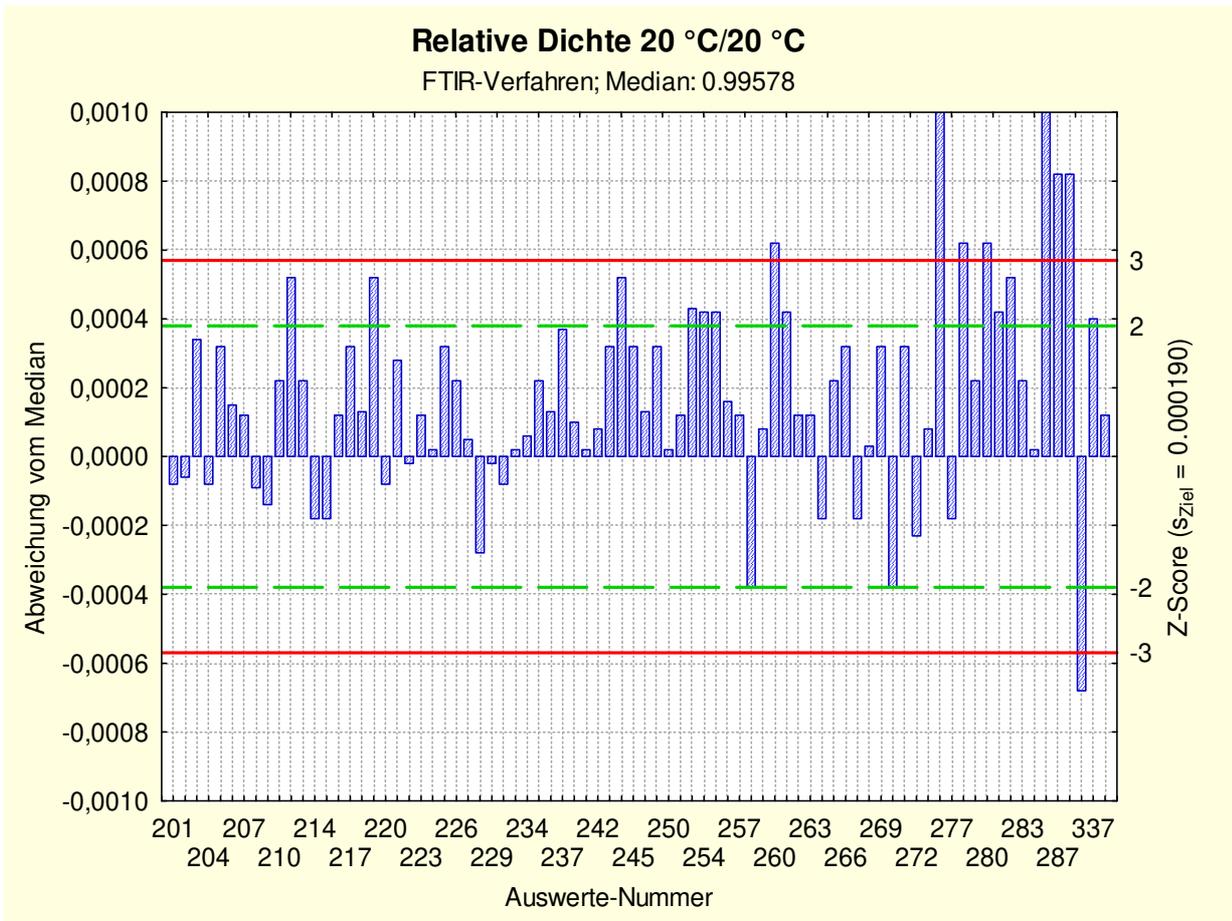
6.3.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	104	102
Minimalwert	0,98336	0,99550
Mittelwert	0,995650	0,995777
Median	0,995780	0,995780
Maximalwert	0,99610	0,99610
Standardabweichung (s _L)	0,001224	0,000098
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,000120	0,000010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s _L /s _H)		
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	9,27	0,74
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	6,44	0,52
Quotient (u _M /s _H)		
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,91	0,07
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,63	0,05

6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	9	0,99573	0,000158
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	2	0,99575	0,000241
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	2	0,99527	0,000537
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	91	0,99578	0,000079
	herkömmliche Verfahren	104	0,99577	0,000088
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	0,99595	0,000271





6.4 Gesamtalkohol [g/L]

6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren (*)	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 1.1 (1)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
05	LwK 1.1 (1)	101,8	-1,526	-0,52	-1,44	
06	LwK 1.1 (1)	103,3	-0,076	-0,03	-0,07	
09	LwK 1.1 (1)	104,2	0,874	0,30	0,82	
11	LwK 1.1 (1)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
12	LwK 1.1 (1)	103,8	0,474	0,16	0,45	
13	LwK 1.1 (1)	102,1	-1,226	-0,42	-1,15	
14	LwK 1.1 (1)	103,5	0,214	0,07	0,20	
15	LwK 1.1 (2)	104,3	0,974	0,33	0,92	
17	LwK 1.1 (3)	103,9	0,574	0,20	0,54	
18	LwK 1.1 (1)	103,8	0,474	0,16	0,45	
19	LwK 1.1 (2)	104,2	0,874	0,30	0,82	
20	LwK 1.1 (1)	103,6	0,274	0,09	0,26	
21	LwK 1.1 (1)	102,2	-1,126	-0,39	-1,06	
23	LwK 1.1 (2)	102,2	-1,126	-0,39	-1,06	
24	LwK 1.1 (2)	103,3	-0,026	-0,01	-0,02	
25	LwK 1.1 (1)	103,0	-0,320	-0,11	-0,30	
26	LwK 1.1 (1)	103,4	0,047	0,02	0,04	
28	LwK 1.1 (2)	104,5	1,174	0,40	1,10	
30	LwK 1.1 (1)	104,0	0,674	0,23	0,63	
31	LwK 1.1 (1)	103,1	-0,226	-0,08	-0,21	
32	LwK 1.1 (2)	101,4	-1,896	-0,65	-1,78	
33	LwK 1.1 (2)	103,1	-0,226	-0,08	-0,21	
34	LwK 1.1 (FTIR)	104,1	0,774	0,27	0,73	
37	LwK 1.1 (2)	101,5	-1,826	-0,63	-1,72	
38	LwK 1.1 (1)	103,9	0,574	0,20	0,54	
39	LwK 1.1 (1)	103,4	0,074	0,03	0,07	
40	LwK 1.1 (1)	93,6	-9,726	-3,34	-9,15	(**)
41	LwK 1.1 (1)	103,1	-0,266	-0,09	-0,25	
42	LwK 1.1 (1)	102,5	-0,826	-0,28	-0,78	
43	LwK 1.1 (2)	103,9	0,574	0,20	0,54	
44	LwK 1.1 (1)	102,1	-1,226	-0,42	-1,15	
45	LwK 1.1 (1)	100,8	-2,526	-0,87	-2,38	
47	LwK 1.1 (1)	103,0	-0,326	-0,11	-0,31	
48	LwK 1.1 (1)	101,9	-1,426	-0,49	-1,34	
49	LwK 1.1 (2)	104,0	0,674	0,23	0,63	
50	LwK 1.1 (1)	103,5	0,174	0,06	0,16	
51	LwK 1.1 (2)	103,3	-0,026	-0,01	-0,02	
52	LwK 1.1 (1)	103,7	0,374	0,13	0,35	
53	LwK 1.1 (1)	103,6	0,274	0,09	0,26	
55	LwK 1.1 (1)	102,0	-1,326	-0,46	-1,25	
56	LwK 1.1 (1)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
57	LwK 1.1 (1)	103,0	-0,326	-0,11	-0,31	
58	LwK 1.1 (2)	104,2	0,874	0,30	0,82	
59	LwK 1.1 (1)	104,2	0,834	0,29	0,78	
60	LwK 1.1 (2)	102,9	-0,426	-0,15	-0,40	
62	LwK 1.1 (1)	101,9	-1,426	-0,49	-1,34	
65	LwK 1.1 (2)	103,7	0,337	0,12	0,32	
74	LwK 1.1 (2)	127,9	24,531	8,44	23,08	(**)
75	LwK 1.1 (2)	107,0	3,674	1,26	3,46	
82	LwK 1.1 (1)	102,2	-1,166	-0,40	-1,10	
83	LwK 1.1 (1)	106,6	3,274	1,13	3,08	
85	LwK 1.1 (2)	104,4	1,074	0,37	1,01	
86	LwK 1.1 (2)	105,5	2,174	0,75	2,05	
97	LwK 1.1 (1)	102,4	-0,887	-0,30	-0,83	
106	LwK 1.1 (2)	103,3	0,000	0,00	0,00	
121	LwK 1.1 (1)	104,2	0,874	0,30	0,82	
122	LwK 1.1 (1)	103,9	0,574	0,20	0,54	
123	LwK 1.1 (1)	102,8	-0,526	-0,18	-0,49	
124	LwK 1.1 (1)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	

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

(*) Nähere Beschreibung zum Verfahren siehe Abschnitt 6.4.4.

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
125	LwK 1.1 (1)	104,0	0,674	0,23	0,63	
126	LwK 1.1 (FTIR)	103,0	-0,326	-0,11	-0,31	
127	LwK 1.1 (1)	104,7	1,374	0,47	1,29	
128	LwK 1.1 (1)	103,3	-0,026	-0,01	-0,02	
129	LwK 1.1 (1)	102,6	-0,766	-0,26	-0,72	
130	LwK 1.1 (2)	102,9	-0,426	-0,15	-0,40	
131	LwK 1.1 (2)	104,2	0,824	0,28	0,78	
132	LwK 1.1 (1)	103,9	0,574	0,20	0,54	
133	LwK 1.1 (1)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
134	LwK 1.1 (2)	102,8	-0,526	-0,18	-0,49	
135	LwK 1.1 (2)	6,2	-97,126	-33,40	-91,37	(*)
136	LwK 1.1 (2)	105,3	1,984	0,68	1,87	
137	LwK 1.1 (2)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
138	LwK 1.1 (1)	6,2	-97,126	-33,40	-91,37	(*)
139	LwK 1.1 (1)	104,1	0,774	0,27	0,73	
140	LwK 1.1 (1)	103,4	0,074	0,03	0,07	
141	LwK 1.1 (1)	103,0	-0,326	-0,11	-0,31	
142	LwK 1.1 (1)	103,4	0,074	0,03	0,07	
143	LwK 1.1 (1)	103,4	0,074	0,03	0,07	
144	LwK 1.1 (3)	102,8	-0,526	-0,18	-0,49	
145	LwK 1.1 (2)	104,8	1,474	0,51	1,39	
146	LwK 1.1 (1)	103,1	-0,226	-0,08	-0,21	
147	LwK 1.1 (1)	102,9	-0,426	-0,15	-0,40	
148	LwK 1.1 (1)	103,0	-0,326	-0,11	-0,31	
149	LwK 1.1 (1)	104,7	1,374	0,47	1,29	
150	LwK 1.1 (1)	103,8	0,474	0,16	0,45	
151	LwK 1.1 (1)	102,7	-0,626	-0,22	-0,59	
152	LwK 1.1 (2)	105,4	2,074	0,71	1,95	
153	LwK 1.1 (1)	102,7	-0,626	-0,22	-0,59	
154	LwK 1.1 (2)	104,7	1,374	0,47	1,29	
155	LwK 1.1 (2)	103,5	0,174	0,06	0,16	

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

(*) Nähere Beschreibung zum Verfahren siehe Abschnitt 6.4.4.

Die mit (*) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und blieben unberücksichtigt.

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

6.4.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren (*)	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 1.1 (FTIR)	103,8	0,474	0,16	0,45	
204	LwK 1.1 (FTIR)	102,2	-1,116	-0,38	-1,05	
205	LwK 1.1 (FTIR)	101,2	-2,086	-0,72	-1,96	
208	LwK 1.1 (FTIR)	103,2	-0,126	-0,04	-0,12	
214	LwK 1.1 (FTIR)	104,0	0,688	0,24	0,65	
215	LwK 1.1 (FTIR)	100,4	-2,926	-1,01	-2,75	
216	LwK 1.1 (FTIR)	104,9	1,584	0,54	1,49	
218	LwK 1.1 (FTIR)	102,8	-0,526	-0,18	-0,49	
223	LwK 1.1 (FTIR)	104,2	0,881	0,30	0,83	
246	LwK 1.1 (FTIR)	102,2	-1,126	-0,39	-1,06	
252	LwK 1.1 (3)	103,9	0,574	0,20	0,54	
254	LwK 1.1 (FTIR)	103,6	0,244	0,08	0,23	
258	LwK 1.1 (FTIR)	104,4	1,074	0,37	1,01	
259	LwK 1.1 (FTIR)	104,8	1,474	0,51	1,39	
260	LwK 1.1 (FTIR)	102,3	-0,996	-0,34	-0,94	
262	LwK 1.1 (FTIR)	101,7	-1,626	-0,56	-1,53	
269	LwK 1.1 (FTIR)	102,9	-0,426	-0,15	-0,40	
273	k. A.	102,3	-1,016	-0,35	-0,96	
279	LwK 1.1 (FTIR)	100,2	-3,166	-1,09	-2,98	
282	LwK 1.1 (FTIR)	103,7	0,394	0,14	0,37	
283	k. A.	100,6	-2,726	-0,94	-2,56	

(*) Nähere Beschreibung zum Verfahren siehe Abschnitt 6.4.4.

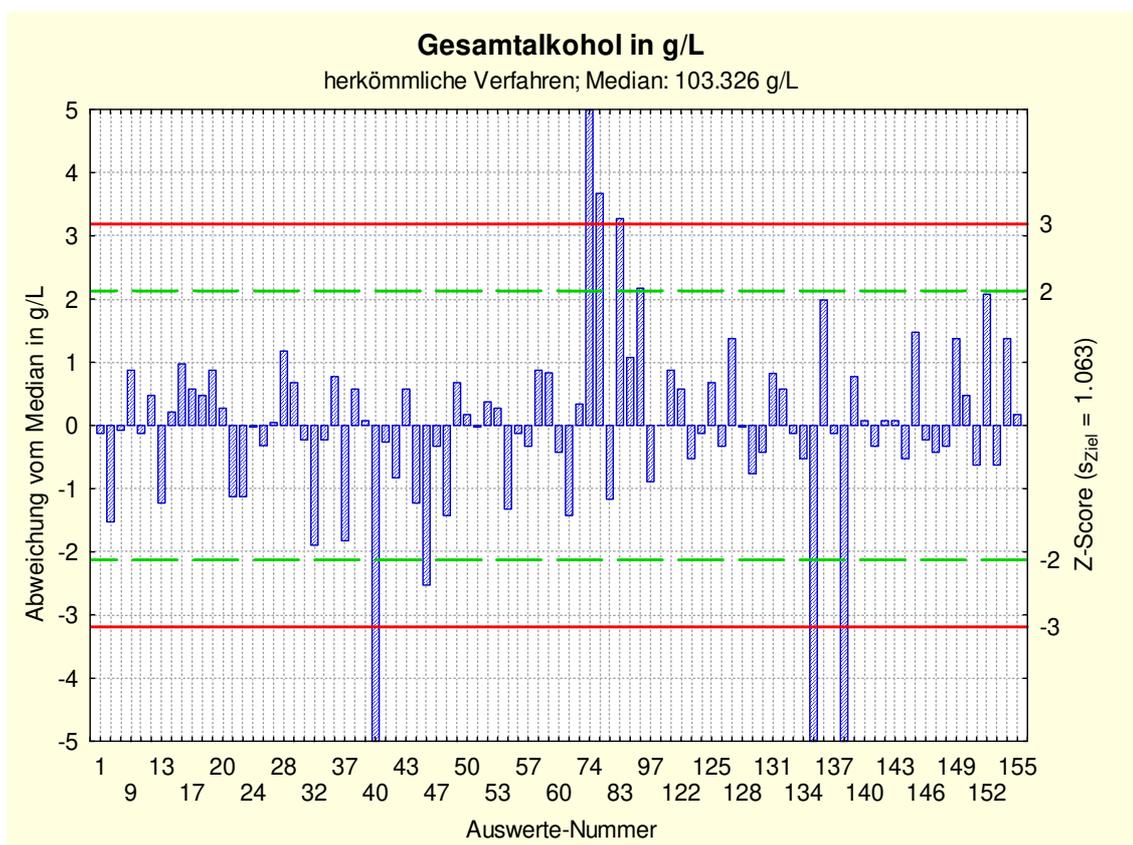
6.4.3 Deskriptive Ergebnisse

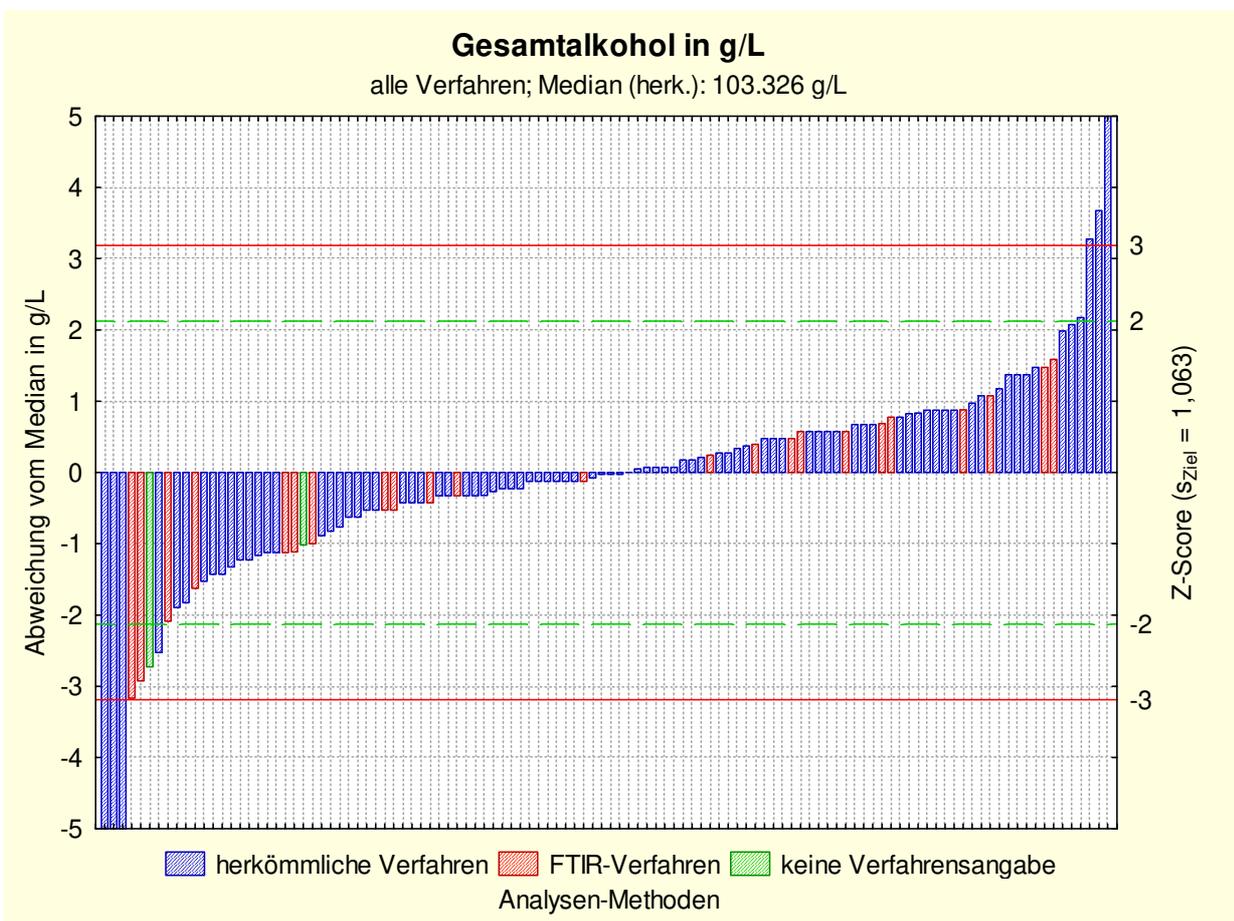
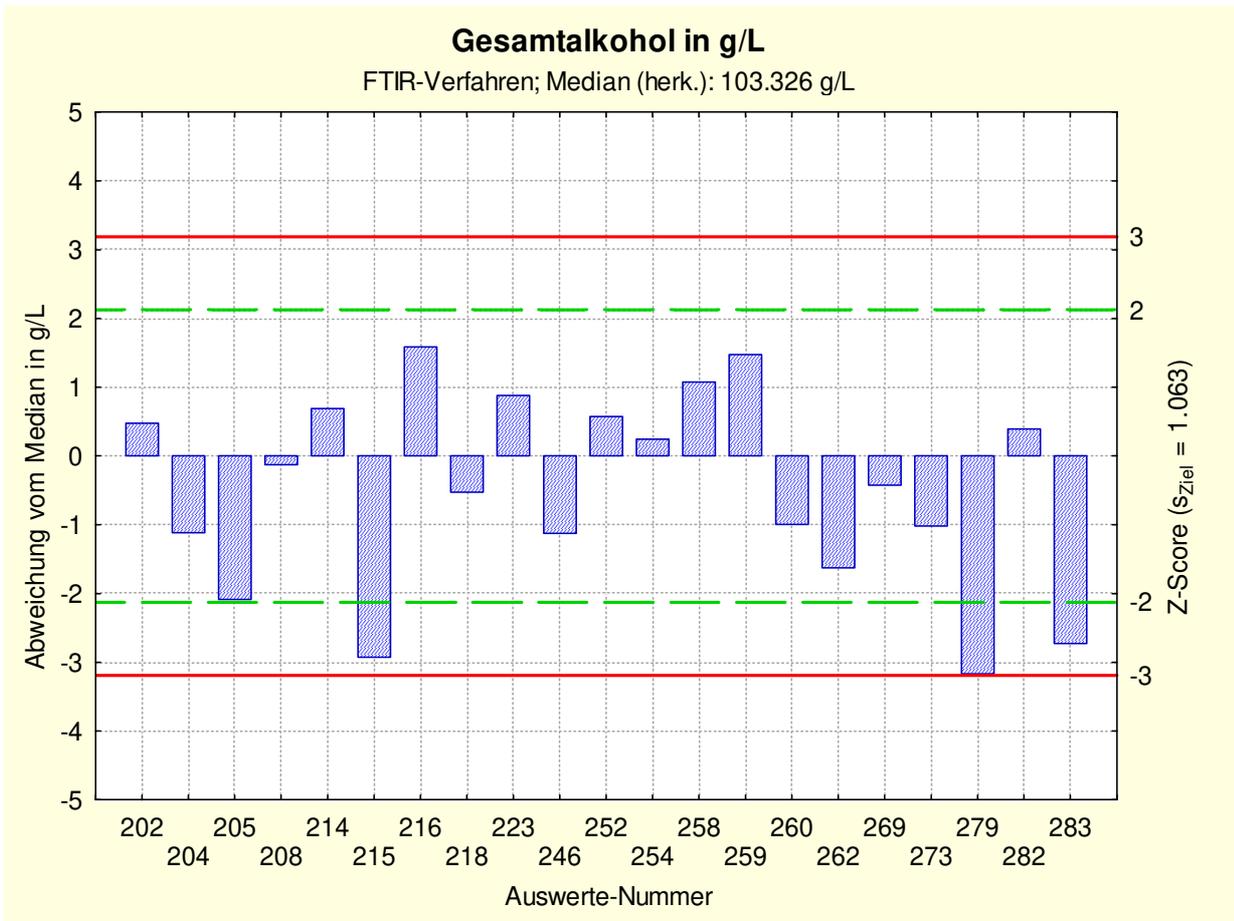
Ergebnisse für Gesamten Alkohol in g/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	85	83
Minimalwert	93,60	100,80
Mittelwert	103,600	103,428
Median	103,326	103,326
Maximalwert	127,86	107,00
Standardabweichung (s_L)	3,048	1,046
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,331	0,115
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,908	2,908
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,063	1,063
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)		
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,05	0,36
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,87	0,98
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,11	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,31	0,11
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)		

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

6.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (1) (Zucker enz./HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose, enzymat. oder HPLC] * 0,47)+Vorh. Alkohol [g/L]	58	103,16	0,843
LwK 1.1 (2) (Zucker reduktometrisch)	((Gesamtzucker [reduktometrisch] - 1) * 0,47) + Vorh. Alkohol [g/L]	29	103,82	1,304
	herkömmliche Verfahren	87	103,34	0,989
LwK 1.1 (FTIR) (FTIR-Alkohol +-Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR-Glucose + FTIR-Fructose]*0,47)+Vorh. Alkohol [FTIR] [g/L]	20	103,05	1,400
LwK 1.1 (3) (Alkohol+FTIR-Zucker)	Alkohol pyknometrisch + (Gesamt- oder Summenzucker FTIR)*0,47	3	103,54	0,707
k. A.	keine Methodenangabe	2	101,46	1,371





6.5 Vorhandener Alkohol [g/L]

6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	100,60	0,500	0,18	0,93	
03	LwK 2.9	101,72	1,620	0,57	3,03	
04	LwK 2.1	100,15	0,055	0,02	0,10	
05	LwK 2.4	99,19	-0,910	-0,32	-1,70	
06	LwK 2.9	100,71	0,610	0,22	1,14	
09	LwK 2.1	101,17	1,070	0,38	2,00	
11	LwK 2.1	100,55	0,450	0,16	0,84	
12	LwK 2.9	101,30	1,200	0,42	2,24	
13	LwK 2.1	99,50	-0,600	-0,21	-1,12	
14	LwK 2.9	100,95	0,850	0,30	1,59	
15	LwK 2.9	101,70	1,600	0,57	2,99	
17	LwK 2.9	101,40	1,300	0,46	2,43	
18	LwK 2.1	101,04	0,940	0,33	1,76	
19	LwK 2.9	100,80	0,700	0,25	1,31	
20	LwK 2.9	100,90	0,800	0,28	1,50	
21	LwK 2.7	99,60	-0,500	-0,18	-0,93	
22	LwK 2.9	100,70	0,600	0,21	1,12	
23	LwK 2.5	102,20	2,100	0,74	3,93	
24	LwK 2.9	99,90	-0,200	-0,07	-0,37	
25	LwK 2.9	100,47	0,370	0,13	0,69	
26	LwK 2.4	100,60	0,500	0,18	0,93	
27	LwK 2.5	100,80	0,700	0,25	1,31	
28	LwK 2.4	100,90	0,800	0,28	1,50	
29	LwK 2.1	99,89	-0,210	-0,07	-0,39	
30	LwK 2.4	98,99	-1,110	-0,39	-2,07	
31	LwK 2.9	100,30	0,200	0,07	0,37	
32	LwK 2.4	98,84	-1,260	-0,45	-2,36	
33	LwK 2.1	100,10	0,000	0,00	0,00	
35	LwK 2.9	100,60	0,500	0,18	0,93	
37	LwK 2.2	99,40	-0,700	-0,25	-1,31	
38	LwK 2.9	101,00	0,900	0,32	1,68	
39	LwK 2.4	100,70	0,600	0,21	1,12	
40	LwK 2.4	100,50	0,400	0,14	0,75	
41	LwK 2.9	100,58	0,480	0,17	0,90	
42	LwK 2.4	100,00	-0,100	-0,04	-0,19	
43	LwK 2.9	100,90	0,800	0,28	1,50	
44	LwK 2.1	99,70	-0,400	-0,14	-0,75	
45	LwK 2.9	98,40	-1,700	-0,60	-3,18	
46	LwK 2.5	99,90	-0,200	-0,07	-0,37	
47	LwK 2.1	100,50	0,400	0,14	0,75	
48	LwK 2.4	99,50	-0,600	-0,21	-1,12	
49	LwK 2.4	100,50	0,400	0,14	0,75	
50	LwK 2.9	100,70	0,600	0,21	1,12	
51	LwK 2.9	100,40	0,300	0,11	0,56	
52	LwK 2.9	101,30	1,200	0,42	2,24	
53	LwK 2.9	101,10	1,000	0,35	1,87	
55	LwK 2.1	99,56	-0,540	-0,19	-1,01	
56	LwK 2.9	100,60	0,500	0,18	0,93	
57	LwK 2.5	100,80	0,700	0,25	1,31	
58	LwK 2.9	101,10	1,000	0,35	1,87	
59	LwK 2.9	101,80	1,700	0,60	3,18	
60	LwK 2.1	99,20	-0,900	-0,32	-1,68	
61	LwK 2.9	100,40	0,300	0,11	0,56	
62	LwK 2.1	98,30	-1,800	-0,64	-3,36	
65	LwK 2.5	100,89	0,790	0,28	1,48	
66	LwK 2.5	100,70	0,600	0,21	1,12	
70	LwK 2.9	101,92	1,820	0,64	3,40	
74	LwK 2.1	99,92	-0,182	-0,06	-0,34	
75	LwK 2.9	103,00	2,900	1,02	5,42	(***)
82	LwK 2.1	98,80	-1,300	-0,46	-2,43	

Die Messwerte in roter Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.
Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
83	LwK 2.2	104,00	3,900	1,38	7,29	(***)
85	LwK 2.3	101,00	0,900	0,32	1,68	
86	LwK 2.9	101,40	1,300	0,46	2,43	
87	LwK 2.9	100,79	0,686	0,24	1,28	
90	LwK 2.1	97,70	-2,400	-0,85	-4,49	
92	LwK 2.4	99,97	-0,130	-0,05	-0,24	
93	LwK 2.1	100,00	-0,100	-0,04	-0,19	
94	LwK 2.5	101,00	0,900	0,32	1,68	
97	LwK 2.1	100,00	-0,100	-0,04	-0,19	
98	LwK 2.1	102,30	2,200	0,78	4,11	
99	LwK 2.9	99,94	-0,160	-0,06	-0,30	
100	LwK 2.9	100,30	0,200	0,07	0,37	
102	LwK 2.9	100,70	0,600	0,21	1,12	
103	LwK 2.4	99,21	-0,890	-0,31	-1,66	
106	LwK 2.5	100,60	0,500	0,18	0,93	
107	Dest./Bieg.	99,94	-0,160	-0,06	-0,30	
108	LwK 2.9	101,80	1,700	0,60	3,18	
111	NMR	99,13	-0,974	-0,34	-1,82	
112	NMR	95,65	-4,455	-1,57	-8,33	(***)
113	NMR	99,54	-0,562	-0,20	-1,05	
114	NMR	93,73	-6,365	-2,25	-11,90	(***)
116	NMR	98,95	-1,146	-0,40	-2,14	
121	LwK 2.9	101,50	1,400	0,49	2,62	
122	LwK 2.9	101,00	0,900	0,32	1,68	
123	LwK 2.7	100,00	-0,100	-0,04	-0,19	
124	LwK 2.9	100,70	0,600	0,21	1,12	
125	LwK 2.1	100,90	0,800	0,28	1,50	
126	LwK 2.7	100,23	0,130	0,05	0,24	
127	LwK 2.5	101,70	1,600	0,57	2,99	
128	LwK 2.1	100,70	0,600	0,21	1,12	
129	LwK 2.5	100,10	0,000	0,00	0,00	
130	LwK 2.4	99,30	-0,800	-0,28	-1,50	
131	LwK 2.5	100,25	0,150	0,05	0,28	
132	LwK 2.9	101,00	0,900	0,32	1,68	
133	LwK 2.3	100,60	0,500	0,18	0,93	
134	LwK 2.5	99,70	-0,400	-0,14	-0,75	
135	LwK 2.5	100,40	0,300	0,11	0,56	
136	LwK 2.5	101,97	1,870	0,66	3,50	
137	LwK 2.9	100,60	0,500	0,18	0,93	
138	LwK 2.7	99,80	-0,300	-0,11	-0,56	
139	LwK 2.2	102,20	2,100	0,74	3,93	
140	LwK 2.5	100,90	0,800	0,28	1,50	
141	LwK 2.4	100,40	0,300	0,11	0,56	
142	LwK 2.9	100,90	0,800	0,28	1,50	
143	LwK 2.1	100,60	0,500	0,18	0,93	
144	LwK 2.5	100,30	0,200	0,07	0,37	
145	LwK 2.3	101,60	1,500	0,53	2,80	
146	LwK 2.9	100,60	0,500	0,18	0,93	
147	LwK 2.7	100,20	0,100	0,04	0,19	
148	LwK 2.9	100,50	0,400	0,14	0,75	
149	LwK 2.5	100,90	0,800	0,28	1,50	
150	LwK 2.4	101,40	1,300	0,46	2,43	
151	LwK 2.9	99,90	-0,200	-0,07	-0,37	
152	LwK 2.2	102,50	2,400	0,85	4,49	
153	LwK 2.9	100,20	0,100	0,04	0,19	
154	LwK 2.4	101,50	1,400	0,49	2,62	
155	LwK 2.1	101,00	0,900	0,32	1,68	

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

6.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	99,12	-0,980	-0,35	-1,11	
202	LwK 2.8	101,30	1,200	0,42	1,35	
203	LwK 2.8	99,05	-1,050	-0,37	-1,19	
204	LwK 2.8	99,52	-0,577	-0,20	-0,65	
205	LwK 2.8	98,94	-1,160	-0,41	-1,31	
206	LwK 2.8	101,27	1,170	0,41	1,32	
207	LwK 2.8	99,10	-1,000	-0,35	-1,13	
208	LwK 2.8	100,30	0,200	0,07	0,23	
209	LwK 2.8	100,40	0,300	0,11	0,34	
210	LwK 2.8	98,80	-1,300	-0,46	-1,47	
211	LwK 2.8	98,80	-1,300	-0,46	-1,47	
212	LwK 2.8	100,94	0,840	0,30	0,95	
214	LwK 2.8	101,10	1,000	0,35	1,13	
215	LwK 2.8	98,60	-1,500	-0,53	-1,69	
216	LwK 2.8	102,02	1,920	0,68	2,17	
217	LwK 2.8	100,50	0,400	0,14	0,45	
218	LwK 2.8	100,00	-0,100	-0,04	-0,11	
219	LwK 2.8	101,60	1,500	0,53	1,69	
220	LwK 2.8	99,50	-0,600	-0,21	-0,68	
221	LwK 2.8	100,10	0,000	0,00	0,00	
222	LwK 2.8	102,00	1,900	0,67	2,14	
223	LwK 2.8	100,40	0,300	0,11	0,34	
224	LwK 2.8	99,74	-0,360	-0,13	-0,41	
225	LwK 2.8	101,10	1,000	0,35	1,13	
226	LwK 2.8	98,70	-1,400	-0,49	-1,58	
227	LwK 2.8	99,52	-0,580	-0,20	-0,65	
228	LwK 2.8	100,30	0,200	0,07	0,23	
229	LwK 2.8	99,55	-0,550	-0,19	-0,62	
231	LwK 2.8	99,20	-0,900	-0,32	-1,02	
232	LwK 2.8	99,30	-0,800	-0,28	-0,90	
234	LwK 2.8	100,90	0,800	0,28	0,90	
235	LwK 2.8	100,70	0,600	0,21	0,68	
236	LwK 2.8	100,70	0,600	0,21	0,68	
237	LwK 2.8	98,19	-1,910	-0,67	-2,16	
240	LwK 2.8	101,00	0,900	0,32	1,02	
241	LwK 2.8	100,10	0,000	0,00	0,00	
242	LwK 2.8	99,63	-0,470	-0,17	-0,53	
243	LwK 2.8	100,70	0,600	0,21	0,68	
244	LwK 2.8	100,46	0,360	0,13	0,41	
245	LwK 2.8	100,10	0,000	0,00	0,00	
246	LwK 2.8	99,70	-0,400	-0,14	-0,45	
247	LwK 2.8	99,43	-0,670	-0,24	-0,76	
248	LwK 2.8	99,10	-1,000	-0,35	-1,13	
249	LwK 2.8	100,80	0,700	0,25	0,79	
250	LwK 2.8	99,70	-0,400	-0,14	-0,45	
251	LwK 2.8	99,00	-1,100	-0,39	-1,24	
252	LwK 2.8	100,10	0,000	0,00	0,00	
254	LwK 2.8	100,00	-0,100	-0,04	-0,11	
255	LwK 2.8	99,90	-0,200	-0,07	-0,23	
256	LwK 2.8	99,10	-1,000	-0,35	-1,13	
257	LwK 2.8	101,60	1,500	0,53	1,69	
258	LwK 2.8	100,90	0,800	0,28	0,90	
259	LwK 2.8	101,44	1,340	0,47	1,51	
260	LwK 2.8	98,90	-1,200	-0,42	-1,35	
261	LwK 2.8	101,80	1,700	0,60	1,92	
262	LwK 2.8	98,40	-1,700	-0,60	-1,92	
263	LwK 2.8	102,20	2,100	0,74	2,37	
264	LwK 2.8	101,90	1,800	0,64	2,03	
265	LwK 2.8	100,60	0,500	0,18	0,56	
266	LwK 2.8	100,70	0,600	0,21	0,68	
267	LwK 2.8	100,00	-0,100	-0,04	-0,11	
268	LwK 2.8	101,18	1,080	0,38	1,22	
269	LwK 2.8	100,00	-0,100	-0,04	-0,11	
270	LwK 2.8	100,00	-0,100	-0,04	-0,11	
271	LwK 2.8	101,01	0,910	0,32	1,03	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 2.8	99,00	-1,100	-0,39	-1,24	
273	LwK 2.8	99,18	-0,920	-0,32	-1,04	
275	LwK 2.8	100,90	0,800	0,28	0,90	
276	LwK 2.8	98,50	-1,600	-0,57	-1,81	
277	LwK 2.8	98,50	-1,603	-0,57	-1,81	
278	LwK 2.8	98,45	-1,650	-0,58	-1,86	
279	LwK 2.8	98,00	-2,100	-0,74	-2,37	
280	LwK 2.8	99,50	-0,600	-0,21	-0,68	
281	LwK 2.8	100,79	0,686	0,24	0,77	
282	LwK 2.8	101,30	1,200	0,42	1,35	
283	LwK 2.8	98,15	-1,950	-0,69	-2,20	
284	LwK 2.8	101,20	1,100	0,39	1,24	
285	LwK 2.8	102,50	2,400	0,85	2,71	
287	LwK 2.8	99,89	-0,210	-0,07	-0,24	
288	LwK 2.8	100,64	0,540	0,19	0,61	
311	LwK 2.8	99,60	-0,500	-0,18	-0,56	
320	LwK 2.8	101,40	1,300	0,46	1,47	
337	LwK 2.8	97,85	-2,250	-0,79	-2,54	
365	LwK 2.8	100,80	0,700	0,25	0,79	

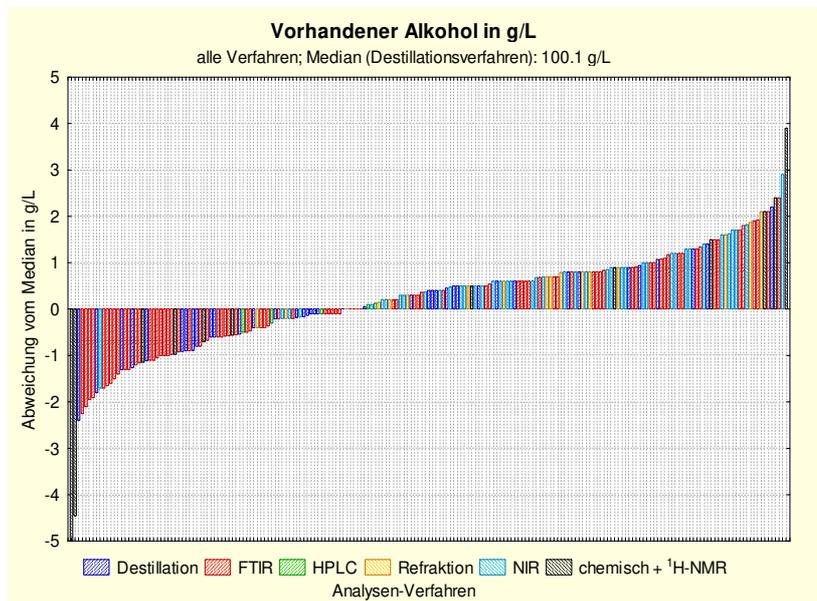
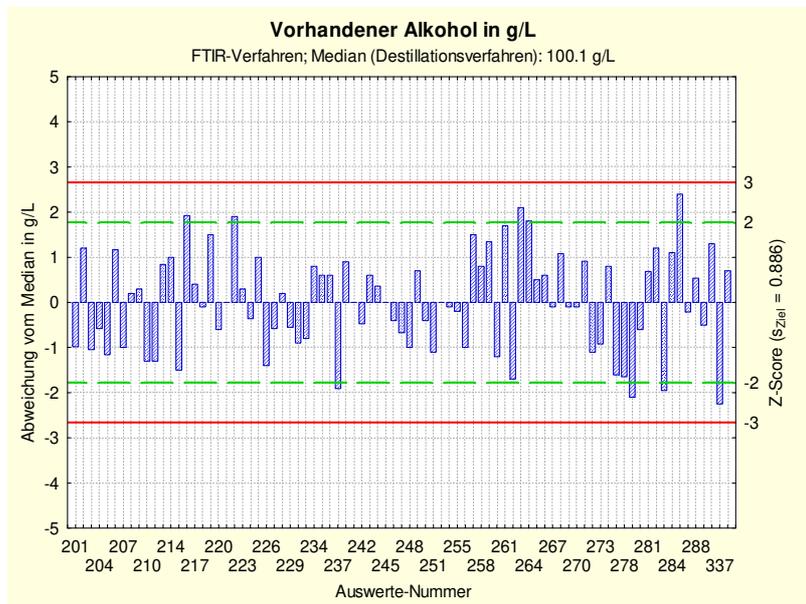
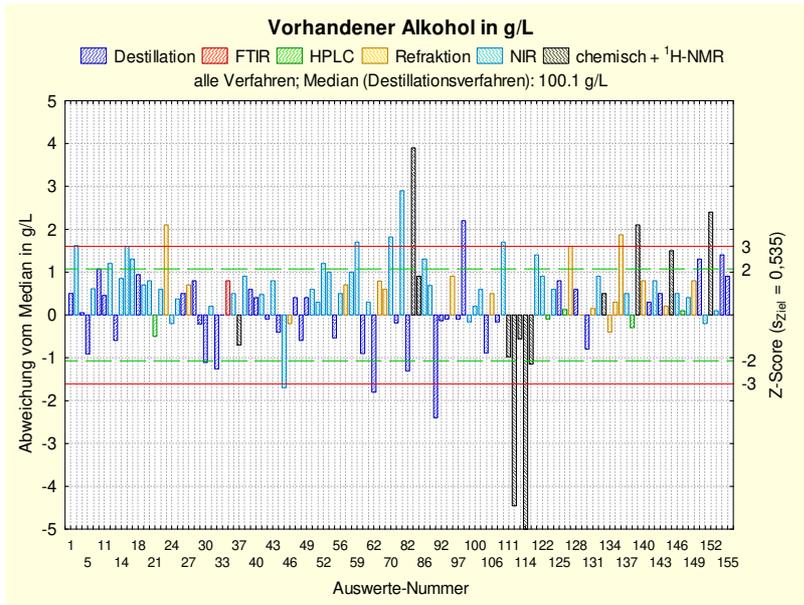
Die Messwerte in roter Schrift wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

6.5.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	39
Minimalwert	97,70
Mittelwert	100,094
Median	100,100
Maximalwert	102,30
Standardabweichung (s _L)	0,928
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,149
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,831
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,886
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,33
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,73
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,05
Quotient (u _M /s _H)	0,05
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,28
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,17

6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	23	100,129	0,878
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	16 39	100,094 100,111	0,961 0,907
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	4	102,103	2,016
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	3	101,067	0,571
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	17	100,734	0,689
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	99,966	0,304
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	100,099	1,167
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	43	100,851	0,596
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	97,627	2,618
Dest./Bieg.	Destillation (neutralisiert ?), Biegeschwinger	1	99,940	



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	32,20	0,00	0,00	0,00	
03	LwK 3.3	32,70	0,50	0,46	0,84	
05	LwK 3.3	31,55	-0,65	-0,60	-1,09	
06	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
09	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
11	LwK 3.2	31,90	-0,30	-0,28	-0,51	
12	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
13	LwK 3.2	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
14	LwK 3.3	33,10	0,90	0,83	1,52	
15	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
17	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
18	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
19	LwK 3.3	32,90	0,70	0,65	1,18	
20	LwK 3.3	32,40	0,20	0,19	0,34	
21	LwK 3.3	31,70	-0,50	-0,46	-0,84	
22	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
23	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
24	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
25	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
26	LwK 3.3	31,92	-0,28	-0,26	-0,46	
27	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
28	LwK 3.1	31,60	-0,60	-0,56	-1,01	
29	LwK 3.2	31,90	-0,30	-0,28	-0,51	
30	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
31	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 3.3	31,70	-0,50	-0,46	-0,84	
33	LwK 3.3	31,50	-0,70	-0,65	-1,18	
35	LwK 3.3	32,80	0,60	0,56	1,01	
37	LwK 3.3	29,40	-2,80	-2,59	-4,71	
38	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
39	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
41	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
42	LwK 3.3	31,80	-0,40	-0,37	-0,67	
43	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
44	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
45	LwK 3.3	31,40	-0,80	-0,74	-1,35	
47	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
48	LwK 3.3	31,80	-0,40	-0,37	-0,67	
49	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
50	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
52	LwK 3.3	32,40	0,20	0,19	0,34	
53	LwK 3.3	32,70	0,50	0,46	0,84	
55	LwK 3.3	31,80	-0,40	-0,37	-0,67	
56	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
57	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
58	LwK 3.3	32,40	0,20	0,19	0,34	
59	LwK 3.3	32,70	0,50	0,46	0,84	
60	LwK 3.2	31,50	-0,70	-0,65	-1,18	
61	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
62	LwK 3.2	31,60	-0,60	-0,56	-1,01	
65	FTIR	32,80	0,60	0,56	1,01	
75	LwK 3.3	33,30	1,10	1,02	1,85	
82	LwK 3.2	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
83	LwK 3.3	33,90	1,70	1,57	2,86	
85	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
86	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
90	LwK 3.2	31,00	-1,20	-1,11	-2,02	
97	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
98	LwK 3.2	32,80	0,60	0,56	1,01	
100	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
106	FTIR	32,80	0,60	0,56	1,01	
108	LwK 3.3	33,30	1,10	1,02	1,85	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
121	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
122	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
123	LwK 3.3	31,80	-0,40	-0,37	-0,67	
124	LwK 3.2	32,60	0,40	0,37	0,67	
125	LwK 3.2	32,40	0,20	0,19	0,34	
126	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
127	LwK 3.3	32,40	0,20	0,19	0,34	
128	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
129	LwK 3.3	31,90	-0,30	-0,28	-0,51	
130	LwK 3.3	31,50	-0,70	-0,65	-1,18	
131	LwK 3.3	32,04	-0,16	-0,15	-0,27	
132	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
133	LwK 3.3	32,70	0,50	0,46	0,84	
134	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
135	LwK 3.2	32,40	0,20	0,19	0,34	
136	LwK 3.3	32,90	0,70	0,65	1,18	
137	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
138	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
139	LwK 3.3	32,80	0,60	0,56	1,01	
140	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
141	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
142	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
143	LwK 3.2	32,30	0,10	0,09	0,17	
144	LwK 3.2	32,40	0,20	0,19	0,34	
145	LwK 3.3	32,30	0,10	0,09	0,17	
146	LwK 3.3	32,20	0,00	0,00	0,00	
147	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
148	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
149	LwK 3.3	32,50	0,30	0,28	0,51	
150	LwK 3.2	32,20	0,00	0,00	0,00	
151	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
152	LwK 3.3	32,60	0,40	0,37	0,67	
153	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
154	LwK 3.3	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
155	LwK 3.2	32,30	0,10	0,09	0,17	

6.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	k. A.	31,99	-0,21	-0,19	-0,35	
202	FTIR (gemessen)	32,50	0,30	0,28	0,51	
203	FTIR (gemessen)	33,77	1,57	1,45	2,64	
205	FTIR (gemessen)	31,35	-0,85	-0,79	-1,43	
208	FTIR (gemessen)	31,70	-0,50	-0,46	-0,84	
210	FTIR (gemessen)	32,30	0,10	0,09	0,17	
214	k. A.	31,80	-0,40	-0,37	-0,67	
215	FTIR (gemessen)	31,00	-1,20	-1,11	-2,02	
216	FTIR (gemessen)	33,05	0,85	0,79	1,43	
217	FTIR (gemessen)	32,90	0,70	0,65	1,18	
218	FTIR (gemessen)	33,30	1,10	1,02	1,85	
220	FTIR (gemessen)	32,00	-0,20	-0,19	-0,34	
221	FTIR (gemessen)	32,60	0,40	0,37	0,67	
223	LwK 3.3	32,80	0,60	0,56	1,01	
227	FTIR (gemessen)	32,41	0,21	0,19	0,35	
229	FTIR (gemessen)	33,12	0,92	0,85	1,55	
232	k. A.	32,75	0,55	0,51	0,93	
234	dens/FTIR	32,30	0,10	0,09	0,17	
236	LwK 3.3	32,10	-0,10	-0,09	-0,17	
237	FTIR (gemessen)	33,01	0,81	0,75	1,36	
240	FTIR (gemessen)	32,80	0,60	0,56	1,01	
244	FTIR (gemessen)	33,96	1,76	1,63	2,96	
246	LwK 3.3	31,90	-0,30	-0,28	-0,51	
247	FTIR (gemessen)	32,40	0,20	0,19	0,34	
251	FTIR (gemessen)	33,50	1,30	1,20	2,19	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
252	dens/FTIR	33,60	1,40	1,30	2,36	
254	FTIR (gemessen)	32,90	0,70	0,65	1,18	
255	FTIR (gemessen)	33,50	1,30	1,20	2,19	
258	LwK 3.3	31,30	-0,90	-0,83	-1,52	
259	LwK 3.3	32,70	0,50	0,46	0,84	
260	FTIR-Basis	33,00	0,80	0,74	1,35	
262	FTIR (gemessen)	32,70	0,50	0,46	0,84	
263	FTIR (gemessen)	33,60	1,40	1,30	2,36	
264	FTIR (gemessen)	31,70	-0,50	-0,46	-0,84	
265	FTIR (gemessen)	32,80	0,60	0,56	1,01	
268	FTIR (gemessen)	33,22	1,02	0,94	1,72	
269	FTIR (gemessen)	33,40	1,20	1,11	2,02	
270	FTIR (gemessen)	31,60	-0,60	-0,56	-1,01	
271	FTIR (gemessen)	34,53	2,33	2,16	3,92	
272	FTIR (gemessen)	31,60	-0,60	-0,56	-1,01	
273	k. A.	32,40	0,20	0,19	0,34	
275	FTIR (gemessen)	34,70	2,50	2,31	4,21	
279	FTIR (gemessen)	32,70	0,50	0,46	0,84	
280	k. A.	33,00	0,80	0,74	1,35	
282	FTIR (gemessen)	32,80	0,60	0,56	1,01	
283	FTIR (gemessen)	29,90	-2,30	-2,13	-3,87	
284	FTIR (gemessen)	32,90	0,70	0,65	1,18	
285	FTIR (gemessen)	32,30	0,10	0,09	0,17	
287	FTIR (gemessen)	34,30	2,10	1,94	3,54	
288	k. A.	34,50	2,30	2,13	3,87	
320	FTIR (gemessen)	33,30	1,10	1,02	1,85	
337	FTIR (gemessen)	32,99	0,79	0,73	1,33	

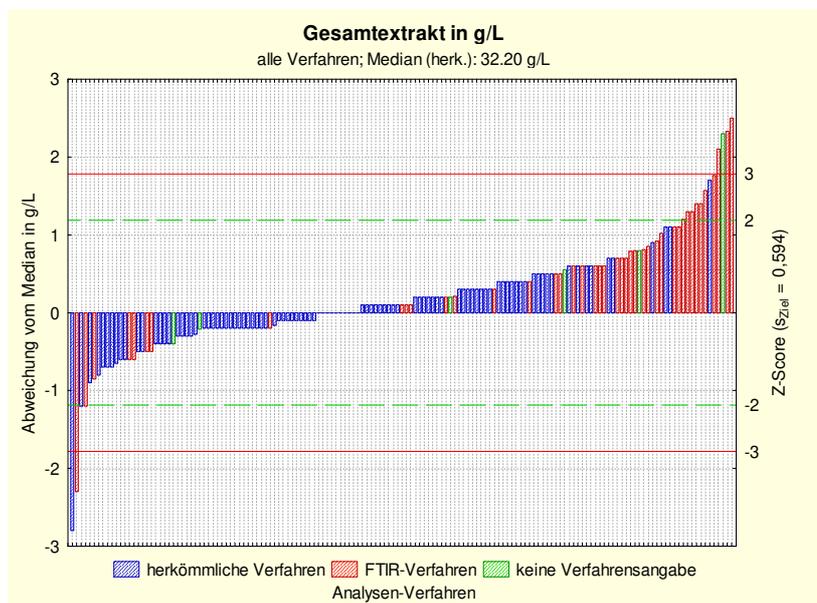
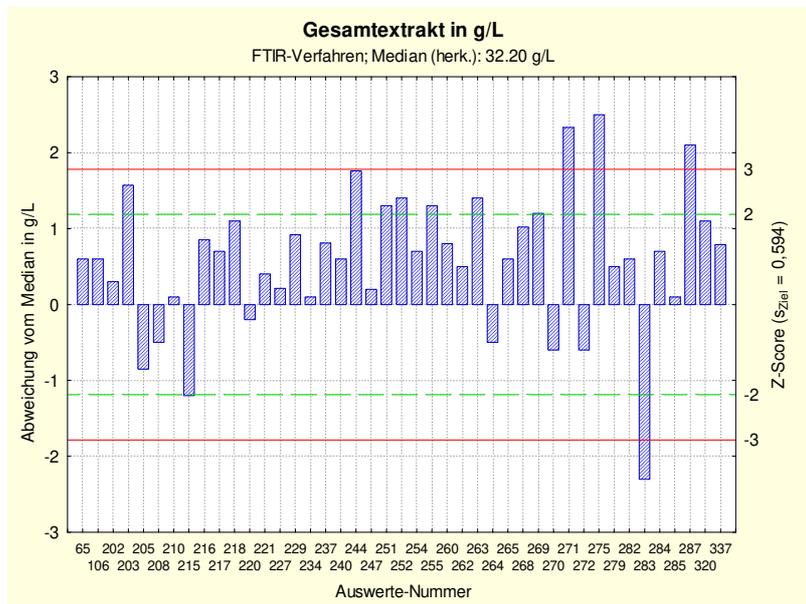
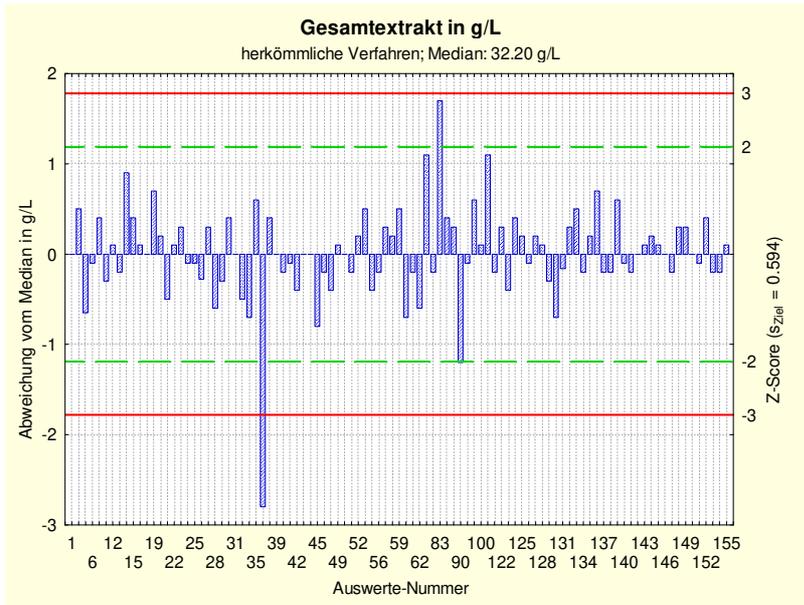
6.6.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	97
Minimalwert	29,4
Mittelwert	32,21
Median	32,20
Maximalwert	33,9
Standardabweichung (s _L)	0,521
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,053
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,080
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,565) *)
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,48
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,88
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(0,92)
Quotient (u _M /s _H)	0,05
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,09
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,09)

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

6.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	31,600	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n.LwK 2.1	16	32,125	0,421
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	80	32,245	0,378
	herkömmliche Verfahren	97	32,220	0,388
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (aus Spektrum)	40	32,791	0,843
dens/FTIR	Berechnung nach Tabarie auf der Basis densitometr. Dichte + FTIR-Alkohol	2	32,950	1,042
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	1	33,000	
k. A.	keine Verfahrensangabe	6	32,663	0,919



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	26,60	0,20	0,22	0,19	
05	LwK 3.3	25,98	-0,42	-0,46	-0,40	
06	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
09	LwK 3.3	26,90	0,50	0,55	0,48	
11	LwK 3.2	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
12	LwK 3.3	26,90	0,50	0,55	0,48	
13	LwK 3.2	26,54	0,14	0,15	0,13	
14	LwK 3.3	27,58	1,18	1,29	1,13	
15	LwK 3.3	27,10	0,70	0,77	0,67	
17	LwK 3.3	26,90	0,50	0,55	0,48	
18	LwK 3.3	26,30	-0,10	-0,11	-0,10	
19	LwK 3.3	25,80	-0,60	-0,66	-0,57	
20	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
21	LwK 3.3	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
22	LwK 3.3	26,40	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.3	25,00	-1,40	-1,53	-1,34	
24	LwK 3.3	24,90	-1,50	-1,64	-1,43	
25	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
26	LwK 3.3	26,02	-0,38	-0,41	-0,36	
27	LwK 3.3	25,30	-1,10	-1,21	-1,05	
28	LwK 3.1	23,90	-2,50	-2,74	-2,39	
29	LwK 3.2	26,00	-0,40	-0,44	-0,38	
30	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
31	LwK 3.3	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
32	LwK 3.3	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
33	LwK 3.3	25,10	-1,30	-1,42	-1,24	
35	LwK 3.3	27,40	1,00	1,10	0,95	
37	LwK 3.3	24,90	-1,50	-1,64	-1,43	
38	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
39	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
40	LwK 3.3	26,30	-0,10	-0,11	-0,10	
41	LwK 3.3	26,80	0,40	0,44	0,38	
42	LwK 3.3	26,40	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 3.3	25,80	-0,60	-0,66	-0,57	
44	LwK 3.3	27,00	0,60	0,66	0,57	
45	LwK 3.3	26,00	-0,40	-0,44	-0,38	
47	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
48	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
49	LwK 3.3	24,90	-1,50	-1,64	-1,43	
50	LwK 3.3	26,30	-0,10	-0,11	-0,10	
51	LwK 3.3	25,80	-0,60	-0,66	-0,57	
52	LwK 3.3	27,10	0,70	0,77	0,67	
53	LwK 3.3	27,30	0,90	0,99	0,86	
55	LwK 3.3	26,60	0,20	0,22	0,19	
56	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
57	LwK 3.3	28,00	1,60	1,75	1,53	
58	LwK 3.3	25,70	-0,70	-0,77	-0,67	
59	LwK 3.3	27,60	1,20	1,32	1,14	
60	LwK 3.2	23,50	-2,90	-3,18	-2,77	
62	LwK 3.2	23,90	-2,50	-2,74	-2,39	
75	LwK 3.3	24,70	-1,70	-1,86	-1,62	
82	LwK 3.2	24,77	-1,63	-1,79	-1,56	
83	LwK 3.3	28,00	1,60	1,75	1,53	
85	LwK 3.3	25,35	-1,05	-1,15	-1,00	
86	LwK 3.3	23,70	-2,70	-2,96	-2,58	
97	LwK 3.3	26,90	0,50	0,55	0,48	
100	LwK 3.2	26,80	0,40	0,44	0,38	
121	LwK 3.3	26,40	0,00	0,00	0,00	
122	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
123	LwK 3.3	25,90	-0,50	-0,55	-0,48	
124	LwK 3.2	27,20	0,80	0,88	0,76	
125	LwK 3.2	25,90	-0,50	-0,55	-0,48	
126	LwK 3.3	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
127	LwK 3.3	26,10	-0,30	-0,33	-0,29	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
128	LwK 3.3	26,70	0,30	0,33	0,29	
129	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
130	LwK 3.3	23,80	-2,60	-2,85	-2,48	
131	LwK 3.3	23,74	-2,66	-2,92	-2,54	
132	LwK 3.3	26,60	0,20	0,22	0,19	
133	LwK 3.3	27,10	0,70	0,77	0,67	
134	LwK 3.3	25,30	-1,10	-1,21	-1,05	
135	LwK 3.2	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
136	LwK 3.3	25,80	-0,60	-0,66	-0,57	
137	LwK 3.3	26,60	0,20	0,22	0,19	
138	LwK 3.3	25,90	-0,50	-0,55	-0,48	
139	LwK 3.3	27,70	1,30	1,42	1,24	
140	LwK 3.3	26,80	0,40	0,44	0,38	
141	LwK 3.3	26,40	0,00	0,00	0,00	
142	LwK 3.3	26,80	0,40	0,44	0,38	
143	LwK 3.2	26,30	-0,10	-0,11	-0,10	
144	LwK 3.3	27,00	0,60	0,66	0,57	
145	LwK 3.3	25,50	-0,90	-0,99	-0,86	
146	LwK 3.3	26,80	0,40	0,44	0,38	
147	LwK 3.3	26,20	-0,20	-0,22	-0,19	
148	LwK 3.3	27,00	0,60	0,66	0,57	
149	LwK 3.3	24,50	-1,90	-2,08	-1,81	
150	LwK 3.2	27,00	0,60	0,66	0,57	
151	LwK 3.2	26,40	0,00	0,00	0,00	
152	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
153	LwK 3.3	26,50	0,10	0,11	0,10	
154	LwK 3.3	25,00	-1,40	-1,53	-1,34	
155	LwK 3.2	26,90	0,50	0,55	0,48	

6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	FTIR Mix Basis	27,20	0,80	0,88	0,76	
205	FTIR (gemessen)	26,45	0,05	0,05	0,05	
208	FTIR (gemessen)	25,70	-0,70	-0,77	-0,67	
214	LwK 3.2	25,60	-0,80	-0,88	-0,76	
215	FTIR (gemessen)	27,20	0,80	0,88	0,76	
216	FTIR (gemessen)	27,27	0,87	0,95	0,83	
218	nur FTIR-Basis	26,30	-0,10	-0,11	-0,10	
234	dens/FTIR	25,40	-1,00	-1,10	-0,95	
246	LwK 3.3 (herk.)	26,50	0,10	0,11	0,10	
252	dens/FTIR	28,30	1,90	2,08	1,81	
254	LwK 3.3 (herk.)	25,30	-1,10	-1,21	-1,05	
258	LwK 3.3 (herk.)	24,00	-2,40	-2,63	-2,29	
259	LwK 3.3 (herk.)	25,40	-1,00	-1,10	-0,95	
260	FTIR Mix Basis	25,70	-0,70	-0,77	-0,67	
268	FTIR Mix Basis	26,24	-0,16	-0,18	-0,15	
269	FTIR Mix Basis	27,10	0,70	0,77	0,67	
279	FTIR Mix Basis	28,60	2,20	2,41	2,10	
282	FTIR Mix Basis	27,60	1,20	1,32	1,14	
283	LwK 3.3 (herk.)	23,70	-2,70	-2,96	-2,58	

Rote Methodenangabe: Die Verwendung der Auswahl "LwK 3.2" oder "LwK 3.3 (herk.)" für Ergebnisse auf der Basis von FTIR-Messungen ist nicht sachgerecht. Der Zusatz "(herk.)" soll dies deutlich machen.

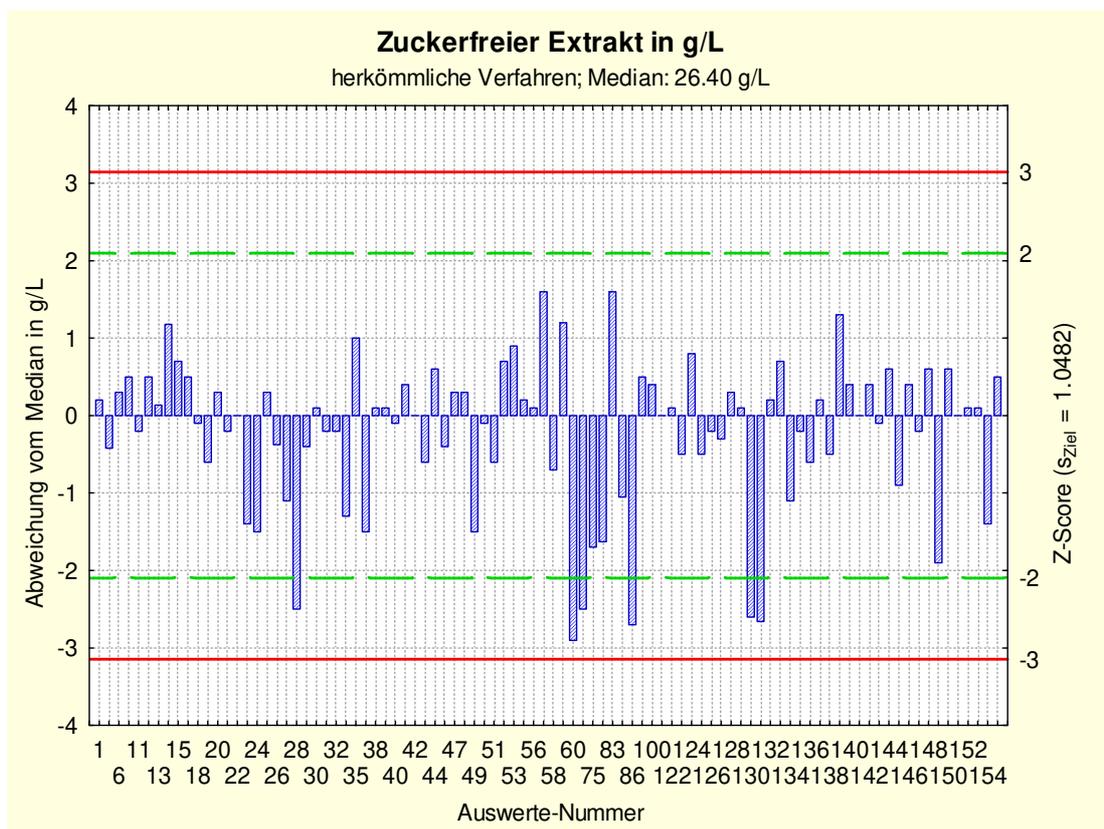
6.7.3 Deskriptive Ergebnisse

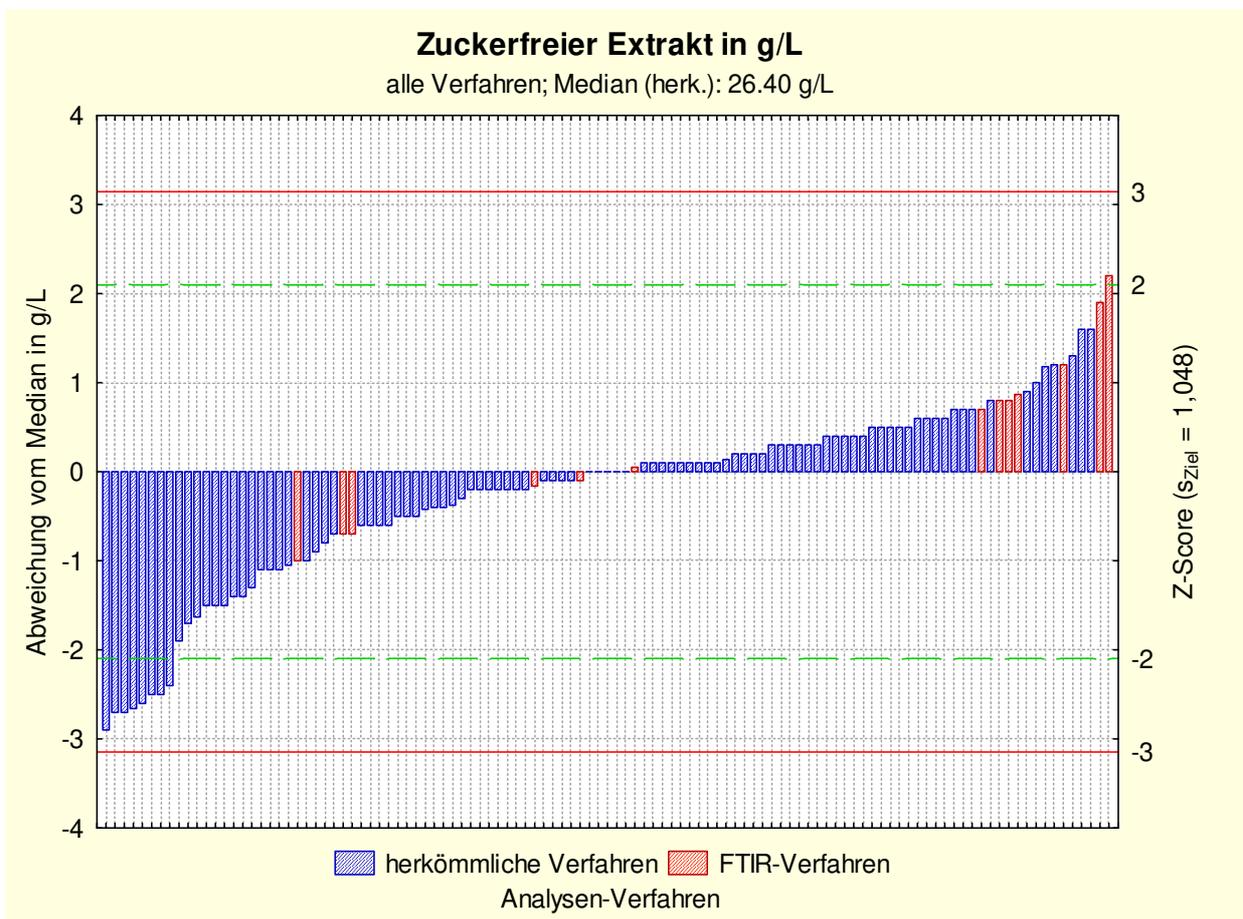
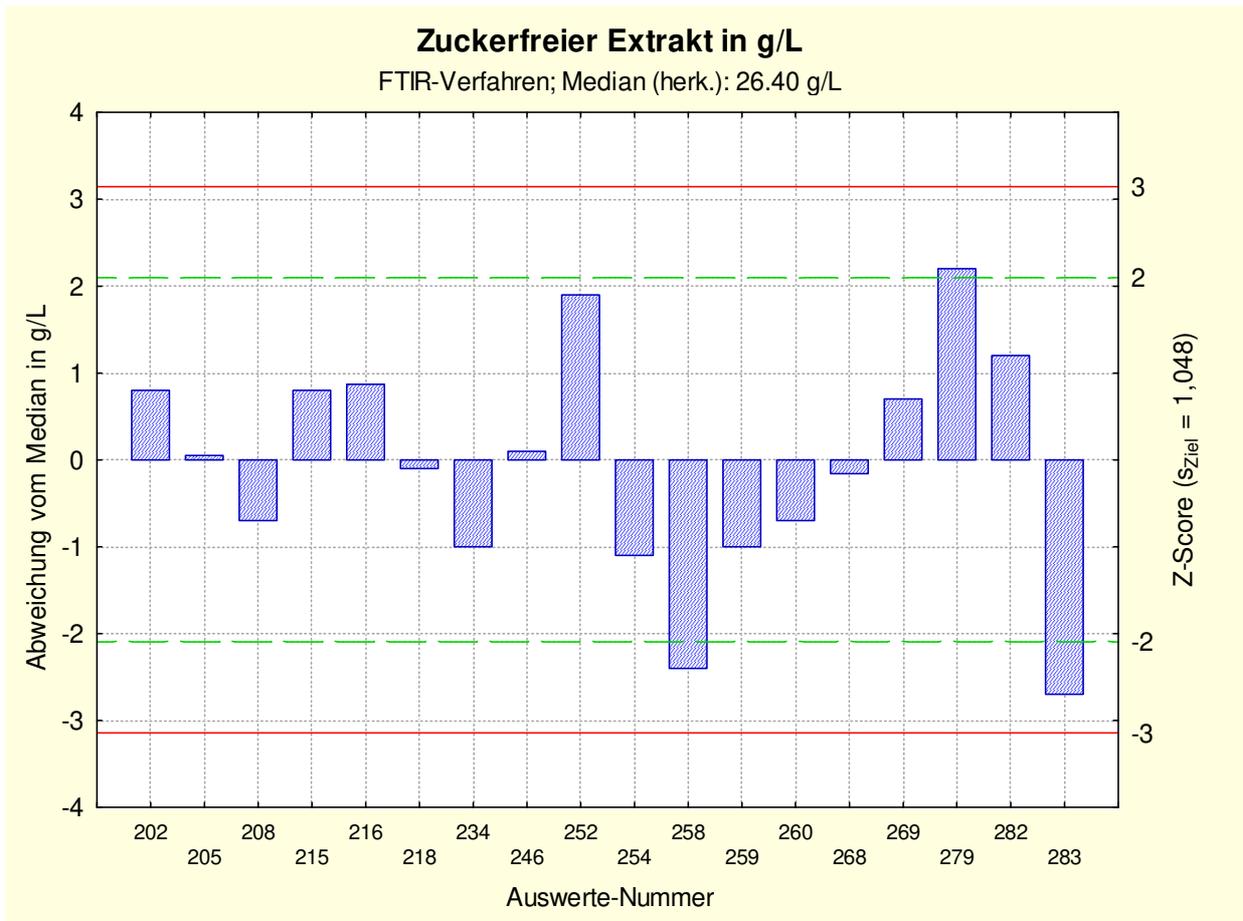
Ergebnisse für Zuckerfreier Extrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	92
Minimalwert	23,5
Mittelwert	26,18
Median	26,40
Maximalwert	28,0
Standardabweichung (s_L)	0,967
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,101
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,912
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ¹⁾	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,06
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,92
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ¹⁾	
Quotient (u_M/s_H)	0,11
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,10
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ¹⁾	

¹⁾ Die Bewertung der FTIR-Ergebnisse erfolgte mit der herkömmlichen Zielstandardabweichung.

6.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	23,900	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n. LwK 2.1	15	26,131	0,876
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	76	26,306	0,816
	herkömmliche Verfahren	92	26,166	0,836
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	4	26,708	0,734
dens/FTIR	Berechnung n. Tabarie (Basis: densitometr. Dichte; FTIR-Alkohol und FTIR-Zucker)	2	26,850	2,325
FTIR Mix Basis	FTIR gemessener Gesamtextrakt - FTIR-Zucker	6	27,073	1,157
nur FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf Basis: FTIR-Dichte; FTIR-Alkohol; FTIR-Zucker	1	26,300	





6.8 Vergärbare Zucker [g/L]

6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 4.5	5,60	0,100	0,42	0,52	
02	LwK 4.5	5,23	-0,270	-1,12	-1,41	
05	LwK 4.5	5,57	0,070	0,29	0,37	
06	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
09	LwK 4.7	5,68	0,180	0,75	0,94	
11	LwK 4.7	5,65	0,150	0,62	0,78	
12	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
13	LwK 4.7	5,46	-0,035	-0,15	-0,18	
14	LwK 4.5	5,50	0,000	0,00	0,00	
15	LwK 4.5	5,50	0,000	0,00	0,00	
18	LwK 4.5	5,44	-0,060	-0,25	-0,31	
19	LwK 4.4	7,10	1,600	6,65	8,36	(***)
20	LwK 4.7	5,80	0,300	1,25	1,57	
21	LwK 4.7	5,53	0,030	0,12	0,16	
22	LwK 4.7	5,90	0,400	1,66	2,09	
23	LwK 4.4	7,50	2,000	8,31	10,45	(***)
24	LwK 4.4	7,20	1,700	7,06	8,88	(***)
25	LwK 4.5	5,39	-0,105	-0,44	-0,55	
26	LwK 4.7	5,90	0,400	1,66	2,09	
27	LwK 4.4	7,20	1,700	7,06	8,88	(***)
28	LwK 4.4	7,40	1,900	7,89	9,93	(***)
29	LwK 4.5	5,93	0,430	1,79	2,25	
30	LwK 4.7	6,10	0,600	2,49	3,13	
31	LwK 4.5	6,00	0,500	2,08	2,61	
32	LwK 4.4	5,50	0,000	0,00	0,00	
33	LwK 4.4	6,40	0,900	3,74	4,70	
35	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
37	LwK 4.3	4,50	-1,000	-4,15	-5,22	(***)
38	LwK 4.5	6,13	0,630	2,62	3,29	
39	LwK 4.7	5,78	0,280	1,16	1,46	
40	LwK 4.5	5,65	0,150	0,62	0,78	
41	LwK 4.5	5,28	-0,220	-0,91	-1,15	
42	LwK 4.5	5,47	-0,033	-0,14	-0,17	
43	LwK 4.4	6,40	0,900	3,74	4,70	
44	LwK 4.5	5,20	-0,300	-1,25	-1,57	
45	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
47	LwK 4.5	5,22	-0,280	-1,16	-1,46	
48	LwK 4.5	5,16	-0,340	-1,41	-1,78	
49	LwK 4.4	7,35	1,850	7,69	9,67	(***)
50	LwK 4.5	5,77	0,270	1,12	1,41	
51	LwK 4.4	6,20	0,700	2,91	3,66	
52	LwK 4.5	5,30	-0,200	-0,83	-1,04	
53	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
55	LwK 4.5	5,30	-0,200	-0,83	-1,04	
56	LwK 4.5	5,47	-0,030	-0,12	-0,16	
57	LwK 4.5	5,50	0,000	0,00	0,00	
58	LwK 4.4	6,70	1,200	4,99	6,27	(***)
59	LwK 4.7	6,10	0,600	2,49	3,13	
60	LwK 4.4	7,95	2,450	10,18	12,80	(***)
61	LwK 4.5	5,30	-0,200	-0,83	-1,04	
62	LwK 4.4	7,70	2,200	9,14	11,49	(***)
65	LwK 4.4	5,90	0,400	1,66	2,09	
70	LwK 4.5	5,54	0,040	0,17	0,21	
74	LwK 4.4	8,55	3,050	12,67	15,94	(*)
75	LwK 4.4	8,60	3,100	12,88	16,20	(*)
78	LwK 4.4	6,60	1,100	4,57	5,75	(***)
80	LwK 4.4	7,50	2,000	8,31	10,45	(***)
82	LwK 4.5	7,23	1,730	7,19	9,04	(**)
83	LwK 4.3	6,52	1,020	4,24	5,33	(***)

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

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

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse (verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
85	LwK 4.4	7,25	1,750	7,27	9,14	(***)
86	LwK 4.4	8,80	3,300	13,71	17,24	(*)
97	LwK 4.7	5,19	-0,310	-1,29	-1,62	
100	LwK 4.7	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
106	LwK 4.4	5,80	0,300	1,25	1,57	
108	LwK 4.4	6,80	1,300	5,40	6,79	(***)
111	NMR	4,93	-0,574	-2,38	-3,00	
112	NMR	4,48	-1,020	-4,24	-5,33	(***)
113	NMR	5,19	-0,307	-1,28	-1,60	
114	NMR	5,22	-0,285	-1,18	-1,49	
115	NMR	5,80	0,300	1,25	1,57	
116	NMR	5,27	-0,234	-0,97	-1,23	
121	LwK 4.5	5,60	0,100	0,42	0,52	
122	LwK 4.7	6,00	0,500	2,08	2,61	
123	LwK 4.7	5,86	0,360	1,50	1,88	
124	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
125	LwK 4.7	6,50	1,000	4,15	5,22	(**)
126	LwK 4.7	5,89	0,390	1,62	2,04	
127	LwK 4.7	6,30	0,800	3,32	4,18	
128	LwK 4.5	5,56	0,060	0,25	0,31	
129	LwK 4.5	5,42	-0,080	-0,33	-0,42	
130	LwK 4.4	7,60	2,100	8,72	10,97	(***)
131	LwK 4.4	8,30	2,800	11,63	14,63	(*)
132	LwK 4.7	5,90	0,400	1,66	2,09	
133	LwK 4.5	5,60	0,100	0,42	0,52	
134	LwK 4.4	6,70	1,200	4,99	6,27	(***)
135	LwK 4.4	6,20	0,700	2,91	3,66	
136	LwK 4.4	7,10	1,600	6,65	8,36	(***)
137	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
138	LwK 4.7	6,10	0,600	2,49	3,13	
139	LwK 4.5	5,08	-0,420	-1,74	-2,19	
140	LwK 4.5	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
141	LwK 4.5	5,60	0,100	0,42	0,52	
142	LwK 4.5	5,42	-0,080	-0,33	-0,42	
143	LwK 4.7	5,92	0,420	1,74	2,19	
144	LwK 4.6	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
145	LwK 4.4	6,80	1,300	5,40	6,79	(***)
146	LwK 4.7	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	
147	LwK 4.7	5,80	0,300	1,25	1,57	
148	LwK 4.5	5,43	-0,070	-0,29	-0,37	
149	LwK 4.4	8,00	2,500	10,39	13,06	(***)
150	LwK 4.5	5,30	-0,200	-0,83	-1,04	
151	LwK 4.5	5,80	0,300	1,25	1,57	
152	LwK 4.3	6,10	0,600	2,49	3,13	
153	LwK 4.7	5,48	-0,020	-0,08	-0,10	
154	LwK 4.1	7,00	1,500	6,23	7,84	(***)
155	LwK 4.4	5,40	-0,100	-0,42	-0,52	

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

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

(***) Der Messwert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

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	5,29	-0,210	-0,87	-0,36	
205	LwK 4.8	4,90	-0,600	-2,49	-1,03	
206	LwK 4.8	4,99	-0,510	-2,12	-0,87	
207	LwK 4.8	6,90	1,400	5,82	2,40	
208	LwK 4.8	6,05	0,550	2,28	0,94	
209	LwK 4.8	5,05	-0,450	-1,87	-0,77	
210	LwK 4.8	5,90	0,400	1,66	0,68	
211	LwK 4.8	7,85	2,350	9,76	4,02	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	LwK 4.8	6,99	1,490	6,19	2,55	
214	LwK 4.8	6,50	1,000	4,15	1,71	
215	LwK 4.8	5,26	-0,240	-1,00	-0,41	
216	LwK 4.8	5,78	0,280	1,16	0,48	
217	LwK 4.8	5,35	-0,150	-0,62	-0,26	
219	LwK 4.8	7,40	1,900	7,89	3,25	
220	LwK 4.8	7,68	2,180	9,06	3,73	
222	LwK 4.8	5,55	0,050	0,21	0,09	
223	LwK 4.8	8,10	2,600	10,80	4,45	
224	LwK 4.8	7,19	1,690	7,02	2,89	
225	LwK 4.8	6,66	1,160	4,82	1,99	
226	LwK 4.8	6,50	1,000	4,15	1,71	
227	LwK 4.8	7,35	1,850	7,69	3,17	
228	LwK 4.8	7,42	1,920	7,98	3,29	
229	LwK 4.8	6,77	1,270	5,28	2,17	
231	LwK 4.8	10,30	4,800	19,94	8,22	(*)
232	LwK 4.8	5,51	0,010	0,04	0,02	
234	LwK 4.8	6,86	1,360	5,65	2,33	
235	LwK 4.8	5,90	0,400	1,66	0,68	
236	LwK 4.8	6,30	0,800	3,32	1,37	
237	LwK 4.8	6,75	1,250	5,19	2,14	
240	LwK 4.8	7,35	1,850	7,69	3,17	
241	LwK 4.8	4,50	-1,000	-4,15	-1,71	
242	LwK 4.8	7,30	1,800	7,48	3,08	
243	LwK 4.8	6,50	1,000	4,15	1,71	
244	LwK 4.8	6,55	1,050	4,36	1,80	
245	LwK 4.8	7,85	2,350	9,76	4,02	
246	LwK 4.8	5,40	-0,100	-0,42	-0,17	
247	LwK 4.8	6,83	1,330	5,53	2,28	
248	LwK 4.8	6,39	0,890	3,70	1,52	
249	LwK 4.8	7,20	1,700	7,06	2,91	
250	LwK 4.8	6,18	0,680	2,82	1,16	
251	LwK 4.8	4,61	-0,890	-3,70	-1,52	
252	LwK 4.8	5,79	0,290	1,20	0,50	
254	LwK 4.8	7,60	2,100	8,72	3,60	
255	LwK 4.8	6,80	1,300	5,40	2,23	
256	LwK 4.8	5,90	0,400	1,66	0,68	
257	LwK 4.8	6,79	1,290	5,36	2,21	
258	LwK 4.8	7,37	1,870	7,77	3,20	
259	LwK 4.8	7,30	1,800	7,48	3,08	
260	LwK 4.8	7,30	1,800	7,48	3,08	
261	LwK 4.8	5,30	-0,200	-0,83	-0,34	
262	LwK 4.8	7,00	1,500	6,23	2,57	
263	LwK 4.8	6,52	1,020	4,24	1,75	
264	LwK 4.8	4,20	-1,300	-5,40	-2,23	
265	LwK 4.8	7,90	2,400	9,97	4,11	
266	LwK 4.8	4,77	-0,730	-3,03	-1,25	
267	LwK 4.8	5,70	0,200	0,83	0,34	
268	LwK 4.8	6,96	1,460	6,07	2,50	
269	LwK 4.8	6,30	0,800	3,32	1,37	
270	LwK 4.8	8,90	3,400	14,12	5,82	(*)
271	LwK 4.8	6,51	1,010	4,20	1,73	
272	LwK 4.8	6,40	0,900	3,74	1,54	
273	LwK 4.8	6,51	1,010	4,20	1,73	
275	LwK 4.8	7,06	1,560	6,48	2,67	
276	LwK 4.8	7,00	1,500	6,23	2,57	
277	LwK 4.8	6,54	1,040	4,32	1,78	
279	LwK 4.8	4,10	-1,400	-5,82	-2,40	
280	LwK 4.8	7,41	1,910	7,93	3,27	
281	LwK 4.8	6,20	0,700	2,91	1,20	
282	LwK 4.8	5,20	-0,300	-1,25	-0,51	
283	LwK 4.8	6,20	0,700	2,91	1,20	
284	LwK 4.8	6,20	0,700	2,91	1,20	
285	LwK 4.8	9,19	3,690	15,33	6,32	(*)
320	LwK 4.8	6,66	1,160	4,82	1,99	
337	LwK 4.8	6,74	1,240	5,15	2,12	
365	LwK 4.8	8,50	3,000	12,46	5,14	(*)

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
19	LwK 4.4	7,10	0,050	0,17	0,21	
23	LwK 4.4	7,50	0,450	1,51	1,93	
24	LwK 4.4	7,20	0,150	0,50	0,64	
27	LwK 4.4	7,20	0,150	0,50	0,64	
28	LwK 4.4	7,40	0,350	1,18	1,50	
32	LwK 4.4	5,50	-1,550	-5,21	-6,65	(**)
33	LwK 4.4	6,40	-0,650	-2,19	-2,79	
37	LwK 4.3	4,50	-2,550	-8,58	-10,93	(**)
43	LwK 4.4	6,40	-0,650	-2,19	-2,79	
49	LwK 4.4	7,35	0,300	1,01	1,29	
51	LwK 4.4	6,20	-0,850	-2,86	-3,64	
58	LwK 4.4	6,70	-0,350	-1,18	-1,50	
60	LwK 4.4	7,95	0,900	3,03	3,86	
62	LwK 4.4	7,70	0,650	2,19	2,79	
65	LwK 4.4	5,90	-1,150	-3,87	-4,93	
74	LwK 4.4	8,55	1,500	5,05	6,43	(**)
75	LwK 4.4	8,60	1,550	5,21	6,65	(**)
78	LwK 4.4	6,60	-0,450	-1,51	-1,93	
80	LwK 4.4	7,50	0,450	1,51	1,93	
83	LwK 4.3	6,52	-0,530	-1,78	-2,27	
85	LwK 4.4	7,25	0,200	0,67	0,86	
86	LwK 4.4	8,80	1,750	5,89	7,50	(**)
106	LwK 4.4	5,80	-1,250	-4,21	-5,36	(**)
108	LwK 4.4	6,80	-0,250	-0,84	-1,07	
130	LwK 4.4	7,60	0,550	1,85	2,36	
131	LwK 4.4	8,30	1,250	4,21	5,36	(**)
134	LwK 4.4	6,70	-0,350	-1,18	-1,50	
135	LwK 4.4	6,20	-0,850	-2,86	-3,64	
136	LwK 4.4	7,10	0,050	0,17	0,21	
144	LwK 4.6	5,40	-1,650	-5,55	-7,07	(**)
145	LwK 4.4	6,80	-0,250	-0,84	-1,07	
149	LwK 4.4	8,00	0,950	3,20	4,07	
152	LwK 4.3	6,10	-0,950	-3,20	-4,07	
154	LwK 4.1	7,00	-0,050	-0,17	-0,21	
155	LwK 4.4	5,40	-1,650	-5,55	-7,07	(**)

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

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	5,29	-1,710	-5,79	-2,93	
205	LwK 4.8	4,90	-2,100	-7,11	-3,60	
206	LwK 4.8	4,99	-2,010	-6,80	-3,44	
207	LwK 4.8	6,90	-0,100	-0,34	-0,17	
208	LwK 4.8	6,05	-0,950	-3,22	-1,63	
209	LwK 4.8	5,05	-1,950	-6,60	-3,34	
210	LwK 4.8	5,90	-1,100	-3,72	-1,88	
211	LwK 4.8	7,85	0,850	2,88	1,46	
212	LwK 4.8	6,99	-0,010	-0,03	-0,02	
214	LwK 4.8	6,50	-0,500	-1,69	-0,86	
215	LwK 4.8	5,26	-1,740	-5,89	-2,98	
216	LwK 4.8	5,78	-1,220	-4,13	-2,09	
217	LwK 4.8	5,35	-1,650	-5,58	-2,83	
219	LwK 4.8	7,40	0,400	1,35	0,68	
220	LwK 4.8	7,68	0,680	2,30	1,16	
222	LwK 4.8	5,55	-1,450	-4,91	-2,48	
223	LwK 4.8	8,10	1,100	3,72	1,88	
224	LwK 4.8	7,19	0,190	0,64	0,33	
225	LwK 4.8	6,66	-0,340	-1,15	-0,58	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	LwK 4.8	6,50	-0,500	-1,69	-0,86	
227	LwK 4.8	7,35	0,350	1,18	0,60	
228	LwK 4.8	7,42	0,420	1,42	0,72	
229	LwK 4.8	6,77	-0,230	-0,78	-0,39	
231	LwK 4.8	10,30	3,300	11,17	5,65	(***)
232	LwK 4.8	5,51	-1,490	-5,04	-2,55	
234	LwK 4.8	6,86	-0,140	-0,47	-0,24	
235	LwK 4.8	5,90	-1,100	-3,72	-1,88	
236	LwK 4.8	6,30	-0,700	-2,37	-1,20	
237	LwK 4.8	6,75	-0,250	-0,85	-0,43	
240	LwK 4.8	7,35	0,350	1,18	0,60	
241	LwK 4.8	4,50	-2,500	-8,46	-4,28	
242	LwK 4.8	7,30	0,300	1,02	0,51	
243	LwK 4.8	6,50	-0,500	-1,69	-0,86	
244	LwK 4.8	6,55	-0,450	-1,52	-0,77	
245	LwK 4.8	7,85	0,850	2,88	1,46	
246	LwK 4.8	5,40	-1,600	-5,42	-2,74	
247	LwK 4.8	6,83	-0,170	-0,58	-0,29	
248	LwK 4.8	6,39	-0,610	-2,06	-1,04	
249	LwK 4.8	7,20	0,200	0,68	0,34	
250	LwK 4.8	6,18	-0,820	-2,78	-1,40	
251	LwK 4.8	4,61	-2,390	-8,09	-4,09	
252	LwK 4.8	5,79	-1,210	-4,10	-2,07	
254	LwK 4.8	7,60	0,600	2,03	1,03	
255	LwK 4.8	6,80	-0,200	-0,68	-0,34	
256	LwK 4.8	5,90	-1,100	-3,72	-1,88	
257	LwK 4.8	6,79	-0,210	-0,71	-0,36	
258	LwK 4.8	7,37	0,370	1,25	0,63	
259	LwK 4.8	7,30	0,300	1,02	0,51	
260	LwK 4.8	7,30	0,300	1,02	0,51	
261	LwK 4.8	5,30	-1,700	-5,75	-2,91	
262	LwK 4.8	7,00	0,000	0,00	0,00	
263	LwK 4.8	6,52	-0,480	-1,62	-0,82	
264	LwK 4.8	4,20	-2,800	-9,48	-4,79	
265	LwK 4.8	7,90	0,900	3,05	1,54	
266	LwK 4.8	4,77	-2,230	-7,55	-3,82	
267	LwK 4.8	5,70	-1,300	-4,40	-2,23	
268	LwK 4.8	6,96	-0,040	-0,14	-0,07	
269	LwK 4.8	6,30	-0,700	-2,37	-1,20	
270	LwK 4.8	8,90	1,900	6,43	3,25	
271	LwK 4.8	6,51	-0,490	-1,66	-0,84	
272	LwK 4.8	6,40	-0,600	-2,03	-1,03	
273	LwK 4.8	6,51	-0,490	-1,66	-0,84	
275	LwK 4.8	7,06	0,060	0,20	0,10	
277	LwK 4.8	6,54	-0,460	-1,56	-0,79	
279	LwK 4.8	4,10	-2,900	-9,82	-4,97	
280	LwK 4.8	7,41	0,410	1,39	0,70	
281	LwK 4.8	6,20	-0,800	-2,71	-1,37	
282	LwK 4.8	5,20	-1,800	-6,09	-3,08	
283	LwK 4.8	6,20	-0,800	-2,71	-1,37	
284	LwK 4.8	6,20	-0,800	-2,71	-1,37	
285	LwK 4.8	9,19	2,190	7,41	3,75	
320	LwK 4.8	6,66	-0,340	-1,15	-0,58	
337	LwK 4.8	6,74	-0,260	-0,88	-0,45	
365	LwK 4.8	8,50	1,500	5,08	2,57	

Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom reduktometrischen Median ab.

6.8.5 FTIR-Laborergebnisse 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	6,61	1,110	4,61	1,90	
202	LwK 4.8	5,29	-0,210	-0,87	-0,36	
203	LwK 4.8	5,29	-0,210	-0,87	-0,36	
204	LwK 4.8	5,35	-0,150	-0,62	-0,26	
205	LwK 4.8	4,89	-0,610	-2,53	-1,04	
207	LwK 4.8	6,80	1,300	5,40	2,23	
208	LwK 4.8	6,05	0,550	2,28	0,94	
209	LwK 4.8	5,05	-0,450	-1,87	-0,77	
210	LwK 4.8	5,70	0,200	0,83	0,34	
211	LwK 4.8	6,71	1,210	5,03	2,07	
212	LwK 4.8	6,18	0,680	2,82	1,16	
214	LwK 4.8	6,20	0,700	2,91	1,20	
215	LwK 4.8	5,60	0,100	0,42	0,17	
216	LwK 4.8	6,16	0,660	2,74	1,13	
217	LwK 4.8	6,28	0,780	3,24	1,34	
218	LwK 4.8	5,96	0,460	1,91	0,79	
219	LwK 4.8	7,40	1,900	7,89	3,25	
220	LwK 4.8	5,52	0,020	0,08	0,03	
221	LwK 4.8	6,98	1,480	6,15	2,53	
222	LwK 4.8	6,60	1,100	4,57	1,88	
223	LwK 4.8	7,20	1,700	7,06	2,91	
224	LwK 4.8	5,41	-0,090	-0,37	-0,15	
225	LwK 4.8	6,66	1,160	4,82	1,99	
226	LwK 4.8	5,00	-0,500	-2,08	-0,86	
227	LwK 4.8	5,87	0,370	1,54	0,63	
228	LwK 4.8	5,10	-0,400	-1,66	-0,68	
229	LwK 4.8	6,18	0,680	2,82	1,16	
231	LwK 4.8	6,90	1,400	5,82	2,40	
232	LwK 4.8	5,51	0,010	0,04	0,02	
234	LwK 4.8	6,45	0,950	3,95	1,63	
235	LwK 4.8	5,90	0,400	1,66	0,68	
236	LwK 4.8	6,50	1,000	4,15	1,71	
237	LwK 4.8	7,88	2,380	9,89	4,08	
240	LwK 4.8	5,89	0,390	1,62	0,67	
241	LwK 4.8	4,54	-0,960	-3,99	-1,64	
242	LwK 4.8	5,70	0,200	0,83	0,34	
243	LwK 4.8	6,90	1,400	5,82	2,40	
244	LwK 4.8	4,95	-0,550	-2,28	-0,94	
245	LwK 4.8	5,19	-0,310	-1,29	-0,53	
246	LwK 4.8	5,40	-0,100	-0,42	-0,17	
247	LwK 4.8	6,78	1,280	5,32	2,19	
249	LwK 4.8	8,20	2,700	11,22	4,62	
250	LwK 4.8	6,23	0,730	3,03	1,25	
251	LwK 4.8	4,61	-0,890	-3,70	-1,52	
252	LwK 4.8	5,79	0,290	1,20	0,50	
254	LwK 4.8	6,10	0,600	2,49	1,03	
256	LwK 4.8	7,70	2,200	9,14	3,77	
257	LwK 4.8	5,13	-0,370	-1,54	-0,63	
258	LwK 4.8	7,15	1,650	6,85	2,83	
259	LwK 4.8	5,80	0,300	1,25	0,51	
260	LwK 4.8	6,10	0,600	2,49	1,03	
261	LwK 4.8	6,70	1,200	4,99	2,05	
262	LwK 4.8	7,10	1,600	6,65	2,74	
263	LwK 4.8	4,91	-0,590	-2,45	-1,01	
264	LwK 4.8	4,20	-1,300	-5,40	-2,23	
265	LwK 4.8	7,10	1,600	6,65	2,74	
266	LwK 4.8	4,77	-0,730	-3,03	-1,25	
267	LwK 4.8	5,60	0,100	0,42	0,17	
268	LwK 4.8	6,14	0,640	2,66	1,10	
269	LwK 4.8	6,50	1,000	4,15	1,71	
271	LwK 4.8	6,24	0,740	3,07	1,27	
272	LwK 4.8	6,11	0,610	2,53	1,04	
273	LwK 4.8	6,65	1,150	4,78	1,97	
275	LwK 4.8	6,21	0,710	2,95	1,22	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	LwK 4.8	6,54	1,040	4,32	1,78	
278	LwK 4.8	6,86	1,360	5,65	2,33	
279	LwK 4.8	4,60	-0,900	-3,74	-1,54	
280	LwK 4.8	6,45	0,950	3,95	1,63	
281	LwK 4.8	5,20	-0,300	-1,25	-0,51	
282	LwK 4.8	5,30	-0,200	-0,83	-0,34	
284	LwK 4.8	8,80	3,300	13,71	5,65	(*)
285	LwK 4.8	9,59	4,090	16,99	7,00	(*)
287	LwK 4.8	5,26	-0,240	-1,00	-0,41	
288	LwK 4.8	5,70	0,200	0,83	0,34	
311	LwK 4.8	5,09	-0,410	-1,70	-0,70	
320	LwK 4.8	5,38	-0,120	-0,50	-0,21	
337	LwK 4.8	5,74	0,240	1,00	0,41	
365	LwK 4.8	6,90	1,400	5,82	2,40	

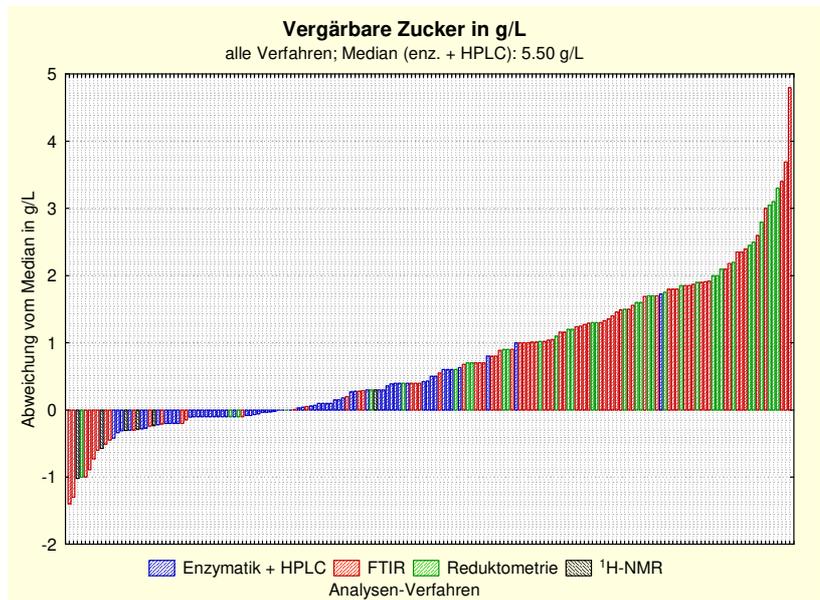
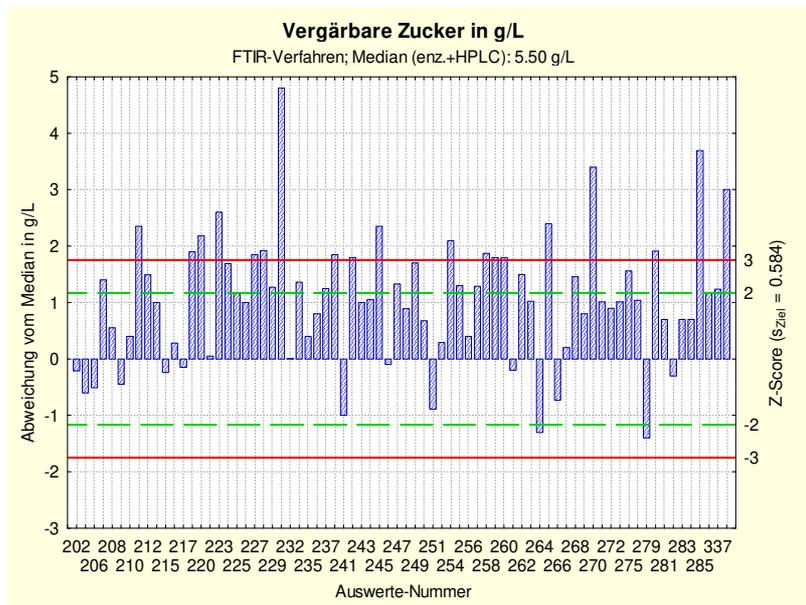
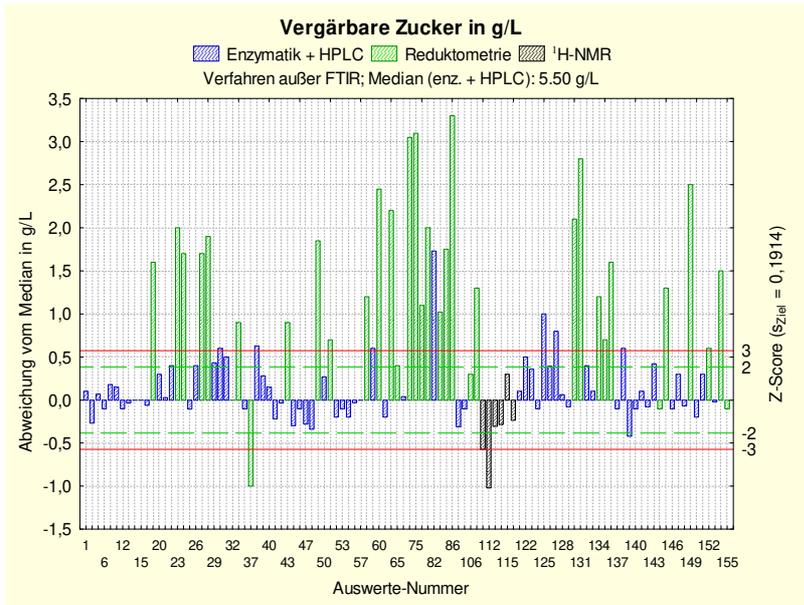
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der enzymatischen und HPLC-Werte ab.

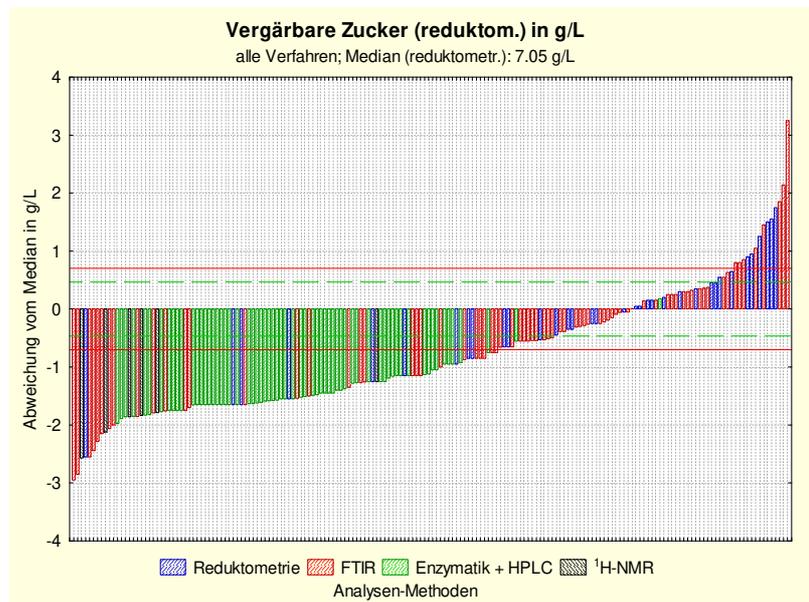
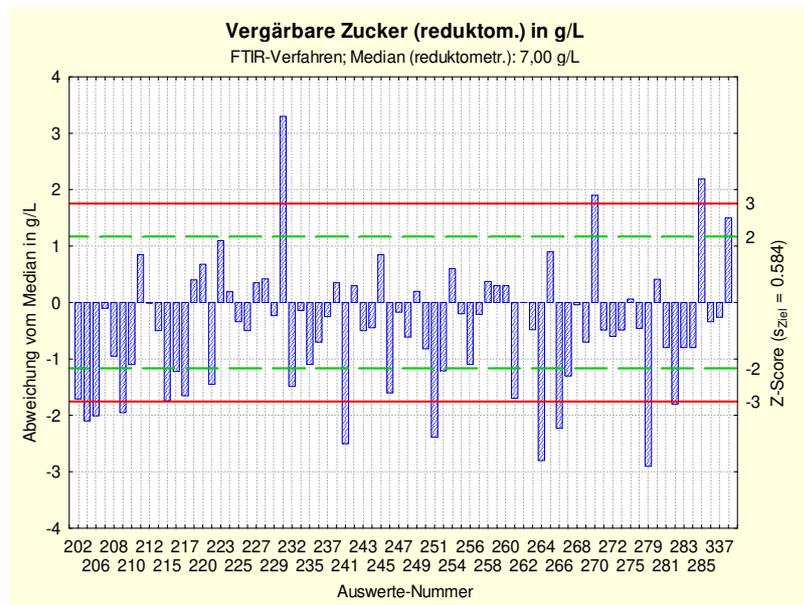
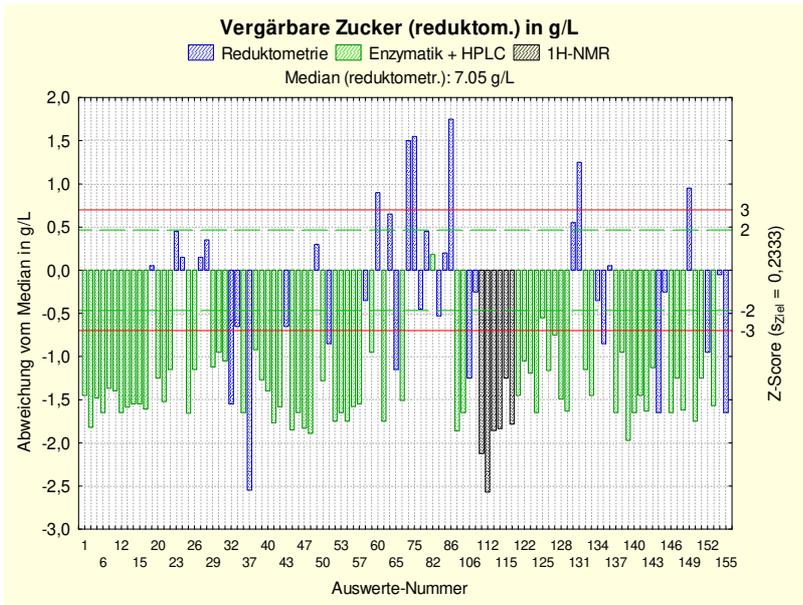
6.8.6 Deskriptive Ergebnisse

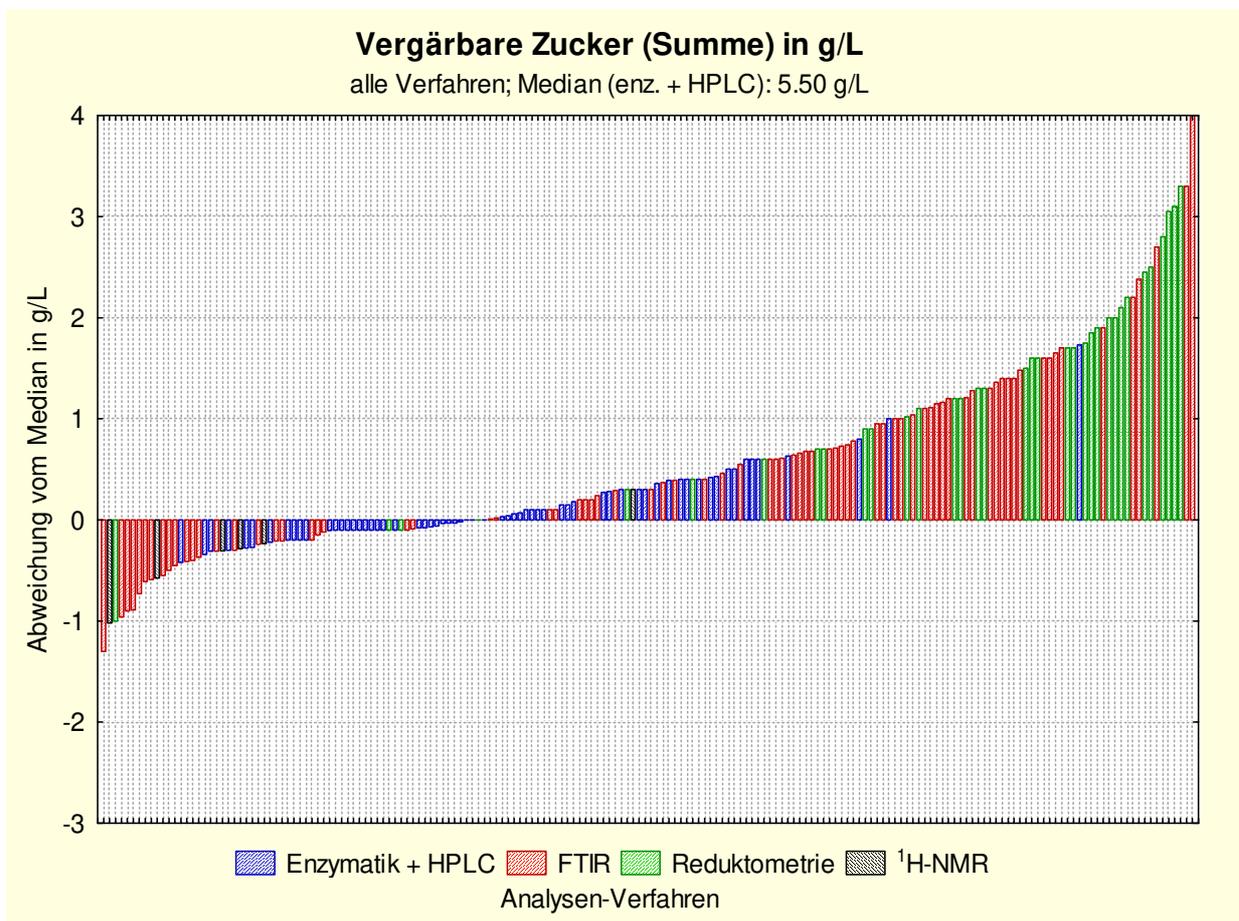
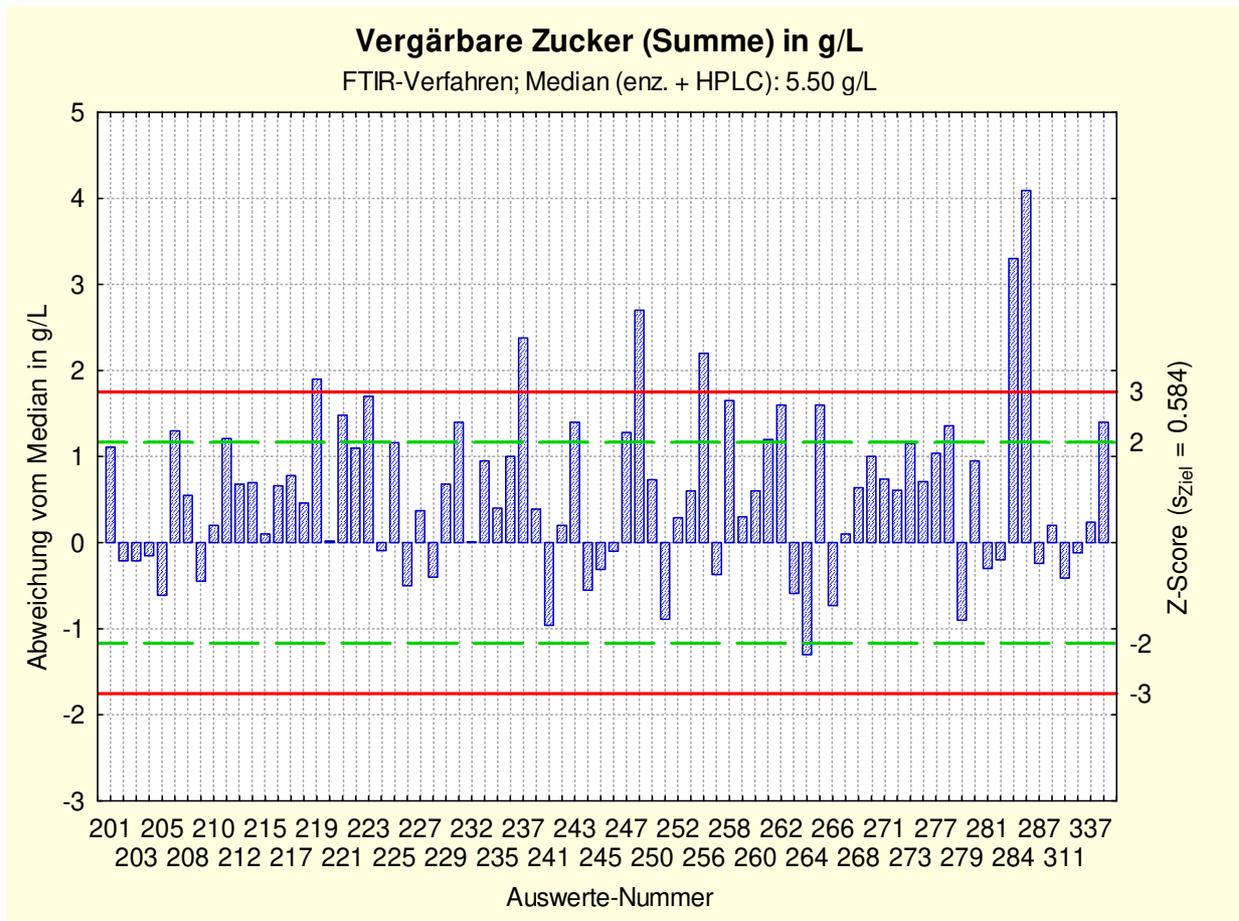
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch		reduktometrisch	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	65	63	35	26
Minimalwert	5,08	5,08	4,50	5,90
Mittelwert	5,621	5,581	6,915	6,968
Median	5,500	5,500	7,000	7,050
Maximalwert	7,23	6,30	8,80	8,00
Standardabweichung (s _L)	0,360	0,280	0,986	0,578
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,045	0,035	0,167	0,113
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,241	0,241	0,295	0,297
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,191	0,191	0,232	0,233
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,584	0,584	0,584	0,584
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,50	1,16	3,34	1,94
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,88	1,46	4,25	2,48
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,62	0,48	1,69	0,99
Quotient (u _M /s _H)	0,19	0,15	0,56	0,38
Quotient (u _M / s _{exp herk.})	0,23	0,18	0,72	0,49
Quotient (u _M / s _{Ü FTIR})	0,08	0,06	0,29	0,19

6.8.7 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	7,000	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	3	5,790	1,049
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	30	7,089	0,948
LwK 4.6	Neocuproinmethode	1	5,400	
	reduktometrische Verfahren	35	6,924	1,020
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	42	5,463	0,190
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	23	5,806	0,313
	Enzymatik und HPLC	65	5,587	0,304
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis "wie mitgeteilt")	74	6,506	1,060
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis Summe FTIR-Glucose + FTIR-Fructose	69	6,052	0,920
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,151	0,454







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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,54	0,114	0,95	1,05	
02	enzymat., autom.	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
03	enzymat., autom.	2,44	0,014	0,12	0,13	
04	enzymat., autom.	2,53	0,104	0,87	0,96	
05	enzymat., autom.	2,51	0,084	0,70	0,77	
09	HPLC	2,72	0,294	2,45	2,71	
10	enzymat., autom.	2,34	-0,086	-0,72	-0,79	
11	HPLC	2,35	-0,076	-0,63	-0,70	
12	enzymat., autom.	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
13	HPLC	2,16	-0,265	-2,21	-2,45	
14	enzymat., autom.	2,43	0,004	0,03	0,04	
15	enzymat., autom.	2,50	0,074	0,62	0,68	
18	enzymat., autom.	2,45	0,024	0,20	0,22	
20	HPLC	2,36	-0,066	-0,55	-0,61	
21	HPLC	2,22	-0,206	-1,72	-1,90	
22	HPLC	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
25	enzymat., autom.	2,43	0,004	0,03	0,04	
26	HPLC	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
29	enzymat., autom.	2,37	-0,056	-0,47	-0,52	
30	HPLC	2,43	0,004	0,03	0,04	
31	enzymat., autom.	2,42	-0,002	-0,02	-0,02	
35	enzymat., autom.	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
38	enzymat., autom.	2,52	0,094	0,78	0,87	
39	HPLC	2,36	-0,066	-0,55	-0,61	
40	enzymat., autom.	2,47	0,042	0,35	0,39	
41	enzymat., autom.	2,32	-0,106	-0,88	-0,98	
42	enzymat., autom.	2,43	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	2,35	-0,076	-0,63	-0,70	
45	enzymat., autom.	2,50	0,074	0,62	0,68	
47	enzymat., autom.	2,36	-0,066	-0,55	-0,61	
48	enzymat., autom.	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
50	enzymat., autom.	2,67	0,244	2,03	2,25	
52	enzymat., autom.	2,44	0,014	0,12	0,13	
53	enzymat., autom.	2,44	0,014	0,12	0,13	
56	enzymat., autom.	2,44	0,014	0,12	0,13	
57	enzymat., autom.	2,35	-0,076	-0,63	-0,70	
58	enzymat., autom.	2,41	-0,016	-0,13	-0,15	
59	HPLC	2,70	0,274	2,28	2,53	
61	HPLC	2,30	-0,126	-1,05	-1,16	
70	enzymat., autom.	2,52	0,094	0,78	0,87	
82	enzymat. Hand	3,56	1,134	9,44	10,46	(**)
89	HPLC	2,57	0,144	1,20	1,33	
97	HPLC	2,09	-0,336	-2,80	-3,10	
111	NMR	2,21	-0,214	-1,78	-1,97	
112	NMR	2,32	-0,105	-0,87	-0,97	
113	NMR	2,34	-0,083	-0,69	-0,77	
114	NMR	2,41	-0,018	-0,15	-0,16	
115	NMR	2,39	-0,036	-0,30	-0,33	
116	NMR	2,34	-0,087	-0,72	-0,80	
121	enzymat., autom.	2,55	0,124	1,03	1,14	
122	HPLC	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
126	HPLC	2,41	-0,016	-0,13	-0,15	
127	HPLC	2,60	0,174	1,45	1,61	
128	enzymat., autom.	2,49	0,064	0,53	0,59	
129	enzymat., autom.	2,49	0,064	0,53	0,59	
132	HPLC	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
138	HPLC	2,60	0,174	1,45	1,61	
139	enzymat., autom.	2,31	-0,116	-0,97	-1,07	
140	enzymat., autom.	2,38	-0,046	-0,38	-0,42	
141	enzymat., autom.	2,50	0,074	0,62	0,68	
142	enzymat., autom.	2,46	0,034	0,28	0,31	
143	HPLC	2,45	0,024	0,20	0,22	
147	HPLC	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
148	enzymat., autom.	2,49	0,064	0,53	0,59	
150	enzymat., autom.	2,40	-0,026	-0,22	-0,24	
153	HPLC	2,16	-0,266	-2,21	-2,45	

6.9.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,15	0,722	6,01	1,77	
202	FTIR	2,48	0,052	0,43	0,13	
203	FTIR	2,30	-0,128	-1,07	-0,31	
204	FTIR	2,50	0,072	0,60	0,18	
205	FTIR	2,09	-0,338	-2,81	-0,83	
207	FTIR	3,60	1,172	9,75	2,87	
208	FTIR	2,31	-0,118	-0,98	-0,29	
209	FTIR	1,90	-0,528	-4,39	-1,29	
210	FTIR	2,20	-0,228	-1,90	-0,56	
211	FTIR	3,33	0,902	7,51	2,21	
212	FTIR	2,69	0,262	2,18	0,64	
214	FTIR	3,20	0,772	6,42	1,89	
215	FTIR	2,50	0,072	0,60	0,18	
216	FTIR	2,77	0,342	2,85	0,84	
217	FTIR	2,89	0,462	3,84	1,13	
218	FTIR	2,39	-0,038	-0,32	-0,09	
219	FTIR	3,50	1,072	8,92	2,63	
220	FTIR	2,32	-0,108	-0,90	-0,26	
221	FTIR	2,35	-0,078	-0,65	-0,19	
222	FTIR	2,30	-0,128	-1,07	-0,31	
223	FTIR	3,10	0,672	5,59	1,65	
224	FTIR	2,16	-0,268	-2,23	-0,66	
225	FTIR	3,38	0,952	7,92	2,33	
226	FTIR	2,30	-0,128	-1,07	-0,31	
227	FTIR	3,32	0,892	7,42	2,19	
228	FTIR	2,28	-0,148	-1,23	-0,36	
229	FTIR	2,71	0,282	2,35	0,69	
231	FTIR	3,30	0,872	7,26	2,14	
232	FTIR	2,10	-0,328	-2,73	-0,80	
234	FTIR	3,15	0,722	6,01	1,77	
235	FTIR	3,00	0,572	4,76	1,40	
236	FTIR	3,40	0,972	8,09	2,38	
237	FTIR	4,98	2,552	21,23	6,25	(*)
240	FTIR	2,91	0,482	4,01	1,18	
241	FTIR	1,43	-0,998	-8,30	-2,45	
242	FTIR	2,00	-0,428	-3,56	-1,05	
243	FTIR	3,00	0,572	4,76	1,40	
244	FTIR	1,70	-0,728	-6,06	-1,78	
245	FTIR	1,99	-0,438	-3,64	-1,07	
246	FTIR	2,20	-0,228	-1,90	-0,56	
247	FTIR	3,20	0,772	6,42	1,89	
249	FTIR	3,80	1,372	11,42	3,36	
250	FTIR	3,09	0,662	5,51	1,62	
251	FTIR	1,56	-0,868	-7,22	-2,13	
252	FTIR	2,52	0,092	0,77	0,23	
254	FTIR	3,40	0,972	8,09	2,38	
256	FTIR	2,50	0,072	0,60	0,18	
257	FTIR	2,24	-0,188	-1,56	-0,46	
258	FTIR	3,30	0,872	7,26	2,14	
259	FTIR	2,00	-0,428	-3,56	-1,05	
260	FTIR	3,30	0,872	7,26	2,14	
261	FTIR	3,40	0,972	8,09	2,38	
262	FTIR	3,70	1,272	10,58	3,12	
263	FTIR	2,05	-0,378	-3,15	-0,93	
264	FTIR	1,80	-0,628	-5,23	-1,54	
265	FTIR	3,20	0,772	6,42	1,89	
266	FTIR	2,00	-0,428	-3,56	-1,05	
267	FTIR	2,20	-0,228	-1,90	-0,56	
268	FTIR	2,96	0,532	4,43	1,30	
269	FTIR	2,80	0,372	3,10	0,91	
271	FTIR	3,75	1,322	11,00	3,24	
272	FTIR	2,09	-0,338	-2,81	-0,83	
273	FTIR	2,92	0,492	4,09	1,21	
275	FTIR	2,76	0,332	2,76	0,81	
276	FTIR	2,60	0,172	1,43	0,42	
277	FTIR	2,76	0,332	2,76	0,81	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	3,21	0,782	6,51	1,92	
279	FTIR	1,20	-1,228	-10,22	-3,01	
280	FTIR	3,68	1,252	10,42	3,07	
281	FTIR	2,16	-0,268	-2,23	-0,66	
282	FTIR	2,70	0,272	2,26	0,67	
284	FTIR	5,30	2,872	23,90	7,04	(*)
285	FTIR	5,25	2,822	23,48	6,92	(*)
287	FTIR	2,06	-0,368	-3,06	-0,90	
288	FTIR	2,53	0,102	0,85	0,25	
311	FTIR	2,19	-0,238	-1,98	-0,58	
320	FTIR	1,39	-1,038	-8,64	-2,54	
337	FTIR	1,97	-0,458	-3,81	-1,12	
365	FTIR	3,00	0,572	4,76	1,40	

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

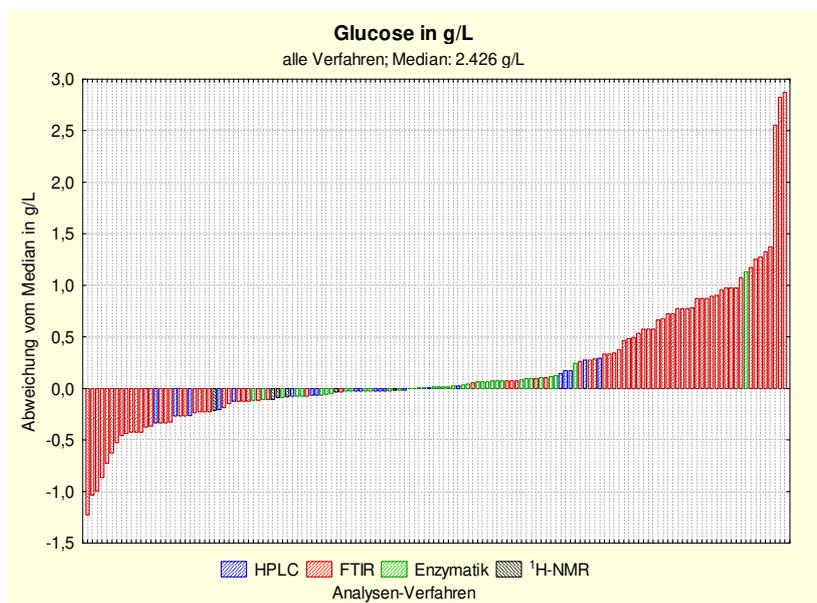
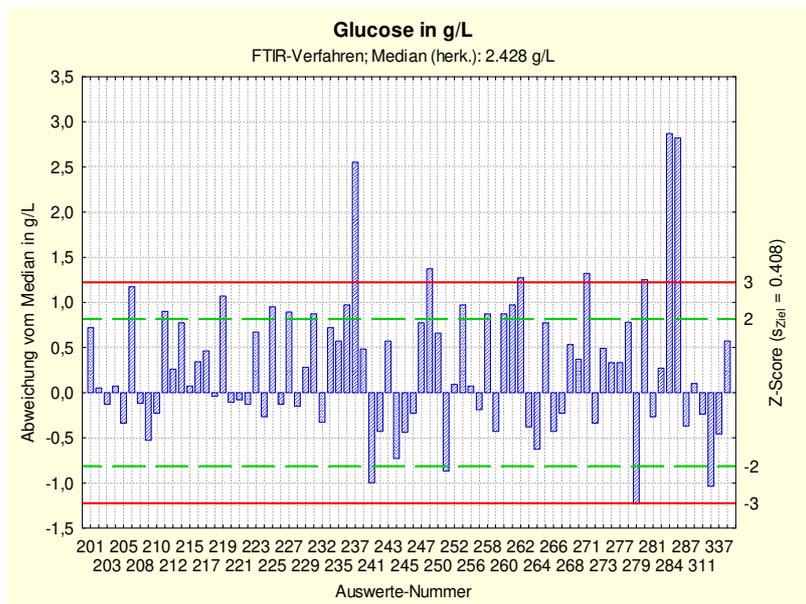
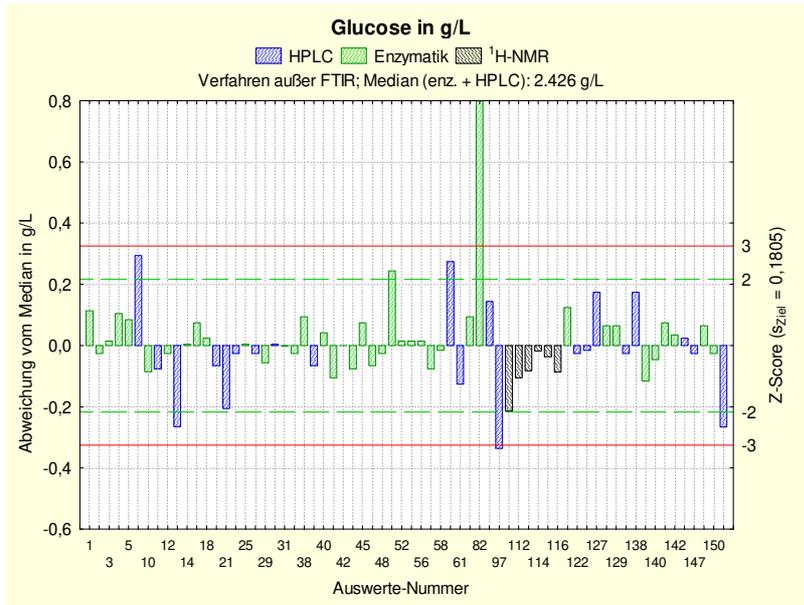
6.9.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	60	59
Minimalwert	2,09	2,09
Mittelwert	2,448	2,429
Median	2,428	2,426
Maximalwert	3,56	2,72
Standardabweichung (s_L)	0,186	0,116
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,024	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,120	0,120
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,108	0,108
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,408	0,408
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,55	0,97
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,72	1,07
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,46	0,28
Quotient (u_M/s_H)	0,20	0,13
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,22	0,14
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,06	0,04

Der im Abschnitt 6.9.1 mit (**) markierte Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie OIV-MA-AS311-03	21	2,402	0,173
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiertes Verfahren OIV-MA-AS311-02	37	2,438	0,071
enzymat. Hand	enzymatisch manuell OIV-MA-AS311-02	2	3,050	0,818
	herkömmliche Verfahren	60	2,434	0,095
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	2,689	0,701
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	6	2,340	0,068



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,06	0,000	0,00	0,00	
02	enzymat., autom.	2,83	-0,230	-1,57	-1,83	
03	enzymat., autom.	3,00	-0,060	-0,41	-0,48	
04	enzymat., autom.	2,95	-0,110	-0,75	-0,88	
05	enzymat., autom.	3,06	0,000	0,00	0,00	
09	HPLC	2,96	-0,100	-0,68	-0,80	
10	enzymat., autom.	2,77	-0,290	-1,98	-2,31	
11	HPLC	3,30	0,240	1,64	1,91	
12	enzymat., autom.	3,00	-0,060	-0,41	-0,48	
13	HPLC	3,30	0,244	1,67	1,94	
14	enzymat., autom.	3,09	0,030	0,21	0,24	
15	enzymat., autom.	3,00	-0,060	-0,41	-0,48	
18	enzymat., autom.	2,99	-0,070	-0,48	-0,56	
20	HPLC	3,44	0,380	2,60	3,03	
21	HPLC	3,31	0,250	1,71	1,99	
22	HPLC	3,50	0,440	3,01	3,51	
25	enzymat., autom.	2,96	-0,095	-0,65	-0,76	
26	HPLC	3,50	0,440	3,01	3,51	
29	enzymat., autom.	3,53	0,470	3,21	3,74	
30	HPLC	3,65	0,590	4,03	4,70	
31	enzymat., autom.	3,55	0,488	3,34	3,89	
35	enzymat., autom.	3,00	-0,060	-0,41	-0,48	
38	enzymat., autom.	3,61	0,550	3,76	4,38	
39	HPLC	3,42	0,360	2,46	2,87	
40	enzymat., autom.	3,18	0,122	0,83	0,97	
41	enzymat., autom.	2,96	-0,100	-0,68	-0,80	
42	enzymat., autom.	3,00	-0,059	-0,40	-0,47	
44	enzymat., autom.	2,91	-0,150	-1,03	-1,20	
45	enzymat., autom.	2,90	-0,160	-1,09	-1,27	
47	enzymat., autom.	2,86	-0,200	-1,37	-1,59	
48	enzymat., autom.	2,75	-0,305	-2,09	-2,43	
50	enzymat., autom.	3,10	0,040	0,27	0,32	
52	enzymat., autom.	2,90	-0,160	-1,09	-1,27	
53	enzymat., autom.	2,96	-0,100	-0,68	-0,80	
56	enzymat., autom.	3,03	-0,030	-0,21	-0,24	
57	enzymat., autom.	3,03	-0,032	-0,22	-0,25	
58	enzymat., autom.	3,10	0,040	0,27	0,32	
59	HPLC	3,38	0,320	2,19	2,55	
61	HPLC	3,30	0,240	1,64	1,91	
70	enzymat., autom.	3,03	-0,030	-0,21	-0,24	
82	enzymat. Hand	3,67	0,610	4,17	4,86	
89	HPLC	3,08	0,020	0,14	0,16	
97	HPLC	3,10	0,040	0,27	0,32	
111	NMR	2,71	-0,346	-2,36	-2,75	
112	NMR	2,78	-0,277	-1,90	-2,21	
113	NMR	2,85	-0,211	-1,44	-1,68	
114	NMR	2,81	-0,253	-1,73	-2,02	
115	NMR	3,41	0,350	2,39	2,79	
116	NMR	2,93	-0,134	-0,91	-1,07	
121	enzymat., autom.	3,05	-0,010	-0,07	-0,08	
122	HPLC	3,60	0,540	3,69	4,30	
126	HPLC	3,48	0,420	2,87	3,35	
127	HPLC	3,70	0,640	4,38	5,10	(**)
128	enzymat., autom.	3,07	0,010	0,07	0,08	
129	enzymat., autom.	2,93	-0,130	-0,89	-1,04	
132	HPLC	3,50	0,440	3,01	3,51	
138	HPLC	3,50	0,440	3,01	3,51	
139	enzymat., autom.	2,77	-0,290	-1,98	-2,31	
140	enzymat., autom.	2,98	-0,080	-0,55	-0,64	
141	enzymat., autom.	3,10	0,040	0,27	0,32	
142	enzymat., autom.	2,96	-0,100	-0,68	-0,80	
143	HPLC	3,47	0,410	2,80	3,27	
147	HPLC	3,40	0,340	2,32	2,71	
148	enzymat., autom.	2,94	-0,120	-0,82	-0,96	
150	enzymat., autom.	2,85	-0,210	-1,44	-1,67	
153	HPLC	3,32	0,260	1,78	2,07	

6.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,46	0,395	2,70	1,20	
202	FTIR	2,81	-0,255	-1,74	-0,77	
203	FTIR	2,99	-0,075	-0,51	-0,23	
204	FTIR	2,85	-0,215	-1,47	-0,65	
205	FTIR	2,80	-0,265	-1,81	-0,80	
207	FTIR	3,20	0,135	0,92	0,41	
208	FTIR	3,74	0,675	4,61	2,05	
209	FTIR	3,15	0,085	0,58	0,26	
210	FTIR	3,50	0,435	2,97	1,32	
211	FTIR	3,38	0,315	2,15	0,95	
212	FTIR	3,49	0,425	2,90	1,29	
214	FTIR	3,00	-0,065	-0,44	-0,20	
215	FTIR	3,10	0,035	0,24	0,11	
216	FTIR	3,39	0,325	2,22	0,98	
217	FTIR	3,39	0,325	2,22	0,98	
218	FTIR	3,57	0,505	3,45	1,53	
219	FTIR	3,90	0,835	5,70	2,53	
220	FTIR	3,20	0,135	0,92	0,41	
221	FTIR	4,63	1,565	10,68	4,74	
222	FTIR	4,30	1,235	8,43	3,74	
223	FTIR	4,10	1,035	7,07	3,14	
224	FTIR	3,25	0,185	1,26	0,56	
225	FTIR	3,28	0,215	1,47	0,65	
226	FTIR	2,70	-0,365	-2,49	-1,11	
227	FTIR	2,55	-0,515	-3,52	-1,56	
228	FTIR	2,82	-0,245	-1,67	-0,74	
229	FTIR	3,47	0,405	2,76	1,23	
231	FTIR	3,60	0,535	3,65	1,62	
232	FTIR	3,41	0,345	2,36	1,05	
234	FTIR	3,30	0,235	1,60	0,71	
235	FTIR	2,90	-0,165	-1,13	-0,50	
236	FTIR	3,10	0,035	0,24	0,11	
237	FTIR	2,90	-0,165	-1,13	-0,50	
240	FTIR	2,98	-0,085	-0,58	-0,26	
241	FTIR	3,11	0,045	0,31	0,14	
242	FTIR	3,70	0,635	4,33	1,92	
243	FTIR	3,90	0,835	5,70	2,53	
244	FTIR	3,25	0,185	1,26	0,56	
245	FTIR	3,20	0,135	0,92	0,41	
246	FTIR	3,20	0,135	0,92	0,41	
247	FTIR	3,58	0,515	3,52	1,56	
249	FTIR	4,40	1,335	9,11	4,05	
250	FTIR	3,14	0,075	0,51	0,23	
251	FTIR	3,05	-0,015	-0,10	-0,05	
252	FTIR	3,27	0,205	1,40	0,62	
254	FTIR	2,70	-0,365	-2,49	-1,11	
256	FTIR	5,20	2,135	14,57	6,47	(*)
257	FTIR	2,89	-0,175	-1,19	-0,53	
258	FTIR	3,85	0,785	5,36	2,38	
259	FTIR	3,80	0,735	5,02	2,23	
260	FTIR	2,80	-0,265	-1,81	-0,80	
261	FTIR	3,30	0,235	1,60	0,71	
262	FTIR	3,40	0,335	2,29	1,02	
263	FTIR	2,86	-0,205	-1,40	-0,62	
264	FTIR	2,40	-0,665	-4,54	-2,02	
265	FTIR	3,90	0,835	5,70	2,53	
266	FTIR	2,77	-0,295	-2,01	-0,89	
267	FTIR	3,40	0,335	2,29	1,02	
268	FTIR	3,18	0,115	0,79	0,35	
269	FTIR	3,70	0,635	4,33	1,92	
271	FTIR	2,49	-0,575	-3,93	-1,74	
272	FTIR	4,02	0,955	6,52	2,89	
273	FTIR	3,73	0,665	4,54	2,02	
275	FTIR	3,45	0,385	2,63	1,17	
276	FTIR	2,70	-0,365	-2,49	-1,11	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	3,78	0,715	4,88	2,17	
278	FTIR	3,65	0,585	3,99	1,77	
279	FTIR	3,40	0,335	2,29	1,02	
280	FTIR	2,77	-0,295	-2,01	-0,89	
281	FTIR	3,04	-0,025	-0,17	-0,08	
282	FTIR	2,60	-0,465	-3,17	-1,41	
284	FTIR	3,50	0,435	2,97	1,32	
285	FTIR	4,34	1,275	8,70	3,86	
287	FTIR	3,20	0,135	0,92	0,41	
288	FTIR	3,17	0,105	0,72	0,32	
311	FTIR	2,90	-0,165	-1,13	-0,50	
320	FTIR	3,99	0,925	6,31	2,80	
337	FTIR	3,77	0,705	4,81	2,14	
365	FTIR	3,90	0,835	5,70	2,53	

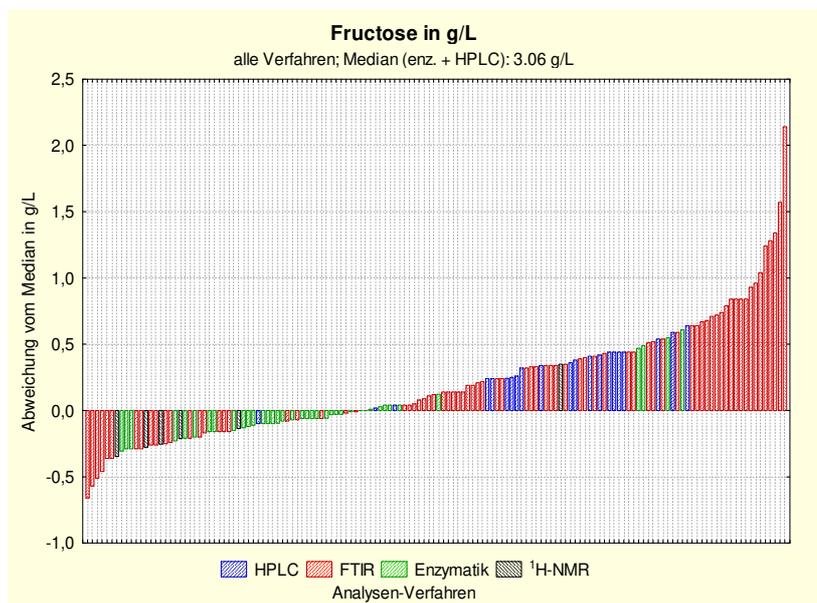
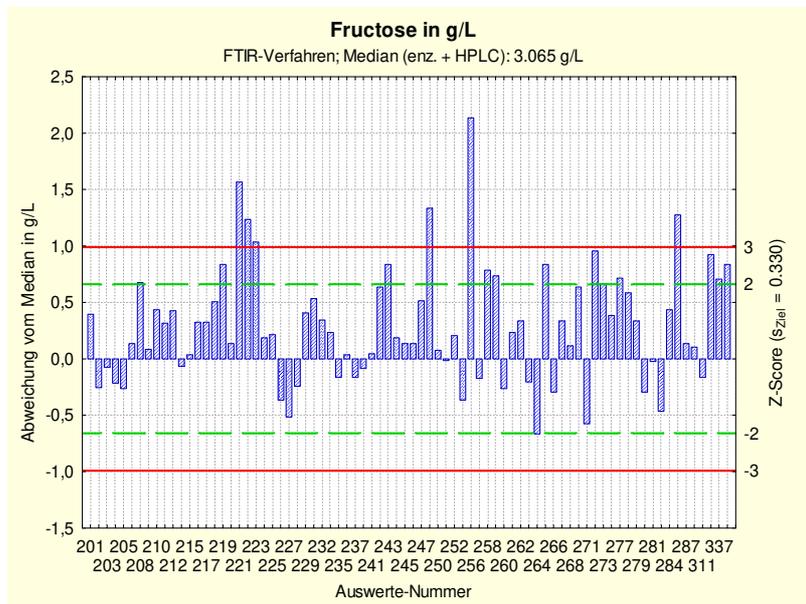
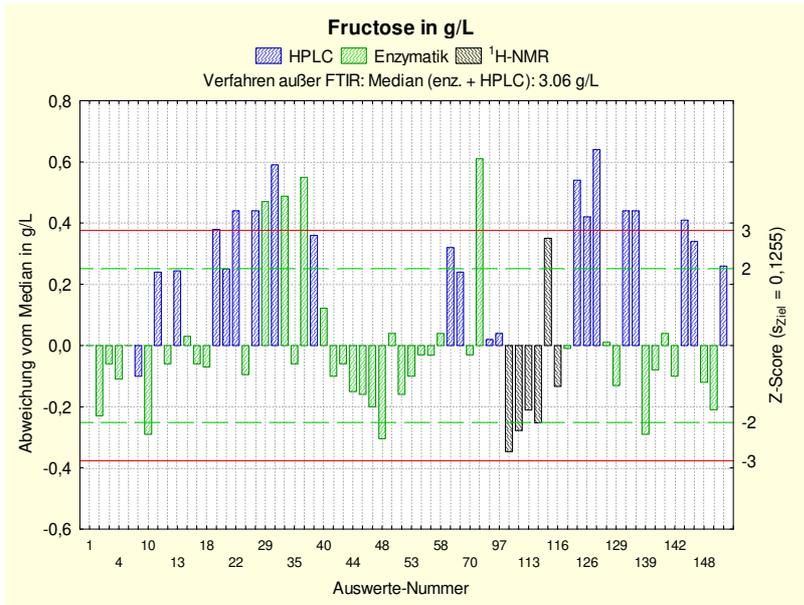
6.10.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	60	59
Minimalwert	2,75	2,75
Mittelwert	3,161	3,152
Median	3,065	3,060
Maximalwert	3,70	3,67
Standardabweichung (s_L)	0,264	0,256
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,034	0,033
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,146	0,146
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,126	0,126
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,330	0,330
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,80	1,75
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,10	2,04
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,80	0,78
Quotient (u_M/s_H)	0,23	0,23
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,27	0,27
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,10	0,10

Der im Abschnitt 6.10.1 mit (**) markierte Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	21	3,403	0,173
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	37	2,991	0,114
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell, OIV-MA-AS311-02	2	3,365	0,489
	alle herkömmlichen Verfahren	60	3,145	0,271
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	3,328	0,484
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,859	0,144



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	8,54	0,040	0,11	
03	HPLC	8,26	-0,240	-0,69	
04	enzymat. autom.	8,67	0,170	0,49	
05	enzymat. autom.	8,50	0,000	0,00	
09	enzymat. autom.	8,68	0,180	0,52	
11	HPLC	8,90	0,400	1,15	
13	HPLC	8,63	0,128	0,37	
14	enzymat. autom.	8,37	-0,130	-0,37	
21	HPLC	8,42	-0,080	-0,23	
22	HPLC	8,50	0,000	0,00	
26	HPLC	8,70	0,200	0,57	
30	HPLC	8,48	-0,020	-0,06	
39	HPLC	8,76	0,260	0,75	
56	enzymat. autom.	8,26	-0,240	-0,69	
58	enzymat. autom.	8,20	-0,300	-0,86	
59	enzymat. autom.	8,50	0,000	0,00	
61	HPLC	8,52	0,020	0,06	
82	enzymat. Hand	8,24	-0,260	-0,75	
92	enzymat. Hand	8,24	-0,260	-0,75	
97	HPLC	8,91	0,410	1,18	
111	NMR	8,42	-0,076	-0,22	
112	NMR	7,97	-0,529	-1,52	
113	NMR	8,06	-0,437	-1,25	
114	NMR	8,77	0,275	0,79	
115	NMR	8,35	-0,150	-0,43	
116	NMR	8,32	-0,178	-0,51	

6.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	8,22	-0,280	-0,80	-0,80	
202	FTIR	7,92	-0,580	-1,66	-1,67	
203	FTIR	8,33	-0,170	-0,49	-0,49	
205	FTIR	8,40	-0,100	-0,29	-0,29	
206	FTIR	7,25	-1,250	-3,59	-3,59	
207	FTIR	7,90	-0,600	-1,72	-1,72	
208	FTIR	8,99	0,490	1,41	1,41	
210	FTIR	7,88	-0,620	-1,78	-1,78	
211	FTIR	7,53	-0,970	-2,78	-2,79	
212	FTIR	8,02	-0,480	-1,38	-1,38	
214	FTIR	7,90	-0,600	-1,72	-1,72	
215	FTIR	8,05	-0,450	-1,29	-1,29	
216	FTIR	8,18	-0,320	-0,92	-0,92	
217	FTIR	6,34	-2,160	-6,20	-6,21	(***)
218	FTIR	7,30	-1,200	-3,44	-3,45	
220	FTIR	8,63	0,130	0,37	0,37	
221	FTIR	8,05	-0,450	-1,29	-1,29	
223	FTIR	7,60	-0,900	-2,58	-2,59	
224	FTIR	8,05	-0,450	-1,29	-1,29	
226	FTIR	8,40	-0,100	-0,29	-0,29	
227	FTIR	8,16	-0,340	-0,98	-0,98	
228	FTIR	8,09	-0,410	-1,18	-1,18	
229	FTIR	8,66	0,160	0,46	0,46	
231	FTIR	7,30	-1,200	-3,44	-3,45	
232	FTIR	7,73	-0,770	-2,21	-2,21	
234	FTIR	8,22	-0,280	-0,80	-0,80	
236	FTIR	7,60	-0,900	-2,58	-2,59	
237	FTIR	8,73	0,230	0,66	0,66	
240	FTIR	8,00	-0,500	-1,44	-1,44	
241	FTIR	8,30	-0,200	-0,57	-0,57	

Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

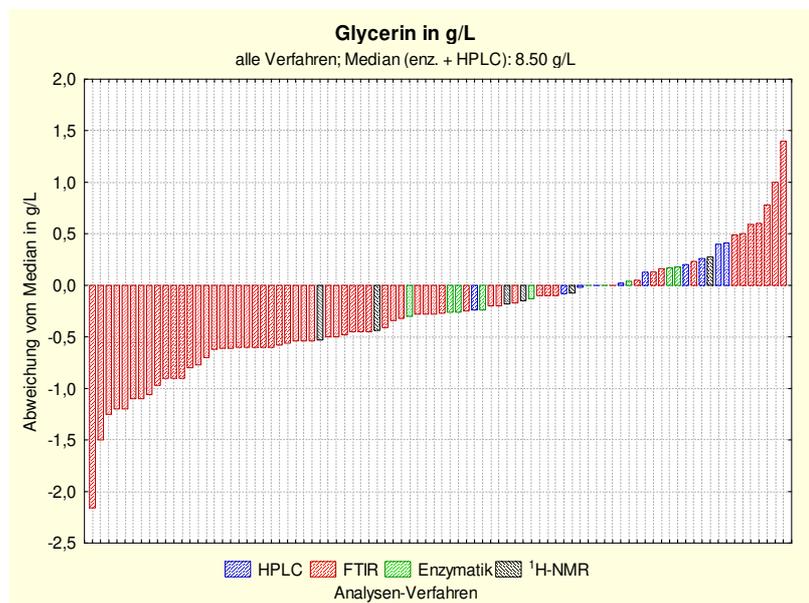
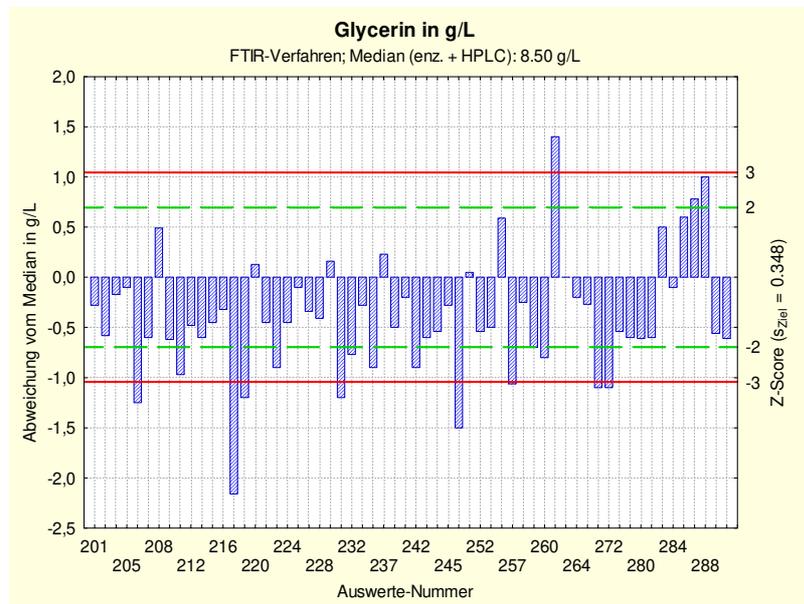
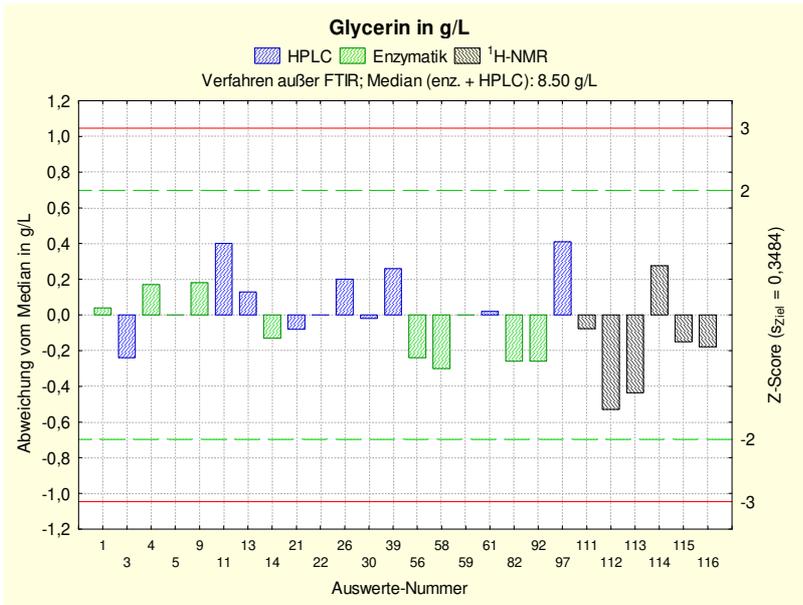
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
242	FTIR	7,60	-0,900	-2,58	-2,59	
243	FTIR	7,90	-0,600	-1,72	-1,72	
244	FTIR	7,96	-0,540	-1,55	-1,55	
245	FTIR	8,22	-0,280	-0,80	-0,80	
249	FTIR	7,00	-1,500	-4,31	-4,31	
250	FTIR	8,55	0,050	0,14	0,14	
252	FTIR	7,96	-0,540	-1,55	-1,55	
254	FTIR	8,00	-0,500	-1,44	-1,44	
256	FTIR	9,09	0,590	1,69	1,70	
257	FTIR	7,44	-1,060	-3,04	-3,05	
258	FTIR	8,25	-0,250	-0,72	-0,72	
259	FTIR	7,80	-0,700	-2,01	-2,01	
260	FTIR	7,70	-0,800	-2,30	-2,30	
261	FTIR	9,90	1,400	4,02	4,02	
262	FTIR	8,50	0,000	0,00	0,00	
264	FTIR	8,30	-0,200	-0,57	-0,57	
268	FTIR	8,23	-0,270	-0,77	-0,78	
269	FTIR	7,40	-1,100	-3,16	-3,16	
272	FTIR	7,40	-1,100	-3,16	-3,16	
275	FTIR	7,96	-0,540	-1,55	-1,55	
276	FTIR	7,80	-0,700	-2,01	-2,01	
279	FTIR	7,90	-0,600	-1,72	-1,72	
280	FTIR	7,89	-0,610	-1,75	-1,75	
282	FTIR	7,90	-0,600	-1,72	-1,72	
283	FTIR	9,00	0,500	1,44	1,44	
284	FTIR	8,40	-0,100	-0,29	-0,29	
285	FTIR	9,10	0,600	1,72	1,72	
287	FTIR	9,28	0,780	2,24	2,24	
288	FTIR	9,50	1,000	2,87	2,87	
320	FTIR	7,94	-0,560	-1,61	-1,61	
337	FTIR	7,89	-0,610	-1,75	-1,75	

6.11.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	20
Minimalwert	8,20
Mittelwert	8,514
Median	8,500
Maximalwert	8,91
Standardabweichung (s_L)	0,215
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,048
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,348
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{U\ FTIR}$)	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,62
Quotient ($s_L/s_{U\ FTIR}$)	0,62
Quotient (u_M/s_H)	0,14
Quotient ($u_M/s_{U\ FTIR}$)	0,14

6.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	10	8,604	0,232
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	7	8,454	0,213
enzymat. Hand	enzymatisch manuell	3	8,338	0,193
	alle herkömmlichen Verfahren	20	8,509	0,234
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	60	8,065	0,511
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	8,311	0,310



6.12 pH-Wert

6.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,59	-0,030	-0,63	
02	potentiometr.	3,57	-0,050	-1,05	
03	potentiometr.	3,54	-0,075	-1,58	
04	potentiometr.	3,69	0,070	1,47	
05	potentiometr.	3,55	-0,070	-1,47	
06	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
09	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
11	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
12	potentiometr.	3,58	-0,040	-0,84	
13	potentiometr.	3,68	0,060	1,26	
14	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
15	potentiometr.	3,58	-0,040	-0,84	
18	potentiometr.	3,67	0,051	1,07	
20	potentiometr.	3,50	-0,120	-2,52	
21	potentiometr.	3,54	-0,080	-1,68	
22	potentiometr.	3,60	-0,020	-0,42	
24	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
25	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
26	potentiometr.	3,71	0,090	1,89	
27	potentiometr.	3,65	0,030	0,63	
28	potentiometr.	3,64	0,020	0,42	
29	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
30	potentiometr.	3,60	-0,020	-0,42	
31	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
32	potentiometr.	3,64	0,020	0,42	
37	potentiometr.	3,41	-0,210	-4,41	
38	potentiometr.	3,61	-0,012	-0,25	
39	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
40	potentiometr.	3,62	-0,005	-0,11	
41	potentiometr.	3,66	0,040	0,84	
42	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
43	potentiometr.	3,62	0,000	0,00	
44	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
45	potentiometr.	3,75	0,130	2,73	
47	potentiometr.	3,54	-0,080	-1,68	
49	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
50	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
53	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
56	potentiometr.	3,61	-0,010	-0,21	
57	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
58	potentiometr.	3,66	0,040	0,84	
59	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
60	potentiometr.	3,68	0,060	1,26	
61	potentiometr.	3,27	-0,350	-7,35	(**)
62	potentiometr.	3,66	0,040	0,84	
65	potentiometr.	3,54	-0,075	-1,58	
70	potentiometr.	3,76	0,140	2,94	
74	potentiometr.	3,58	-0,040	-0,84	
75	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
77	potentiometr.	3,65	0,030	0,63	
78	potentiometr.	3,67	0,050	1,05	
82	potentiometr.	3,63	0,010	0,21	
83	potentiometr.	3,60	-0,020	-0,42	
85	potentiometr.	3,60	-0,020	-0,42	
86	potentiometr.	3,74	0,120	2,52	
106	potentiometr.	3,45	-0,170	-3,57	

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

6.12.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,57	-0,050	-1,01	
202	FTIR	3,59	-0,030	-0,61	
203	FTIR	3,53	-0,090	-1,83	
204	FTIR	3,63	0,010	0,20	
205	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
206	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
207	FTIR	3,54	-0,080	-1,62	
208	FTIR	3,62	0,000	0,00	
209	FTIR	3,48	-0,140	-2,84	
210	FTIR	3,46	-0,160	-3,25	
211	FTIR	3,49	-0,130	-2,64	
212	FTIR	3,53	-0,090	-1,83	
214	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
215	FTIR	3,58	-0,040	-0,81	
216	FTIR	3,71	0,090	1,83	
217	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
218	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
219	FTIR	3,69	0,070	1,42	
220	FTIR	3,63	0,010	0,20	
221	FTIR	3,70	0,080	1,62	
222	FTIR	3,75	0,130	2,64	
223	FTIR	3,63	0,010	0,20	
224	FTIR	3,56	-0,060	-1,22	
225	FTIR	3,56	-0,060	-1,22	
226	FTIR	3,64	0,020	0,41	
227	FTIR	3,62	0,000	0,00	
228	FTIR	3,63	0,010	0,20	
229	FTIR	3,65	0,030	0,61	
231	FTIR	3,62	0,000	0,00	
232	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
234	FTIR	3,63	0,010	0,20	
235	FTIR	3,41	-0,210	-4,26	
236	FTIR	3,56	-0,060	-1,22	
237	FTIR	3,68	0,060	1,22	
240	FTIR	3,62	0,000	0,00	
241	FTIR	3,55	-0,070	-1,42	
242	FTIR	3,40	-0,220	-4,46	
243	FTIR	3,57	-0,050	-1,01	
244	FTIR	3,57	-0,050	-1,01	
245	FTIR	3,59	-0,030	-0,61	
246	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
247	FTIR	3,55	-0,070	-1,42	
249	FTIR	3,54	-0,080	-1,62	
250	FTIR	3,58	-0,040	-0,81	
251	FTIR	3,72	0,100	2,03	
252	FTIR	3,57	-0,050	-1,01	
254	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
255	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
256	FTIR	3,67	0,050	1,01	
257	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
258	FTIR	3,51	-0,110	-2,23	
259	FTIR	3,59	-0,030	-0,61	
260	FTIR	3,69	0,070	1,42	
261	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
262	FTIR	3,68	0,060	1,22	
264	FTIR	3,69	0,070	1,42	
265	FTIR	3,62	0,000	0,00	
266	FTIR	3,60	-0,020	-0,41	
267	FTIR	3,50	-0,120	-2,43	
268	FTIR	3,59	-0,030	-0,61	
269	FTIR	3,52	-0,100	-2,03	
270	FTIR	3,57	-0,050	-1,01	
271	FTIR	3,52	-0,100	-2,03	
272	FTIR	3,48	-0,140	-2,84	
273	FTIR	3,53	-0,090	-1,83	
275	FTIR	3,63	0,010	0,20	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

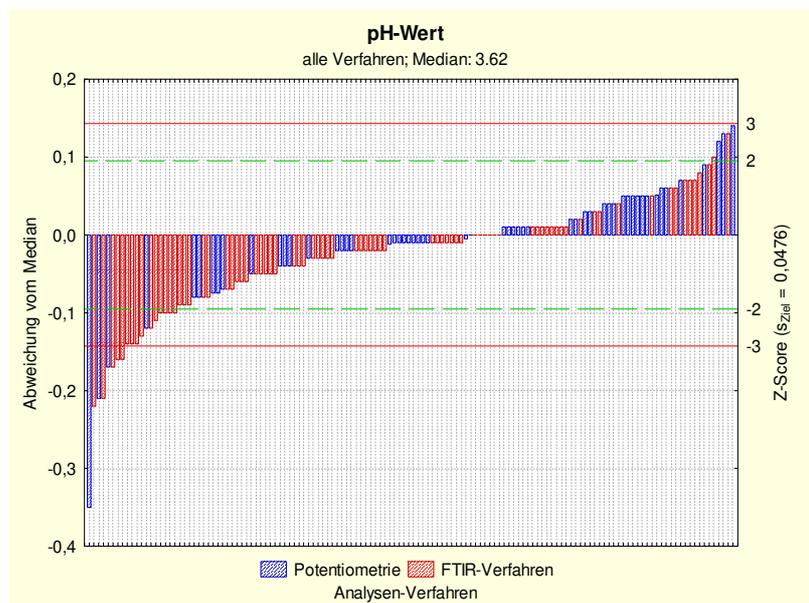
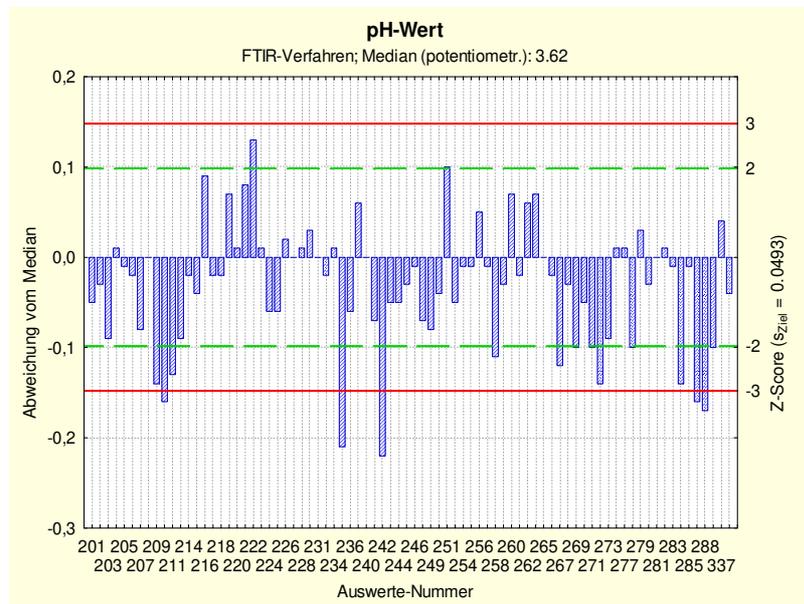
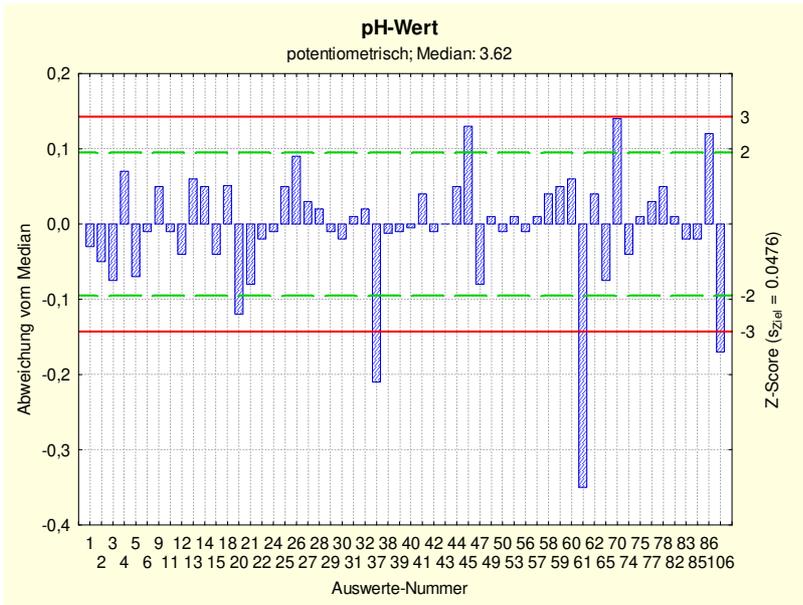
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,76	0,140	2,84	
277	FTIR	3,63	0,010	0,20	
278	FTIR	3,52	-0,100	-2,03	
279	FTIR	3,65	0,030	0,61	
280	FTIR	3,59	-0,030	-0,61	
281	FTIR	3,62	0,000	0,00	
282	FTIR	3,63	0,010	0,20	
283	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
284	FTIR	3,48	-0,140	-2,84	
285	FTIR	3,61	-0,010	-0,20	
287	FTIR	3,46	-0,160	-3,25	
288	FTIR	3,45	-0,170	-3,45	
320	FTIR	3,52	-0,100	-2,03	
337	FTIR	3,66	0,040	0,81	
365	FTIR	3,58	-0,040	-0,81	

6.12.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	56	55
Minimalwert	3,27	3,41
Mittelwert	3,615	3,621
Median	3,618	3,620
Maximalwert	3,76	3,76
Standardabweichung (s_L)	0,0792	0,0644
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0106	0,0087
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,0493	0,0493
Horvat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,66	1,35
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,61	1,31
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,22	0,18
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,21	0,18

6.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	56	3,621	0,056
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	3,591	0,065
	alle Verfahren	136	3,603	0,064



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
02	LwK 5.2.1	5,31	-0,090	-0,38	-0,84	
04	LwK 5.2.1	5,34	-0,060	-0,25	-0,56	
05	LwK 5.1	5,31	-0,090	-0,38	-0,84	
06	LwK 5.2.1	5,39	-0,010	-0,04	-0,09	
09	LwK 5.2.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
11	LwK 5.1	5,45	0,050	0,21	0,47	
12	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
13	LwK 5.1	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
14	LwK 5.1	5,45	0,050	0,21	0,47	
15	LwK 5.2.1	5,43	0,030	0,13	0,28	
18	LwK 5.2.1	5,49	0,090	0,38	0,84	
19	LwK 5.1	5,25	-0,150	-0,63	-1,40	
20	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
21	LwK 5.1	5,28	-0,120	-0,51	-1,12	
22	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
23	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
24	LwK 5.1	5,47	0,070	0,30	0,65	
25	LwK 5.1	5,44	0,040	0,17	0,37	
26	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
27	LwK 5.1	5,70	0,300	1,27	2,80	
28	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
29	LwK 5.2.1	5,35	-0,050	-0,21	-0,47	
30	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
31	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
32	LwK 5.1	5,60	0,200	0,84	1,87	
33	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
34	LwK 5.2.1	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
37	LwK 5.1	5,32	-0,084	-0,35	-0,78	
38	LwK 5.1	5,33	-0,070	-0,30	-0,65	
39	LwK 5.2.1	5,37	-0,030	-0,13	-0,28	
40	LwK 5.1	5,43	0,030	0,13	0,28	
41	LwK 5.1	5,45	0,050	0,21	0,47	
42	LwK 5.1	5,29	-0,110	-0,46	-1,03	
43	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
44	LwK 5.1	5,31	-0,090	-0,38	-0,84	
45	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
47	LwK 5.2.1	5,32	-0,080	-0,34	-0,75	
48	LwK 5.1	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
49	LwK 5.1	5,25	-0,150	-0,63	-1,40	
50	LwK 5.1	5,38	-0,020	-0,08	-0,19	
51	LwK 5.1	5,60	0,200	0,84	1,87	
52	LwK 5.2.1	5,55	0,150	0,63	1,40	
53	LwK 5.2.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 5.2.1	5,80	0,400	1,69	3,73	
56	LwK 5.2.1	5,35	-0,050	-0,21	-0,47	
57	LwK 5.1	5,55	0,150	0,63	1,40	
58	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
59	LwK 5.1	5,29	-0,110	-0,46	-1,03	
60	LwK 5.2.1	5,41	0,010	0,04	0,09	
61	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
62	LwK 5.1	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
65	LwK 5.1	5,47	0,070	0,30	0,65	
70	LwK 5.1	5,33	-0,070	-0,30	-0,65	
74	LwK 5.1	5,80	0,400	1,69	3,73	
75	LwK 5.1	5,00	-0,400	-1,69	-3,73	
77	LwK 5.2.2	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
78	LwK 5.2.2	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
82	LwK 5.1	5,31	-0,090	-0,38	-0,84	
83	LwK 5.2.2	5,40	0,000	0,00	0,00	
85	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
86	LwK 5.1	6,20	0,800	3,38	7,47	(**)
90	LwK 5.2.1	5,39	-0,010	-0,04	-0,09	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
100	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
106	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
121	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
122	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
123	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
124	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
125	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
126	LwK 5.2.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
127	LwK 5.1	5,10	-0,300	-1,27	-2,80	
128	LwK 5.2.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
129	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
130	LwK 5.1	5,60	0,200	0,84	1,87	
131	LwK 5.1	5,45	0,050	0,21	0,47	
132	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
133	LwK 5.1	5,20	-0,200	-0,84	-1,87	
134	LwK 5.1	5,10	-0,300	-1,27	-2,80	
135	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
136	LwK 5.1	5,14	-0,260	-1,10	-2,43	
137	LwK 5.2.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
138	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
139	LwK 5.1	5,32	-0,080	-0,34	-0,75	
140	LwK 5.1	5,35	-0,050	-0,21	-0,47	
141	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
142	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
143	LwK 5.2.1	5,33	-0,070	-0,30	-0,65	
144	LwK 5.2.1	5,70	0,300	1,27	2,80	
145	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
146	LwK 5.1	5,30	-0,100	-0,42	-0,93	
147	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
148	LwK 5.1	5,38	-0,020	-0,08	-0,19	
149	LwK 5.2.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
150	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
151	LwK 5.1	5,70	0,300	1,27	2,80	
152	LwK 5.1	5,50	0,100	0,42	0,93	
153	LwK 5.1	5,38	-0,020	-0,08	-0,19	
154	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	
155	LwK 5.1	5,40	0,000	0,00	0,00	

6.13.1 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,44	0,040	0,17	0,28	
202	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
203	LwK 5.3	5,38	-0,020	-0,08	-0,14	
204	LwK 5.3	5,38	-0,020	-0,08	-0,14	
205	LwK 5.3	5,24	-0,160	-0,68	-1,10	
206	LwK 5.3	5,41	0,010	0,04	0,07	
207	LwK 5.3	5,20	-0,200	-0,84	-1,38	
208	LwK 5.3	5,38	-0,020	-0,08	-0,14	
209	LwK 5.3	5,36	-0,040	-0,17	-0,28	
210	LwK 5.3	5,16	-0,240	-1,01	-1,66	
211	LwK 5.3	5,19	-0,210	-0,89	-1,45	
212	LwK 5.3	5,48	0,080	0,34	0,55	
214	LwK 5.3	5,60	0,200	0,84	1,38	
215	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	
216	LwK 5.3	5,54	0,140	0,59	0,97	
217	LwK 5.3	5,37	-0,030	-0,13	-0,21	
218	LwK 5.3	5,47	0,070	0,30	0,48	
219	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
220	LwK 5.3	5,41	0,010	0,04	0,07	
221	LwK 5.3	5,05	-0,350	-1,48	-2,41	
223	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

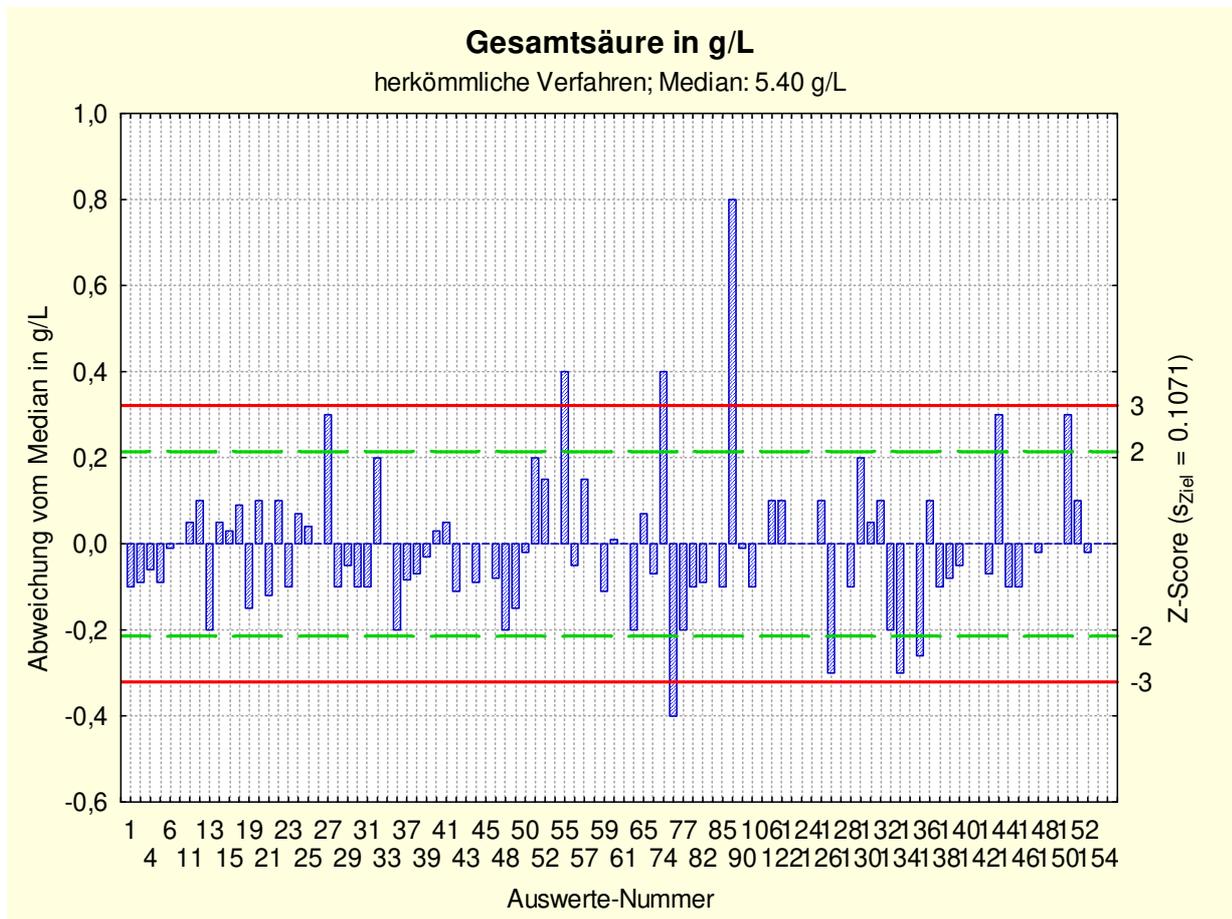
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	LwK 5.3	5,48	0,080	0,34	0,55	
225	LwK 5.3	5,61	0,210	0,89	1,45	
226	LwK 5.3	5,14	-0,260	-1,10	-1,79	
227	LwK 5.3	5,56	0,160	0,68	1,10	
228	LwK 5.3	5,39	-0,010	-0,04	-0,07	
229	LwK 5.3	5,49	0,090	0,38	0,62	
231	LwK 5.3	5,29	-0,110	-0,46	-0,76	
232	LwK 5.3	5,57	0,170	0,72	1,17	
234	LwK 5.3	5,39	-0,010	-0,04	-0,07	
235	LwK 5.3	5,20	-0,200	-0,84	-1,38	
236	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	
237	LwK 5.3	5,43	0,030	0,13	0,21	
240	LwK 5.3	5,62	0,220	0,93	1,52	
241	LwK 5.3	5,60	0,200	0,84	1,38	
242	LwK 5.3	5,35	-0,050	-0,21	-0,34	
243	LwK 5.3	5,30	-0,100	-0,42	-0,69	
244	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
245	LwK 5.3	5,52	0,120	0,51	0,83	
246	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
247	LwK 5.3	5,47	0,070	0,30	0,48	
248	LwK 5.3	5,55	0,150	0,63	1,03	
249	LwK 5.3	5,20	-0,200	-0,84	-1,38	
250	LwK 5.3	5,57	0,170	0,72	1,17	
251	LwK 5.3	5,52	0,120	0,51	0,83	
252	LwK 5.3	5,53	0,130	0,55	0,90	
254	LwK 5.3	5,70	0,300	1,27	2,07	
255	LwK 5.3	5,70	0,300	1,27	2,07	
256	LwK 5.3	5,47	0,070	0,30	0,48	
257	LwK 5.3	5,61	0,210	0,89	1,45	
258	LwK 5.3	5,76	0,360	1,52	2,48	
259	LwK 5.3	5,00	-0,400	-1,69	-2,76	
260	LwK 5.3	5,20	-0,200	-0,84	-1,38	
261	LwK 5.3	5,60	0,200	0,84	1,38	
262	LwK 5.3	5,00	-0,400	-1,69	-2,76	
263	LwK 5.3	5,42	0,020	0,08	0,14	
264	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
265	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	
266	LwK 5.3	5,18	-0,220	-0,93	-1,52	
267	LwK 5.3	5,20	-0,200	-0,84	-1,38	
268	LwK 5.3	5,63	0,230	0,97	1,59	
269	LwK 5.3	5,10	-0,300	-1,27	-2,07	
270	LwK 5.3	5,33	-0,070	-0,30	-0,48	
271	LwK 5.3	5,17	-0,230	-0,97	-1,59	
272	LwK 5.3	5,19	-0,210	-0,89	-1,45	
273	LwK 5.3	5,23	-0,170	-0,72	-1,17	
275	LwK 5.3	5,33	-0,070	-0,30	-0,48	
276	LwK 5.3	5,30	-0,100	-0,42	-0,69	
277	LwK 5.3	5,39	-0,010	-0,04	-0,07	
278	LwK 5.3	5,36	-0,040	-0,17	-0,28	
279	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	
280	LwK 5.3	5,72	0,320	1,35	2,21	
281	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	
282	LwK 5.3	5,40	0,000	0,00	0,00	
283	LwK 5.3	5,80	0,400	1,69	2,76	
284	LwK 5.3	5,30	-0,100	-0,42	-0,69	
285	LwK 5.3	5,35	-0,050	-0,21	-0,34	
287	LwK 5.3	4,95	-0,450	-1,90	-3,10	
288	LwK 5.3	4,92	-0,480	-2,03	-3,31	
311	LwK 5.3	5,39	-0,010	-0,04	-0,07	
320	LwK 5.3	5,46	0,060	0,25	0,41	
337	LwK 5.3	5,42	0,020	0,08	0,14	
365	LwK 5.3	5,50	0,100	0,42	0,69	

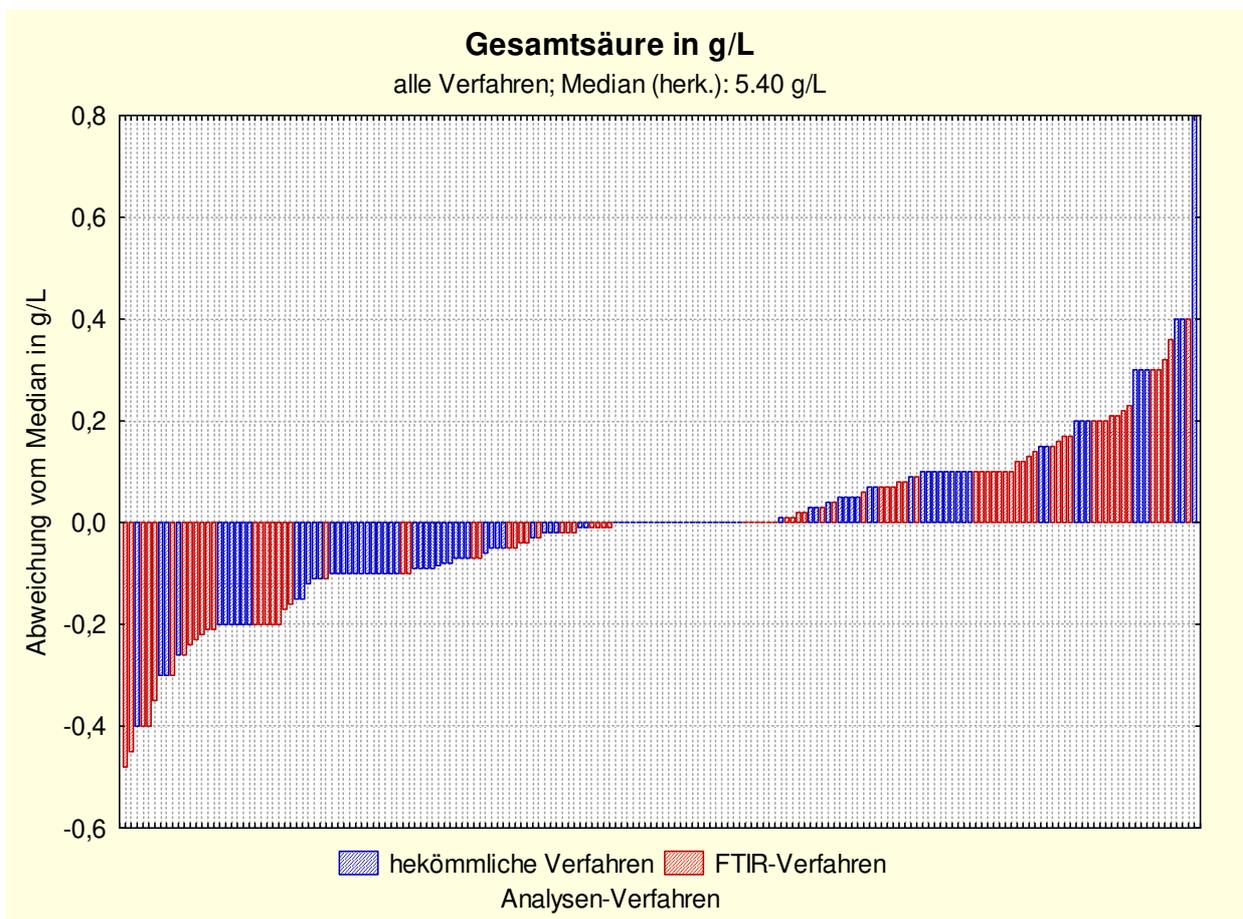
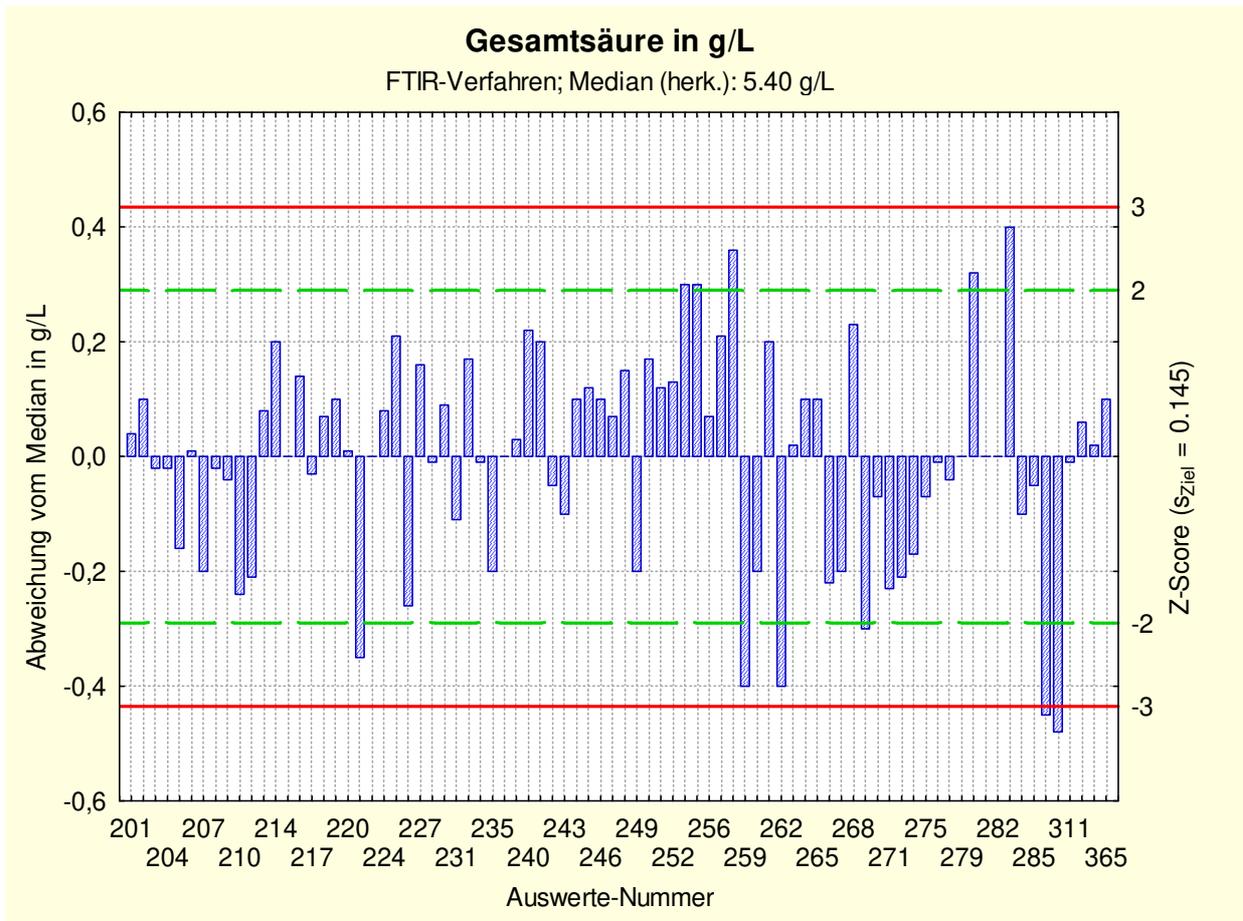
6.13.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	100	99
Minimalwert	5,00	5,00
Mittelwert	5,394	5,386
Median	5,400	5,400
Maximalwert	6,20	5,80
Standardabweichung (s_L)	0,157	0,135
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,016	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,237	0,237
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)	0,66	0,57
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,47	1,26
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	1,08	0,93
Quotient (u_M/s_H)	1,47	1,26
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,07	0,06
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,11	0,09

6.13.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	74	5,379	0,120
LwK 5.2.1	Potentiometrische Bestimmung; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	23	5,403	0,093
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	3	5,300	0,113
	alle herkömmlichen Verfahren	100	5,383	0,112
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	5,401	0,178





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,79	-0,110	-1,13	
02	HPLC	1,76	-0,140	-1,43	
04	photometr.	1,88	-0,020	-0,20	
05	HPLC	1,81	-0,090	-0,92	
09	photometr., autom.	1,84	-0,060	-0,61	
12	photometr., autom.	2,00	0,100	1,02	
15	photometr., autom.	2,10	0,200	2,05	
18	IC	1,93	0,030	0,31	
20	HPLC	1,60	-0,300	-3,07	
21	HPLC	0,36	-1,540	-15,78	(*)
22	HPLC	1,93	0,030	0,31	
24	HPLC	1,82	-0,080	-0,82	
26	HPLC	1,87	-0,030	-0,31	
29	photometr., autom.	1,96	0,060	0,61	
31	photometr., autom.	1,90	0,000	0,00	
38	photometr., autom.	1,82	-0,080	-0,82	
40	photometr., autom.	2,11	0,210	2,15	
44	photometr., autom.	2,08	0,180	1,84	
45	photometr., autom.	2,17	0,270	2,77	
47	photometr.	1,94	0,040	0,41	
48	photometr., autom.	2,03	0,128	1,31	
50	photometr., autom.	1,74	-0,160	-1,64	
56	photometr., autom.	1,95	0,050	0,51	
57	photometr., autom.	1,61	-0,290	-2,97	
58	photometr., autom.	1,84	-0,060	-0,61	
59	HPLC	1,94	0,040	0,41	
61	photometr., autom.	1,93	0,030	0,31	
82	photometr.	2,14	0,240	2,46	
90	HPLC	1,96	0,060	0,61	
92	HPLC	1,81	-0,092	-0,94	
100	HPLC	1,90	0,000	0,00	
101	IC	1,82	-0,080	-0,82	
111	NMR	1,40	-0,497	-5,09	(***)
112	NMR	1,87	-0,027	-0,28	
113	NMR	1,845	-0,055	-0,56	
114	NMR	1,66	-0,240	-2,46	
115	NMR	1,71	-0,190	-1,95	
116	NMR	2,09	0,194	1,99	

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

Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

6.14.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,82	-0,080	-0,82	-0,35	
202	FTIR	1,76	-0,140	-1,43	-0,62	
203	FTIR	1,75	-0,150	-1,54	-0,66	
204	FTIR	1,88	-0,020	-0,20	-0,09	
205	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
207	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
208	FTIR	2,05	0,150	1,54	0,66	
209	FTIR	1,45	-0,450	-4,61	-1,98	
210	FTIR	2,16	0,260	2,66	1,15	
211	FTIR	2,24	0,340	3,48	1,50	
212	FTIR	1,92	0,020	0,20	0,09	
214	FTIR	1,50	-0,400	-4,10	-1,76	
215	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
216	FTIR	1,88	-0,020	-0,20	-0,09	
217	FTIR	2,05	0,150	1,54	0,66	
218	FTIR	2,02	0,120	1,23	0,53	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

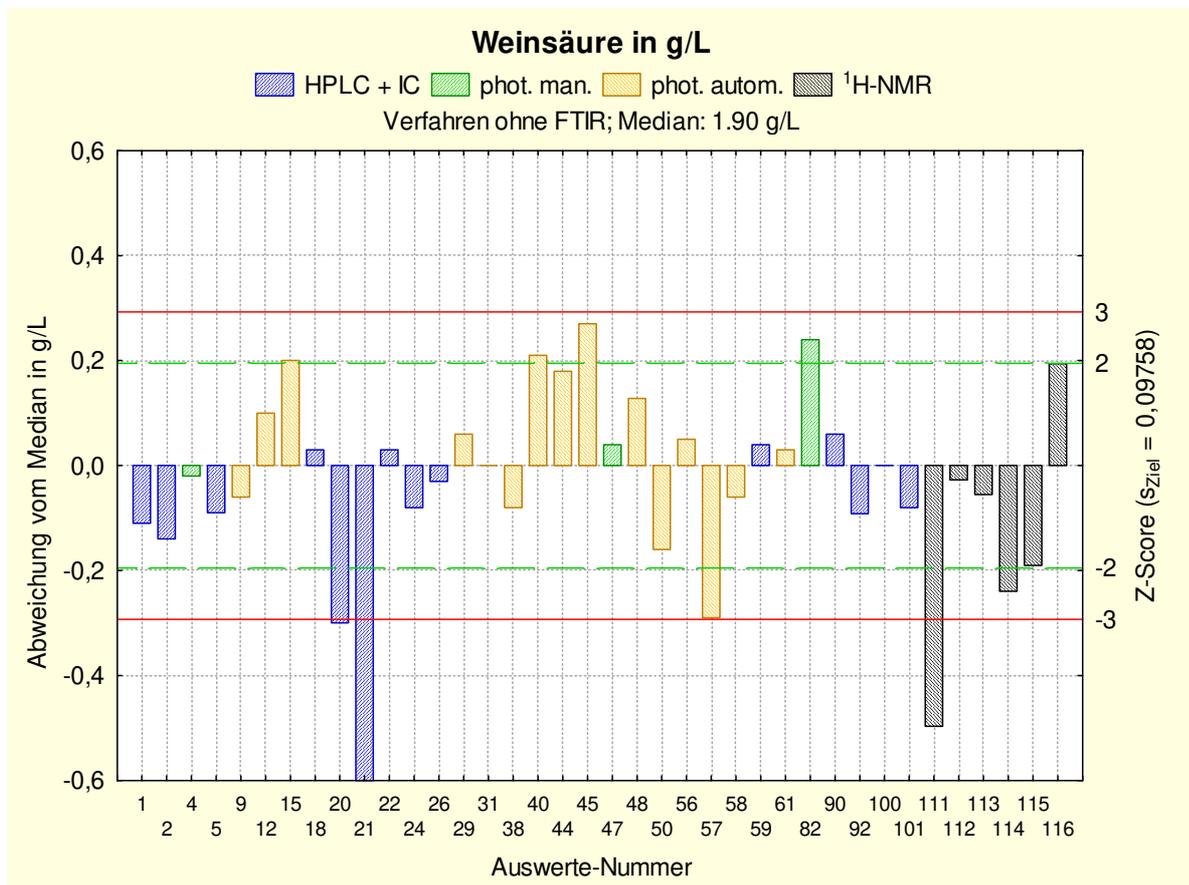
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
220	FTIR	1,74	-0,160	-1,64	-0,70	
221	FTIR	1,51	-0,390	-4,00	-1,72	
222	FTIR	2,16	0,260	2,66	1,15	
223	FTIR	1,80	-0,100	-1,02	-0,44	
224	FTIR	1,96	0,060	0,61	0,26	
226	FTIR	1,70	-0,200	-2,05	-0,88	
227	FTIR	2,04	0,140	1,43	0,62	
228	FTIR	2,00	0,100	1,02	0,44	
229	FTIR	2,01	0,110	1,13	0,48	
231	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
232	FTIR	1,82	-0,080	-0,82	-0,35	
234	FTIR	2,02	0,120	1,23	0,53	
235	FTIR	1,10	-0,800	-8,20	-3,52	
236	FTIR	1,60	-0,300	-3,07	-1,32	
237	FTIR	1,99	0,090	0,92	0,40	
240	FTIR	1,82	-0,080	-0,82	-0,35	
241	FTIR	2,03	0,130	1,33	0,57	
242	FTIR	1,60	-0,300	-3,07	-1,32	
243	FTIR	1,70	-0,200	-2,05	-0,88	
244	FTIR	2,04	0,140	1,43	0,62	
245	FTIR	2,21	0,310	3,18	1,37	
246	FTIR	1,95	0,050	0,51	0,22	
247	FTIR	1,62	-0,280	-2,87	-1,23	
249	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
250	FTIR	1,25	-0,650	-6,66	-2,86	
252	FTIR	1,97	0,070	0,72	0,31	
254	FTIR	1,80	-0,100	-1,02	-0,44	
256	FTIR	2,39	0,490	5,02	2,16	
257	FTIR	2,07	0,170	1,74	0,75	
258	FTIR	2,23	0,330	3,38	1,45	
259	FTIR	2,40	0,500	5,12	2,20	
260	FTIR	1,60	-0,300	-3,07	-1,32	
261	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
262	FTIR	2,00	0,100	1,02	0,44	
265	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
266	FTIR	1,68	-0,220	-2,25	-0,97	
267	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
268	FTIR	1,83	-0,070	-0,72	-0,31	
269	FTIR	2,09	0,190	1,95	0,84	
270	FTIR	2,42	0,520	5,33	2,29	
271	FTIR	1,80	-0,100	-1,02	-0,44	
272	FTIR	2,31	0,410	4,20	1,81	
273	FTIR	1,83	-0,070	-0,72	-0,31	
275	FTIR	1,78	-0,120	-1,23	-0,53	
276	FTIR	1,60	-0,300	-3,07	-1,32	
277	FTIR	1,95	0,050	0,51	0,22	
278	FTIR	1,51	-0,390	-4,00	-1,72	
279	FTIR	1,90	0,000	0,00	0,00	
280	FTIR	1,99	0,090	0,92	0,40	
281	FTIR	2,02	0,120	1,23	0,53	
282	FTIR	1,80	-0,100	-1,02	-0,44	
284	FTIR	2,10	0,200	2,05	0,88	
285	FTIR	2,20	0,300	3,07	1,32	
287	FTIR	2,04	0,140	1,43	0,62	
288	FTIR	1,88	-0,020	-0,20	-0,09	
320	FTIR	1,85	-0,050	-0,51	-0,22	
337	FTIR	1,36	-0,540	-5,53	-2,38	
365	FTIR	2,00	0,100	1,02	0,44	

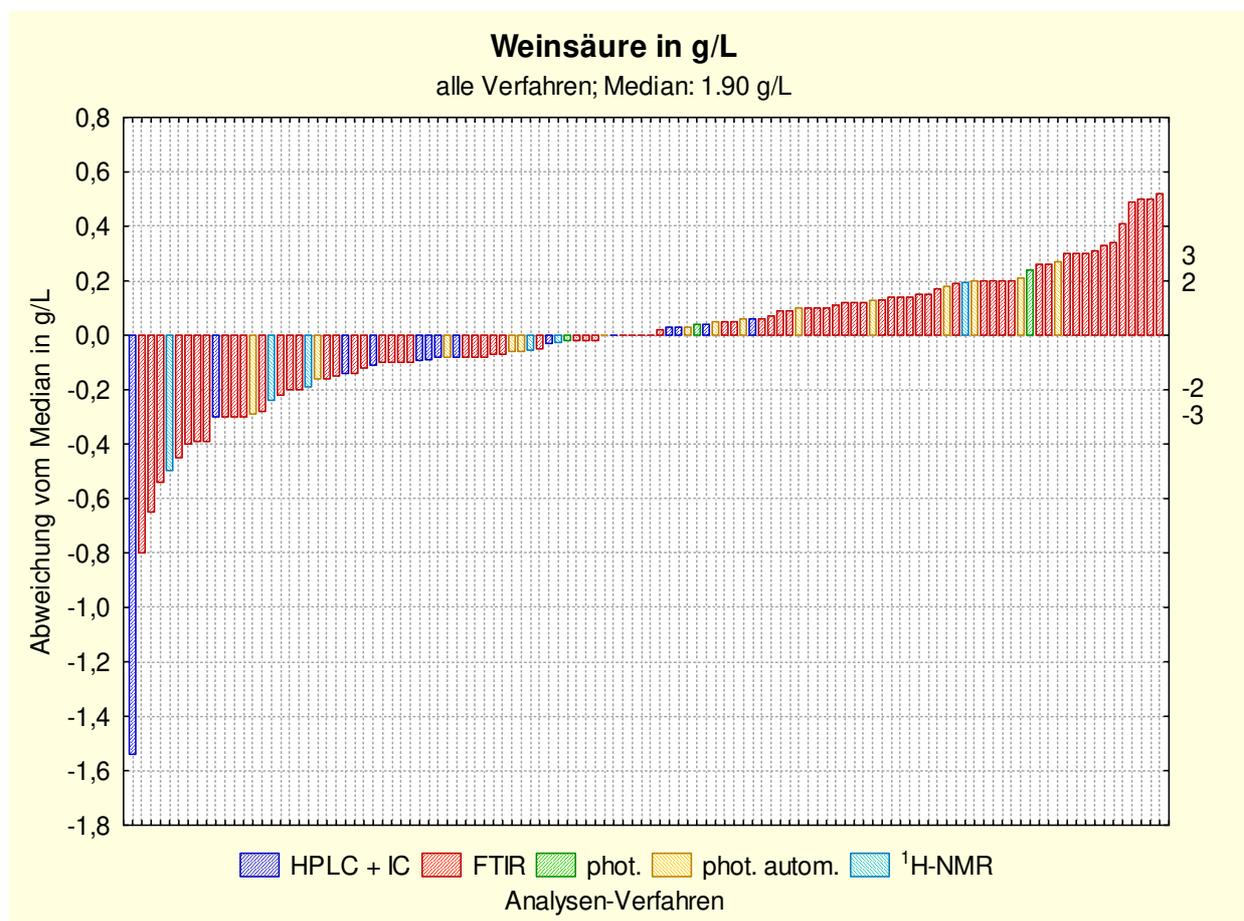
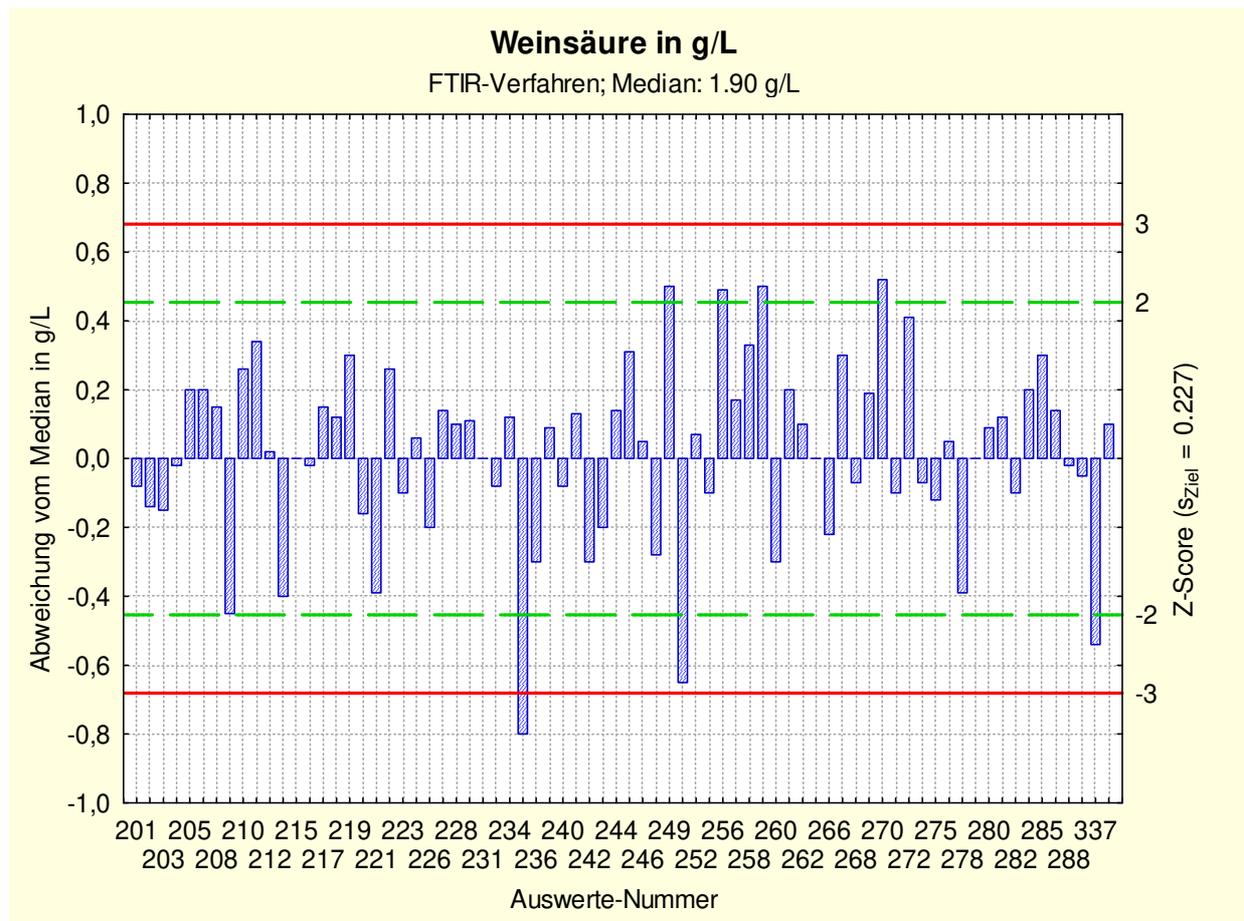
6.14.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herk. Verf. alle Daten
Gültige Werte	13	31
Minimalwert	1,60	1,60
Mittelwert	1,841	1,902
Median	1,820	1,900
Maximalwert	1,96	2,17
Standardabweichung (s _L)	0,098	0,137
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,027	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,094	0,098
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)	0,227	0,227
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,04	1,41
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)		
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)	0,43	0,60
Quotient (u _M /s _H)	0,29	0,25
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)		
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)	0,12	0,11

6.14.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	1,823	0,119
IC	Ionenchromatographie (IC)	2	1,875	0,088
	HPLC + IC	14	1,836	0,103
photometr.	photometrisch nach Rebelein	3	1,984	0,150
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	15	1,945	0,157
	alle herkömmlichen Verfahren	32	1,898	0,142
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	74	1,927	0,239
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,764	0,243





6.15 Flüchtige Säure [g/L]

6.15.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte ohne SO₂-Einfluss und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,620	0,0740	2,19	2,59	
04	OIV SO2-korr.	0,580	0,0340	1,00	1,19	
05	Gerhardt SO2 korr.	0,489	-0,0570	-1,68	-2,00	
09	OIV SO2-korr.	0,497	-0,0490	-1,45	-1,72	
11	Gerhardt SO2 ausg.	0,430	-0,1160	-3,43	-4,06	
13	Gerhardt SO2 korr.	0,210	-0,3360	-9,93	-11,76	(*)
18	IC	0,540	-0,0060	-0,18	-0,21	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,540	-0,0060	-0,18	-0,21	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,590	0,0440	1,30	1,54	
27	Halbmikro SO2 unber.	0,610	0,0640	1,89	2,24	
28	Wädenswil SO2 korr.	0,570	0,0240	0,71	0,84	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,500	-0,0460	-1,36	-1,61	
30	Gerhardt SO2 korr.	0,460	-0,0860	-2,54	-3,01	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,586	0,0400	1,18	1,40	
32	Halbmikro SO2 unber.	0,600	0,0540	1,60	1,89	
37	Halbmikro SO2 korr.	0,471	-0,0750	-2,22	-2,63	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,530	-0,0160	-0,47	-0,56	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,582	0,0360	1,06	1,26	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,599	0,0530	1,57	1,85	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,450	-0,0960	-2,84	-3,36	
43	Gerhardt SO2 korr.	0,410	-0,1360	-4,02	-4,76	
44	Gerhardt SO2 korr.	0,520	-0,0260	-0,77	-0,91	
45	Gerhardt SO2 korr.	0,487	-0,0589	-1,74	-2,06	
47	Gerhardt SO2 korr.	0,596	0,0500	1,48	1,75	
49	Gerhardt SO2 korr.	0,587	0,0410	1,21	1,43	
53	Gerhardt SO2 korr.	0,790	0,2440	7,21	8,54	(**)
55	Gerhardt SO2 korr.	0,480	-0,0660	-1,95	-2,31	
56	Rentschler mod. ausg.	0,505	-0,0410	-1,21	-1,44	
57	Büchi SO2 korr.	0,548	0,0020	0,06	0,07	
58	OIV SO2-korr.	0,560	0,0140	0,41	0,49	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,499	-0,0470	-1,39	-1,65	
65	Halbmikro SO2 unber.	0,630	0,0840	2,48	2,94	
67	Wädenswil SO2 korr.	0,515	-0,0310	-0,92	-1,09	
69	Wädenswil SO2 unber.	0,600	0,0540	1,60	1,89	
70	Gerhardt SO2 korr.	0,660	0,1140	3,37	3,99	
74	Wädensw. SO2 ausg.	0,610	0,0640	1,89	2,24	
83	Halbmikro SO2 unber.	0,460	-0,0860	-2,54	-3,01	
86	Wasserdampfdest.	0,680	0,1340	3,96	4,69	
90	OIV SO2-korr.	0,551	0,0054	0,16	0,19	
98	Halbmikro SO2 ausg.	0,546	0,0000	0,00	0,00	
100	Gerhardt SO2 korr.	0,580	0,0340	1,00	1,19	
106	Halbmikro SO2 unber.	0,680	0,1340	3,96	4,69	

Der mit (*) markierte Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der SO₂-korrigierten Werte ab.

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

6.15.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,580	0,0340	1,00	0,38	
202	FTIR	0,623	0,0770	2,28	0,86	
204	FTIR	0,540	-0,0060	-0,18	-0,07	
205	FTIR	0,490	-0,0560	-1,66	-0,63	
207	FTIR	0,380	-0,1660	-4,91	-1,86	
208	FTIR	0,501	-0,0450	-1,33	-0,51	
209	FTIR	0,470	-0,0760	-2,25	-0,85	
210	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
212	FTIR	0,500	-0,0460	-1,36	-0,52	
214	FTIR	0,580	0,0340	1,00	0,38	
215	FTIR	0,420	-0,1260	-3,72	-1,41	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	0,410	-0,1360	-4,02	-1,53	
217	FTIR	0,560	0,0140	0,41	0,16	
218	FTIR	0,560	0,0140	0,41	0,16	
219	FTIR	0,550	0,0040	0,12	0,04	
220	FTIR	0,520	-0,0260	-0,77	-0,29	
221	FTIR	0,480	-0,0660	-1,95	-0,74	
223	FTIR	0,620	0,0740	2,19	0,83	
224	FTIR	0,460	-0,0860	-2,54	-0,97	
225	FTIR	0,638	0,0920	2,72	1,03	
226	FTIR	0,520	-0,0260	-0,77	-0,29	
227	FTIR	0,730	0,1840	5,44	2,07	
228	FTIR	0,530	-0,0160	-0,47	-0,18	
229	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
231	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
232	FTIR	0,610	0,0640	1,89	0,72	
234	FTIR	0,500	-0,0460	-1,36	-0,52	
235	FTIR	0,480	-0,0660	-1,95	-0,74	
236	FTIR	0,530	-0,0160	-0,47	-0,18	
237	FTIR	0,700	0,1540	4,55	1,73	
240	FTIR	0,630	0,0840	2,48	0,94	
241	FTIR	0,650	0,1040	3,07	1,17	
242	FTIR	0,670	0,1240	3,67	1,39	
243	FTIR	0,520	-0,0260	-0,77	-0,29	
244	FTIR	0,510	-0,0360	-1,06	-0,40	
245	FTIR	0,620	0,0740	2,19	0,83	
246	FTIR	0,620	0,0740	2,19	0,83	
247	FTIR	0,560	0,0140	0,41	0,16	
249	FTIR	0,670	0,1240	3,67	1,39	
250	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
251	FTIR	0,530	-0,0160	-0,47	-0,18	
252	FTIR	0,580	0,0340	1,00	0,38	
254	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
255	FTIR	0,620	0,0740	2,19	0,83	
256	FTIR	0,510	-0,0360	-1,06	-0,40	
257	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
258	FTIR	0,500	-0,0460	-1,36	-0,52	
260	FTIR	0,540	-0,0060	-0,18	-0,07	
261	FTIR	0,670	0,1240	3,67	1,39	
262	FTIR	0,230	-0,3160	-9,34	-3,55	
264	FTIR	0,520	-0,0260	-0,77	-0,29	
265	FTIR	0,570	0,0240	0,71	0,27	
266	FTIR	0,630	0,0840	2,48	0,94	
267	FTIR	0,590	0,0440	1,30	0,49	
268	FTIR	0,550	0,0040	0,12	0,04	
269	FTIR	0,630	0,0840	2,48	0,94	
270	FTIR	0,690	0,1440	4,26	1,62	
271	FTIR	0,420	-0,1260	-3,72	-1,41	
272	FTIR	0,470	-0,0760	-2,25	-0,85	
273	FTIR	0,530	-0,0160	-0,47	-0,18	
275	FTIR	0,490	-0,0560	-1,66	-0,63	
276	FTIR	0,440	-0,1060	-3,13	-1,19	
277	FTIR	0,480	-0,0660	-1,95	-0,74	
278	FTIR	0,390	-0,1560	-4,61	-1,75	
279	FTIR	0,510	-0,0360	-1,06	-0,40	
280	FTIR	0,680	0,1340	3,96	1,50	
281	FTIR	0,490	-0,0560	-1,66	-0,63	
282	FTIR	0,580	0,0340	1,00	0,38	
283	FTIR	0,530	-0,0160	-0,47	-0,18	
284	FTIR	0,770	0,2240	6,62	2,51	
285	FTIR	0,550	0,0040	0,12	0,04	
287	FTIR	0,750	0,2040	6,03	2,29	
288	FTIR	0,640	0,0940	2,78	1,05	
320	FTIR	0,510	-0,0360	-1,06	-0,40	
337	FTIR	0,540	-0,0060	-0,18	-0,07	
365	FTIR	0,560	0,0140	0,41	0,16	

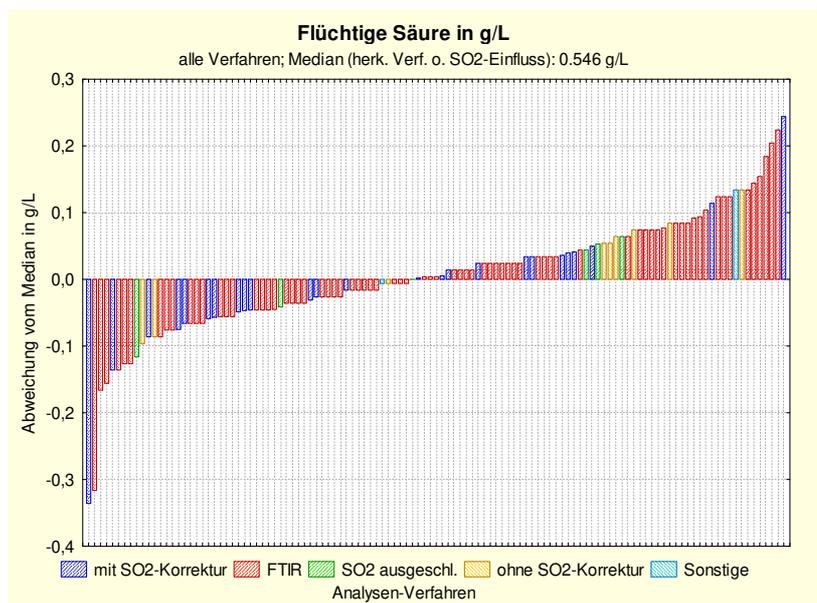
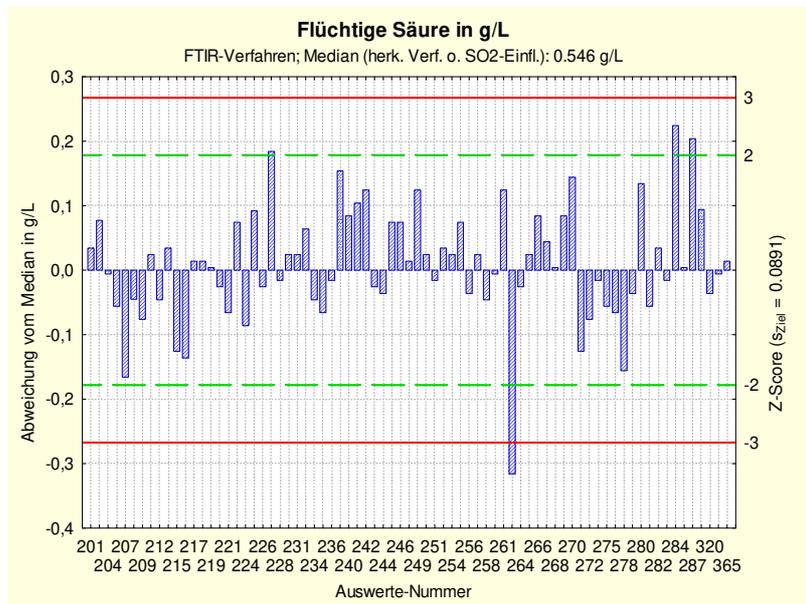
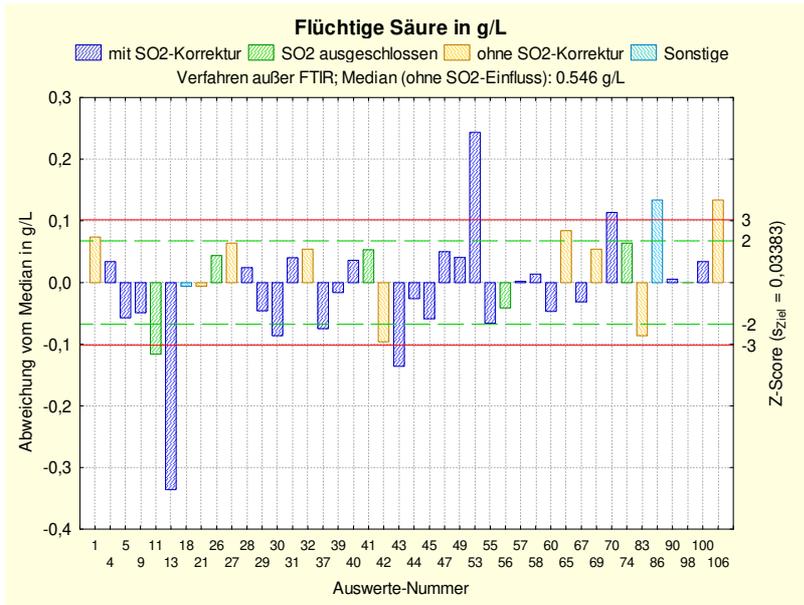
6.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L Destillationsergebnisse ohne SO ₂ -Einfluss	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	30	29
Minimalwert	0,410	0,410
Mittelwert	0,5443	0,5358
Median	0,5470	0,5460
Maximalwert	0,790	0,660
Standardabweichung (s _L)	0,074	0,058
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,034	0,034
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	(0,029)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089	0,089
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,18	1,73
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	(2,58)	(2,04)
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,83	0,65
Quotient (u _M /s _H)	0,40	0,32
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	(0,47)	(0,38)
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,15	0,12

Die Bewertung der Laborergebnisse erfolgte auf der Basis der Zielstandardabweichung nach Horwitz

6.15.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	8	0,577	0,0886
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	1	0,546	
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	2	0,528	0,0922
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	1	0,600	
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	1	0,610	
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	3	0,527	0,0400
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	3	0,549	0,0902
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	15	0,529	0,0922
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	4	0,549	0,0362
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,505	
Büchi SO ₂ korr.	Destillationsapparat Büchi,			
	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,548	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	31	0,536	0,0662
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,556	0,0790
IC	Ionenchromatographie (fehlerhafte Zuordnung)	1	0,540	
Wasserdampfdest.	Wasserdampfdestillation (ohne nähere Angaben; Eigenbau-Apparatur)	1	0,680	



6.16 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

6.16.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: alle herkömmlichen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,442	-0,018	-0,62	
02	HPLC	0,439	-0,021	-0,72	
05	enzymat. autom.	0,469	0,009	0,31	
06	HPLC	0,550	0,090	3,08	
10	enzymat. autom.	0,470	0,010	0,34	
12	enzymat. autom.	0,450	-0,010	-0,34	
14	enzymat. autom.	0,510	0,050	1,71	
15	enzymat. autom.	0,360	-0,100	-3,42	
20	HPLC	0,450	-0,010	-0,34	
22	HPLC	0,355	-0,105	-3,59	
24	HPLC	0,600	0,140	4,79	
29	enzymat. autom.	0,450	-0,010	-0,34	
31	enzymat. autom.	0,460	0,000	0,00	
38	enzymat. autom.	0,422	-0,038	-1,30	
39	HPLC	0,524	0,064	2,19	
41	enzymat. autom.	0,430	-0,030	-1,03	
42	enzymat. autom.	0,460	0,000	0,00	
44	enzymat. autom.	0,490	0,030	1,03	
45	enzymat. autom.	0,560	0,100	3,42	
47	enzymat. autom.	0,547	0,087	2,97	
48	enzymat. autom.	0,430	-0,030	-1,03	
50	enzymat. autom.	0,464	0,004	0,14	
53	enzymat. autom.	0,550	0,090	3,08	
56	enzymat. autom.	0,458	-0,002	-0,07	
58	enzymat. autom.	0,420	-0,040	-1,37	
59	enzymat. autom.	0,520	0,060	2,05	
61	enzymat. autom.	0,500	0,040	1,37	
70	enzymat. autom.	0,420	-0,040	-1,37	
90	HPLC	0,495	0,035	1,20	
92	enzymat. autom.	0,440	-0,020	-0,68	
95	enzymat. autom.	0,470	0,010	0,34	
111	NMR	0,432	-0,028	-0,96	
112	NMR	0,452	-0,008	-0,27	
113	NMR	0,473	0,013	0,43	
114	NMR	0,463	0,003	0,09	
115	NMR	0,420	-0,040	-1,37	
116	NMR	0,453	-0,007	-0,23	
208	FTIR	0,430	-0,030	-1,03	
211	FTIR	0,580	0,120	4,10	
222	FTIR	0,810	0,350	11,97	(*)
241	FTIR	0,460	0,000	0,00	
259	FTIR	0,980	0,520	17,78	(*)
260	FTIR	0,500	0,040	1,37	

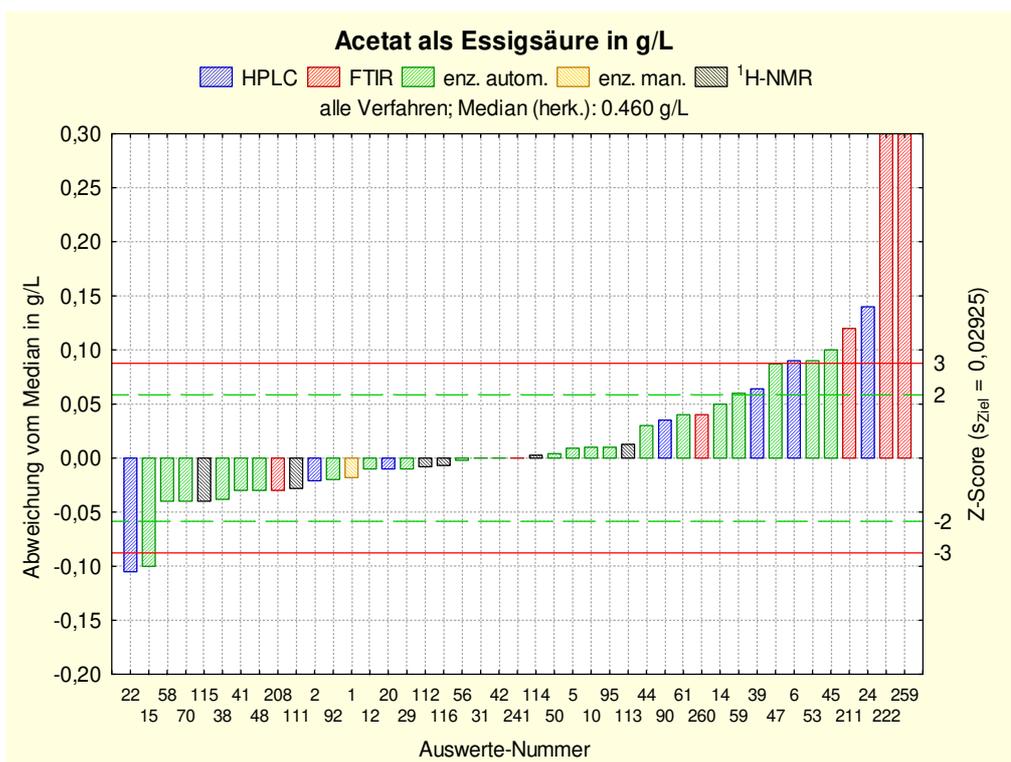
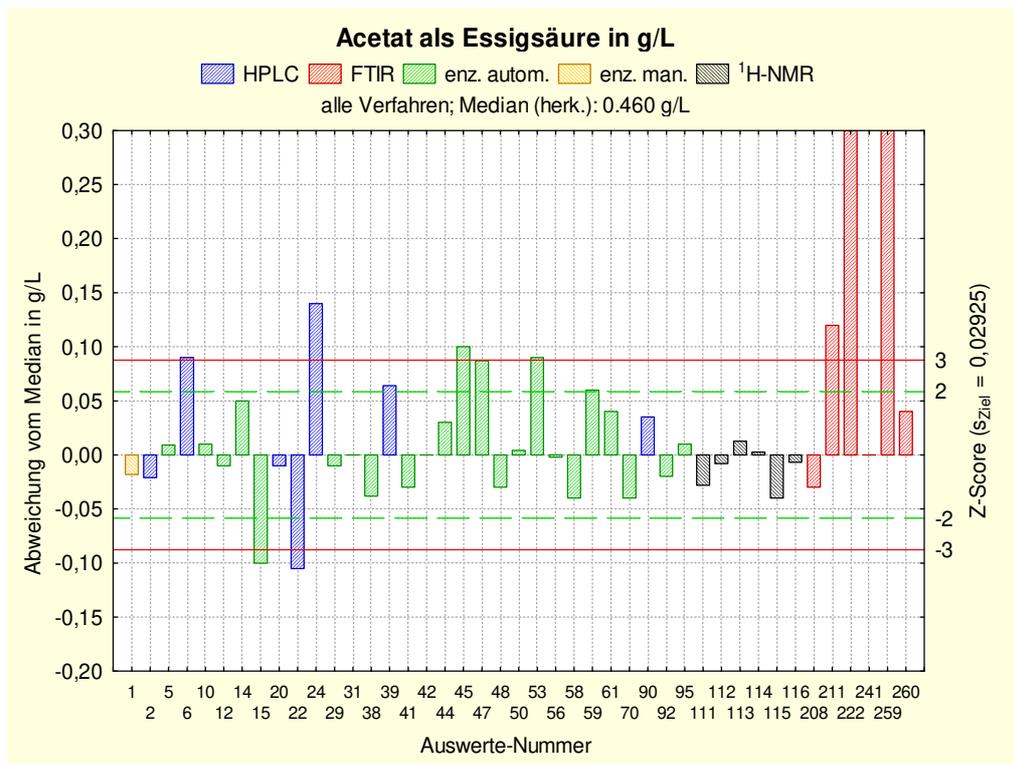
(*) Die markierten Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

6.16.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	31
Minimalwert	0,355
Mittelwert	0,471
Median	0,460
Maximalwert	0,600
Standardabweichung (s_L)	0,056
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{u}\ FTIR}$)	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,90
Quotient (u_M/s_H)	0,34

6.16.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	0,4884	0,0901
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	23	0,4668	0,0457
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,4420	
	HPLC, enzymatisch, manuell + ¹ H-NMR	31	0,4713	0,0538
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,6149	0,2356
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	6	0,4488	0,0222



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

6.17.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Bewertungsbasis: Verfahren außer NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,311	0,001	0,05	0,04	
02	HPLC	0,613	0,303	14,49	11,76	(*)
05	HPLC	0,380	0,070	3,35	2,72	
18	IC	<NG				
20	HPLC	0,310	0,000	0,00	0,00	
21	HPLC	0,360	0,050	2,39	1,94	
22	HPLC	0,281	-0,029	-1,39	-1,13	
24	HPLC	0,280	-0,030	-1,43	-1,16	
26	HPLC	0,500	0,190	9,08	7,37	(*)
39	HPLC	0,315	0,005	0,24	0,19	
59	HPLC	0,370	0,060	2,87	2,33	
90	HPLC	0,310	0,000	0,00	0,00	
92	HPLC	0,306	-0,004	-0,19	-0,16	
100	HPLC	0,300	-0,010	-0,48	-0,39	
111	NMR	0,312	0,002	0,12	0,10	
112	NMR	0,331	0,021	0,99	0,80	
113	NMR	0,333	0,023	1,10	0,89	
114	NMR	0,308	-0,002	-0,12	-0,10	
115	NMR	0,310	0,000	0,00	0,00	
116	NMR	0,335	0,025	1,18	0,96	

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

6.17.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,282	-0,018	-0,88	-0,71	
04	enz.(L-), autom.	0,290	-0,010	-0,49	-0,39	
05	enz.(L-), autom.	0,323	0,023	1,13	0,90	
09	enz.(L-), autom.	0,303	0,003	0,15	0,12	
10	enz.(L-), autom.	0,670	0,370	18,19	14,50	(*)
12	enz.(L-), autom.	0,300	0,000	0,00	0,00	
14	enz.(L-), autom.	0,300	0,000	0,00	0,00	
15	enz.(L-), autom.	0,300	0,000	0,00	0,00	
29	enz.(L-), autom.	0,302	0,002	0,10	0,08	
31	enz.(L-), autom.	0,340	0,040	1,97	1,57	
38	enz.(L-), autom.	0,376	0,076	3,74	2,98	
40	enz.(L-), autom.	0,300	0,000	0,00	0,00	
41	enz.(L-), autom.	0,390	0,090	4,42	3,53	
42	enz.(L-), autom.	0,330	0,030	1,47	1,18	
44	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
45	enz.(L-), autom.	0,320	0,020	0,98	0,78	
47	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
48	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
50	enz.(L-), autom.	0,345	0,045	2,21	1,76	
53	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
55	enz.(L-), autom.	0,220	-0,080	-3,93	-3,13	
56	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
57	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
58	enz.(L-), autom.	0,290	-0,010	-0,49	-0,39	
59	enz.(L-), autom.	0,330	0,030	1,47	1,18	
61	enz.(L-), autom.	0,300	0,000	0,00	0,00	
65	enz.(L-) Hand	0,333	0,033	1,64	1,30	
70	enz.(L-), autom.	0,290	-0,010	-0,49	-0,39	
82	enz.(L-) Hand	0,325	0,025	1,23	0,98	
90	enz.(L-), autom.	0,340	0,040	1,97	1,57	
92	enz.(L-), autom.	0,320	0,020	0,98	0,78	
95	enz.(L-), autom.	0,280	-0,020	-0,98	-0,78	
106	enz.(L-) Hand	0,250	-0,050	-2,46	-1,96	

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

6.17.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,030	-0,280			(*)
202	FTIR	<= 0				(*)
203	FTIR	0,260	-0,050			
204	FTIR	0,030	-0,280			(*)
205	FTIR	0,170	-0,140			(***)
207	FTIR	2,100	1,790			(*)
208	FTIR	0,620	0,310			(*)
209	FTIR	<= 0				(*)
210	FTIR	0,430	0,120			
211	FTIR	0,230	-0,080			
212	FTIR	<= 0				(*)
214	FTIR	0,200	-0,110			
215	FTIR	2,000	1,690			(*)
216	FTIR	<= 0				(*)
217	FTIR	<= 0				(*)
218	FTIR	0,100	-0,210			(*)
219	FTIR	0,500	0,190			(*)
220	FTIR	<= 0				(*)
221	FTIR	0,230	-0,080			
222	FTIR	< 0,5				
223	FTIR	<= 0				
224	FTIR	0,060	-0,250			(*)
225	FTIR	0,010	-0,300			(*)
226	FTIR	0,200	-0,110			
227	FTIR	-0,320	-0,630			(*)
228	FTIR	<= 0				
229	FTIR	-0,310	-0,620			(*)
231	FTIR	-0,210	-0,520			(*)
232	FTIR	-0,170	-0,480			(*)
234	FTIR	0,090	-0,220			(*)
236	FTIR	<= 0				
237	FTIR	0,020	-0,290			(*)
240	FTIR	-0,110	-0,420			(*)
241	FTIR	0,100	-0,210			(*)
242	FTIR	-0,140	-0,450			(*)
243	FTIR	0,400	0,090			
244	FTIR	0,030	-0,280			(*)
245	FTIR	0,140	-0,170			(*)
246	FTIR	0,100	-0,210			(*)
247	FTIR	0,590	0,280			(*)
249	FTIR	0,300	-0,010			
250	FTIR	-0,020	-0,330			(*)
252	FTIR	<= 0				
254	FTIR	-0,100	-0,410			(*)
255	FTIR	<= 0				
256	FTIR	-0,510	-0,820			(*)
257	FTIR	-0,220	-0,530			(*)
258	FTIR	<= 0	-0,310			(*)
259	FTIR	0,300	-0,010			
260	FTIR	0,100	-0,210			(*)
261	FTIR	<= 0				
262	FTIR	<= 0				
265	FTIR	<= 0				
266	FTIR	1,190	0,880			(*)
267	FTIR	0,400	0,090			
268	FTIR	0,170	-0,140			(***)
269	FTIR	<= 0				
270	FTIR	0,580	0,270			(*)
271	FTIR	-0,240	-0,550			(*)
272	FTIR	0,560	0,250			(*)
273	FTIR	-0,280	-0,590			(*)
275	FTIR	-0,160	-0,470			(*)

(*) 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-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	<= 0				
279	FTIR	0,500	0,190			(*)
280	FTIR	0,530	0,220			(*)
281	FTIR	0,580	0,270			(*)
282	FTIR	0,100	-0,210			(*)
284	FTIR	0,400	0,090			
285	FTIR	-0,050	-0,360			(*)
287	FTIR	<= 0				
288	FTIR	<= 0				
320	FTIR	<= 0				
337	FTIR	<= 0				
365	FTIR	<= 0				

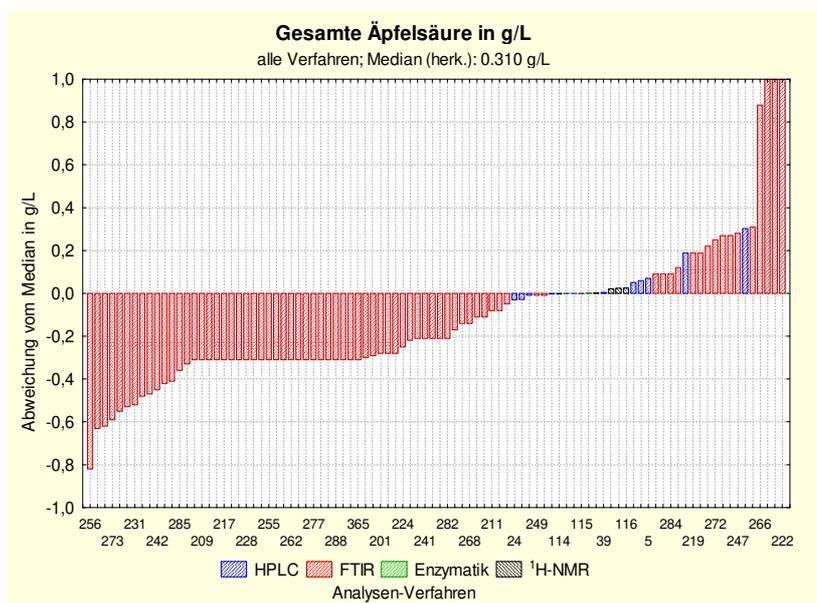
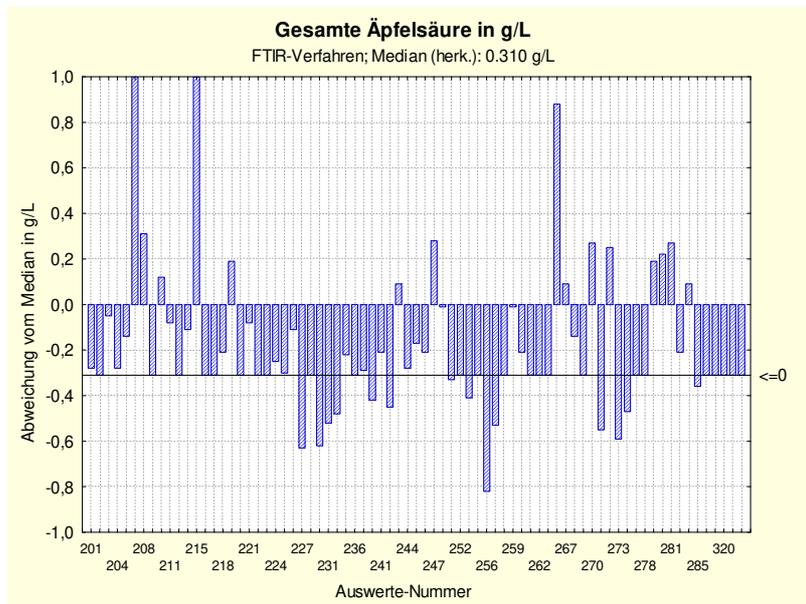
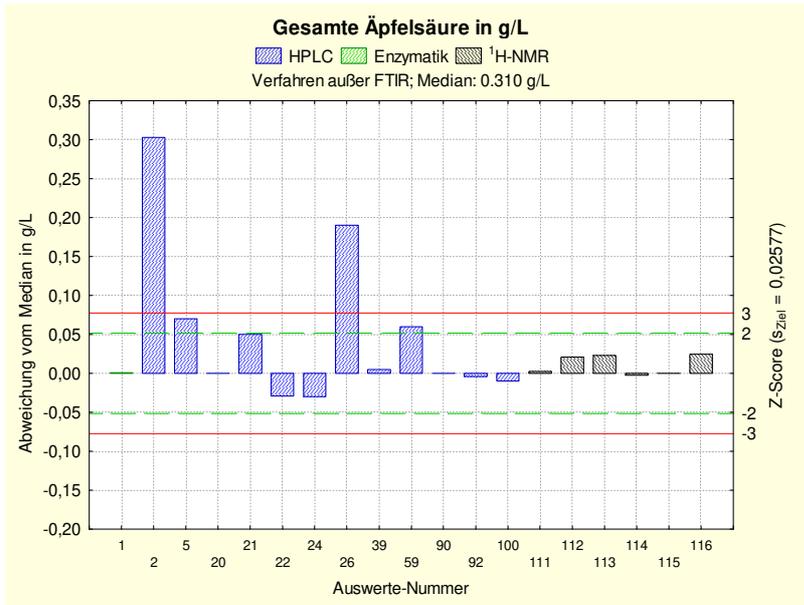
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

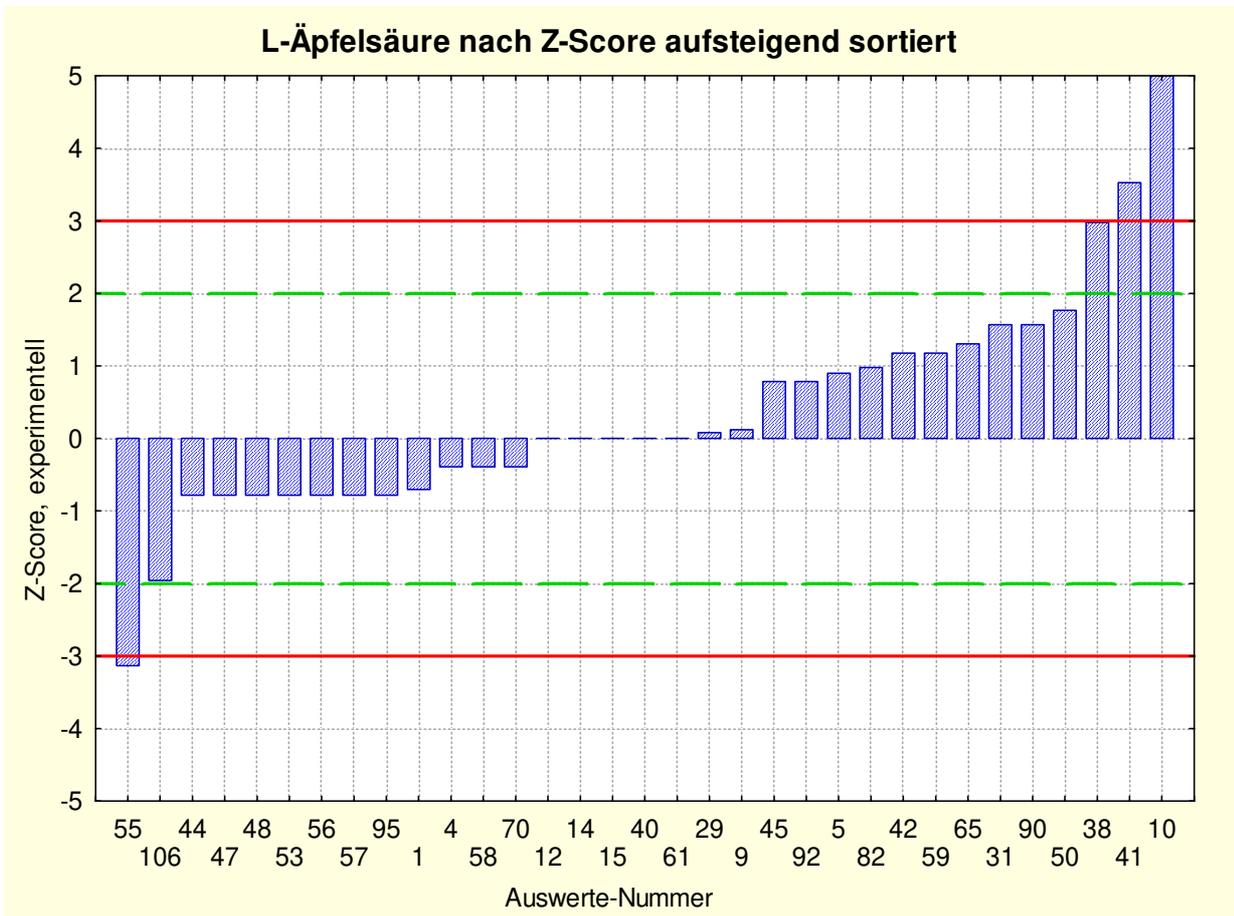
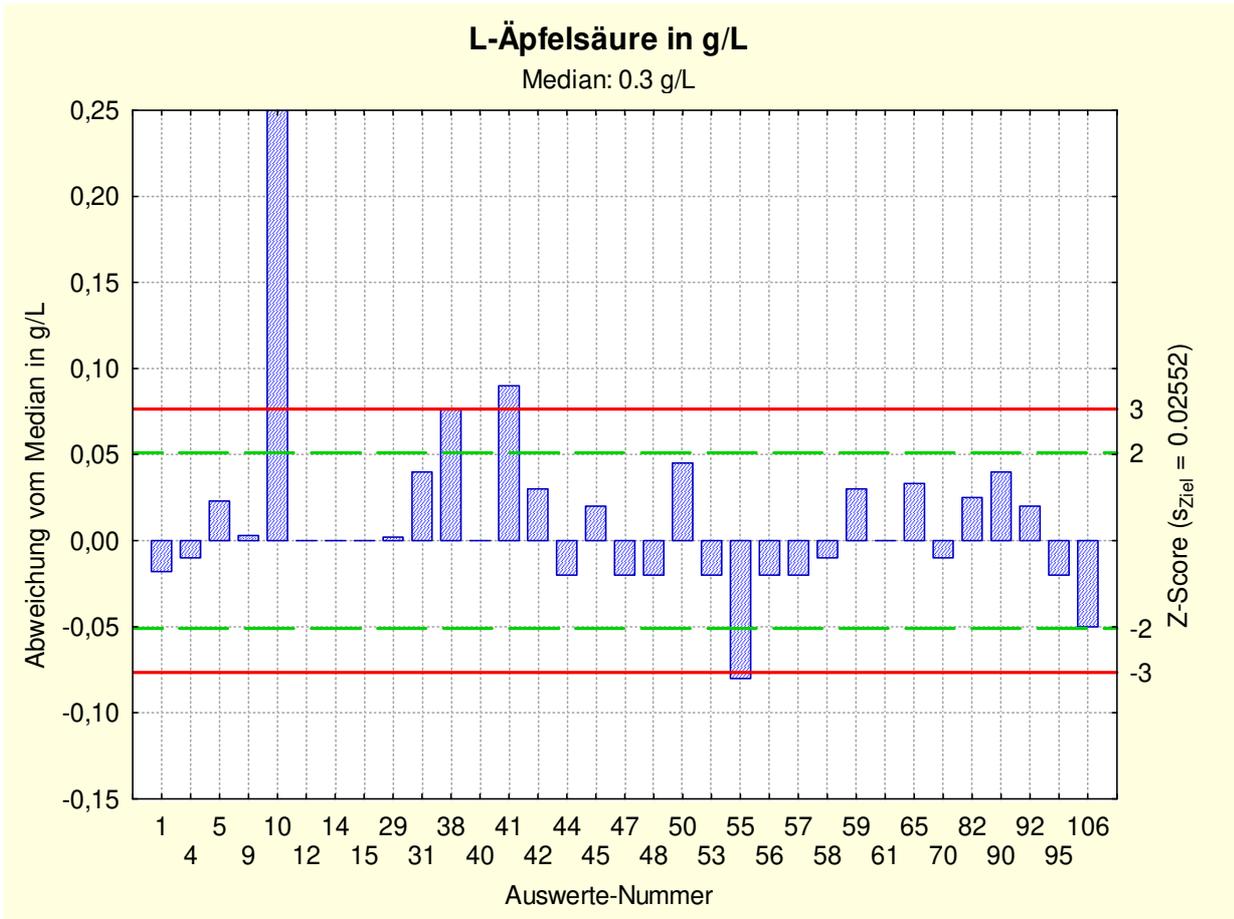
6.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L für:	Gesamte Äpfelsäure alle Daten ohne NMR	L-Äpfelsäure alle Daten
Gültige Werte	11	32
Minimalwert	0,28	0,22
Mittelwert	0,320	0,305
Median	0,310	0,300
Maximalwert	0,38	0,39
Standardabweichung (s_L)	0,034	0,034
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,010	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,021	0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,026	0,026
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü FTIR}$)	(0,218)	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,64	1,66
Quotient (s_L/s_{exp})	1,33	1,33
Quotient ($s_L/s_{Ü FTIR}$)	(0,16)	
Quotient (u_M/s_H)	0,49	0,29
Quotient ($u_M/s_{exp herk.}$)	0,40	0,23
Quotient ($u_M/s_{Ü FTIR}$)	(0,05)	

6.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	0,339	0,061
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	0,311	
	herkömmliche Verfahren	13	0,335	0,053
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	0,105	0,256
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	0,321	0,014
enz.(L-), autom.	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	29	0,307	0,030
enz.(L-) Hand	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	4	0,298	0,044
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	33	0,306	0,031





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,54	0,048	0,39	
02	HPLC	3,09	0,595	4,84	
04	enzymat. autom.	2,51	0,015	0,12	
05	enzymat. autom.	2,67	0,175	1,42	
09	enzymat. autom.	2,40	-0,094	-0,76	
18	IC	2,63	0,135	1,10	
20	HPLC	2,33	-0,165	-1,34	
21	HPLC	1,64	-0,855	-6,95	(**)
22	HPLC	2,55	0,054	0,44	
24	HPLC	2,24	-0,255	-2,07	
26	HPLC	2,70	0,205	1,67	
39	HPLC	2,36	-0,135	-1,10	
59	HPLC	2,41	-0,085	-0,69	
65	enzymat. Hand	2,53	0,032	0,26	
70	enzymat. autom.	2,48	-0,015	-0,12	
90	HPLC	2,44	-0,055	-0,45	
92	HPLC	3,23	0,738	6,00	(**)
95	enzymat. autom.	2,59	0,095	0,77	
100	HPLC	2,00	-0,495	-4,02	
106	enzymat. Hand	2,43	-0,065	-0,53	
111	NMR	2,27	-0,225	-1,83	
112	NMR	2,31	-0,180	-1,46	
113	NMR	2,36	-0,132	-1,07	
114	NMR	2,36	-0,134	-1,09	
115	NMR	2,52	0,025	0,20	
116	NMR	2,35	-0,144	-1,17	

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

6.18.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,00	0,007	0,07	0,07	
04	enz.(L-) autom.	1,94	-0,057	-0,56	-0,53	
05	enz.(L-) autom.	2,11	0,113	1,11	1,06	
09	enz.(L-) autom.	1,96	-0,041	-0,40	-0,38	
10	enz.(L-) autom.	2,04	0,043	0,42	0,40	
12	enz.(L-) autom.	1,90	-0,097	-0,95	-0,91	
14	enz.(L-) autom.	2,09	0,089	0,87	0,83	
15	enz.(L-) autom.	2,10	0,103	1,01	0,97	
29	enz.(L-) autom.	2,26	0,262	2,57	2,46	
31	enz.(L-) autom.	2,10	0,103	1,01	0,97	
38	enz.(L-) autom.	1,88	-0,117	-1,15	-1,10	
40	enz.(L-) autom.	1,56	-0,437	-4,29	-4,10	
41	enz.(L-) autom.	1,84	-0,157	-1,54	-1,47	
42	enz.(L-) autom.	2,14	0,143	1,40	1,34	
44	enz.(L-) autom.	2,03	0,033	0,32	0,31	
45	enz.(L-) autom.	2,47	0,473	4,65	4,43	
47	enz.(L-) autom.	1,91	-0,087	-0,85	-0,82	
48	enz.(L-) autom.	1,86	-0,137	-1,35	-1,28	
50	enz.(L-) autom.	1,96	-0,037	-0,36	-0,35	
53	enz.(L-) autom.	2,55	0,553	5,43	5,18	(**)
55	enz.(L-) autom.	1,92	-0,077	-0,76	-0,72	
56	enz.(L-) autom.	1,92	-0,077	-0,76	-0,72	
57	enz.(L-) autom.	2,25	0,253	2,49	2,37	
58	enz.(L-) autom.	1,91	-0,087	-0,85	-0,82	
59	enz.(L-) autom.	1,64	-0,357	-3,51	-3,35	
61	enz.(L-) autom.	1,10	-0,897	-8,81	-8,41	(**)
65	enz.(L-) Hand	2,01	0,011	0,11	0,10	
70	enz.(L-) autom.	1,99	-0,007	-0,07	-0,07	
82	enz.(L-) Hand	2,12	0,119	1,17	1,12	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse für L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
90	enz.(L-) autom.	2,02	0,028	0,28	0,26	
95	enz.(L-) autom.	2,04	0,043	0,42	0,40	
106	enz.(L-) Hand	1,92	-0,077	-0,76	-0,72	

6.18.3 FTIR-Laborergebnisse 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	2,43	-0,065	-0,53	-0,31	
202	FTIR	2,26	-0,235	-1,91	-1,12	
203	FTIR	2,24	-0,255	-2,07	-1,22	
204	FTIR	2,61	0,115	0,94	0,55	
205	FTIR	2,48	-0,015	-0,12	-0,07	
207	FTIR	2,30	-0,195	-1,59	-0,93	
208	FTIR	2,45	-0,045	-0,37	-0,22	
209	FTIR	1,90	-0,595	-4,84	-2,85	
210	FTIR	2,02	-0,475	-3,86	-2,27	
211	FTIR	1,94	-0,555	-4,51	-2,66	
212	FTIR	1,97	-0,525	-4,27	-2,51	
214	FTIR	2,60	0,105	0,85	0,50	
215	FTIR	2,00	-0,495	-4,02	-2,37	
216	FTIR	1,84	-0,655	-5,33	-3,13	
217	FTIR	2,36	-0,135	-1,10	-0,65	
218	FTIR	2,32	-0,175	-1,42	-0,84	
219	FTIR	2,90	0,405	3,29	1,94	
220	FTIR	2,41	-0,085	-0,69	-0,41	
221	FTIR	2,27	-0,225	-1,83	-1,08	
222	FTIR	1,51	-0,985	-8,01	-4,71	
223	FTIR	2,10	-0,395	-3,21	-1,89	
224	FTIR	2,08	-0,415	-3,37	-1,99	
225	FTIR	2,22	-0,275	-2,24	-1,32	
226	FTIR	2,60	0,105	0,85	0,50	
227	FTIR	2,02	-0,475	-3,86	-2,27	
228	FTIR	2,61	0,115	0,94	0,55	
229	FTIR	2,03	-0,465	-3,78	-2,22	
231	FTIR	2,49	-0,005	-0,04	-0,02	
232	FTIR	2,16	-0,335	-2,72	-1,60	
234	FTIR	2,55	0,055	0,45	0,26	
236	FTIR	2,00	-0,495	-4,02	-2,37	
237	FTIR	1,84	-0,655	-5,33	-3,13	
240	FTIR	2,18	-0,315	-2,56	-1,51	
241	FTIR	1,97	-0,525	-4,27	-2,51	
242	FTIR	2,86	0,365	2,97	1,75	
243	FTIR	2,10	-0,395	-3,21	-1,89	
244	FTIR	1,90	-0,595	-4,84	-2,85	
245	FTIR	2,15	-0,345	-2,81	-1,65	
246	FTIR	2,30	-0,195	-1,59	-0,93	
247	FTIR	2,17	-0,325	-2,64	-1,56	
249	FTIR	2,50	0,005	0,04	0,02	
250	FTIR	1,77	-0,725	-5,89	-3,47	
252	FTIR	2,09	-0,405	-3,29	-1,94	
254	FTIR	2,10	-0,395	-3,21	-1,89	
255	FTIR	2,00	-0,495	-4,02	-2,37	
256	FTIR	2,25	-0,245	-1,99	-1,17	
257	FTIR	2,29	-0,205	-1,67	-0,98	
259	FTIR	3,10	0,605	4,92	2,89	
260	FTIR	1,90	-0,595	-4,84	-2,85	
261	FTIR	2,00	-0,495	-4,02	-2,37	
262	FTIR	1,80	-0,695	-5,65	-3,33	
265	FTIR	2,60	0,105	0,85	0,50	
266	FTIR	2,56	0,065	0,53	0,31	
267	FTIR	1,90	-0,595	-4,84	-2,85	
268	FTIR	2,21	-0,285	-2,32	-1,36	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
269	FTIR	1,99	-0,505	-4,11	-2,42	
270	FTIR	2,08	-0,415	-3,37	-1,99	
271	FTIR	1,80	-0,695	-5,65	-3,33	
272	FTIR	1,95	-0,545	-4,43	-2,61	
273	FTIR	2,22	-0,275	-2,24	-1,32	
275	FTIR	1,93	-0,565	-4,59	-2,70	
276	FTIR	2,30	-0,195	-1,59	-0,93	
277	FTIR	2,08	-0,415	-3,37	-1,99	
278	FTIR	1,29	-1,205	-9,80	-5,77	(***)
279	FTIR	2,90	0,405	3,29	1,94	
280	FTIR	2,16	-0,335	-2,72	-1,60	
281	FTIR	1,98	-0,515	-4,19	-2,46	
282	FTIR	2,50	0,005	0,04	0,02	
284	FTIR	2,00	-0,495	-4,02	-2,37	
285	FTIR	2,20	-0,295	-2,40	-1,41	
287	FTIR	2,33	-0,165	-1,34	-0,79	
288	FTIR	2,34	-0,155	-1,26	-0,74	
320	FTIR	2,20	-0,295	-2,40	-1,41	
337	FTIR	2,09	-0,405	-3,29	-1,94	
365	FTIR	2,50	0,005	0,04	0,02	

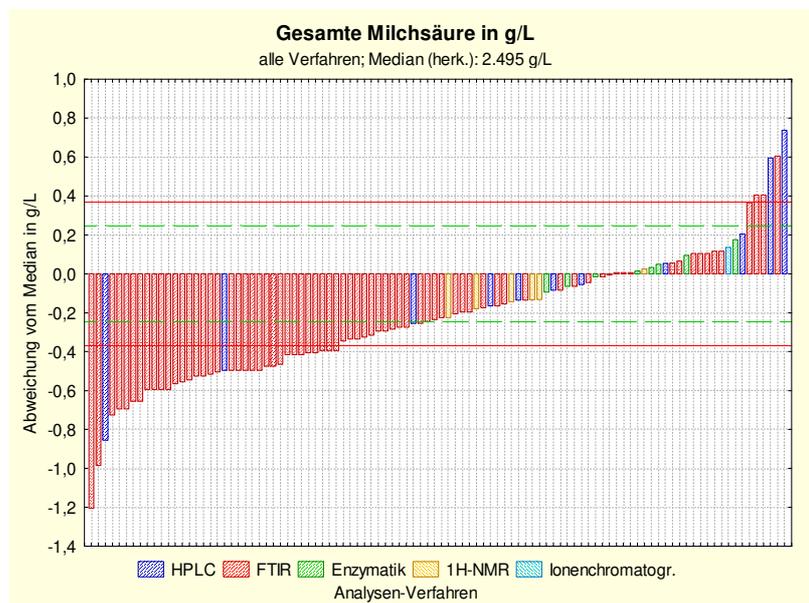
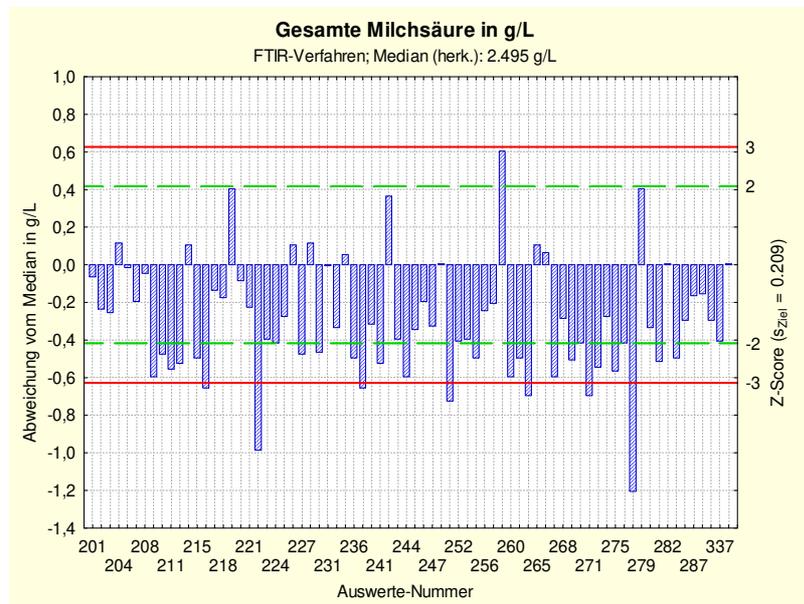
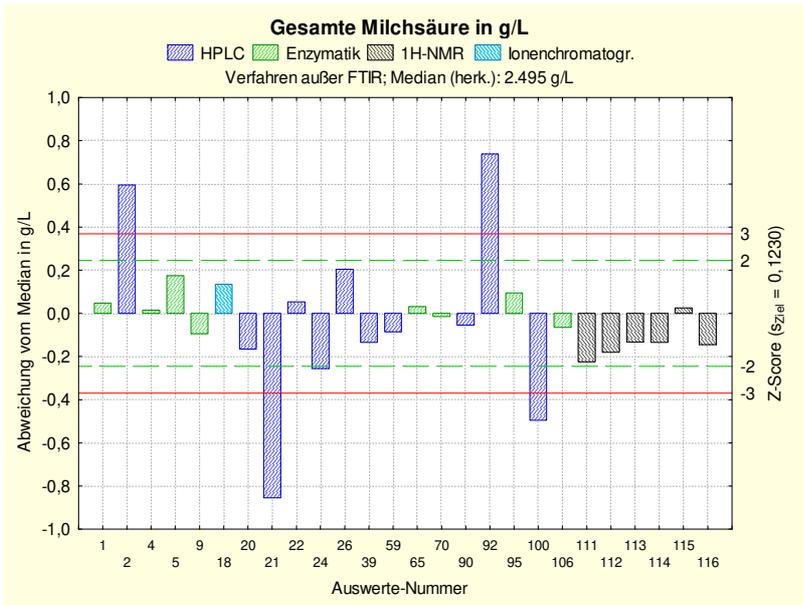
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

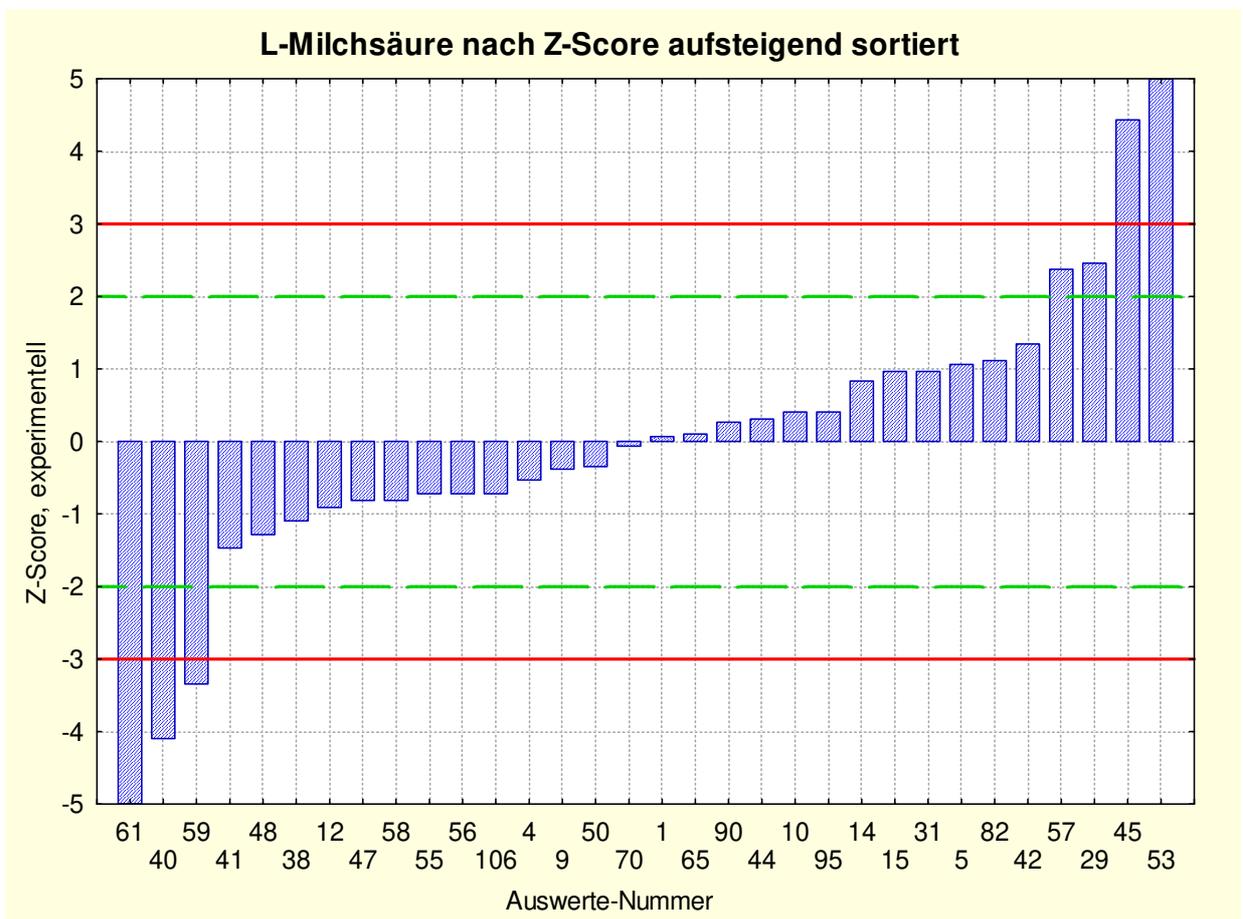
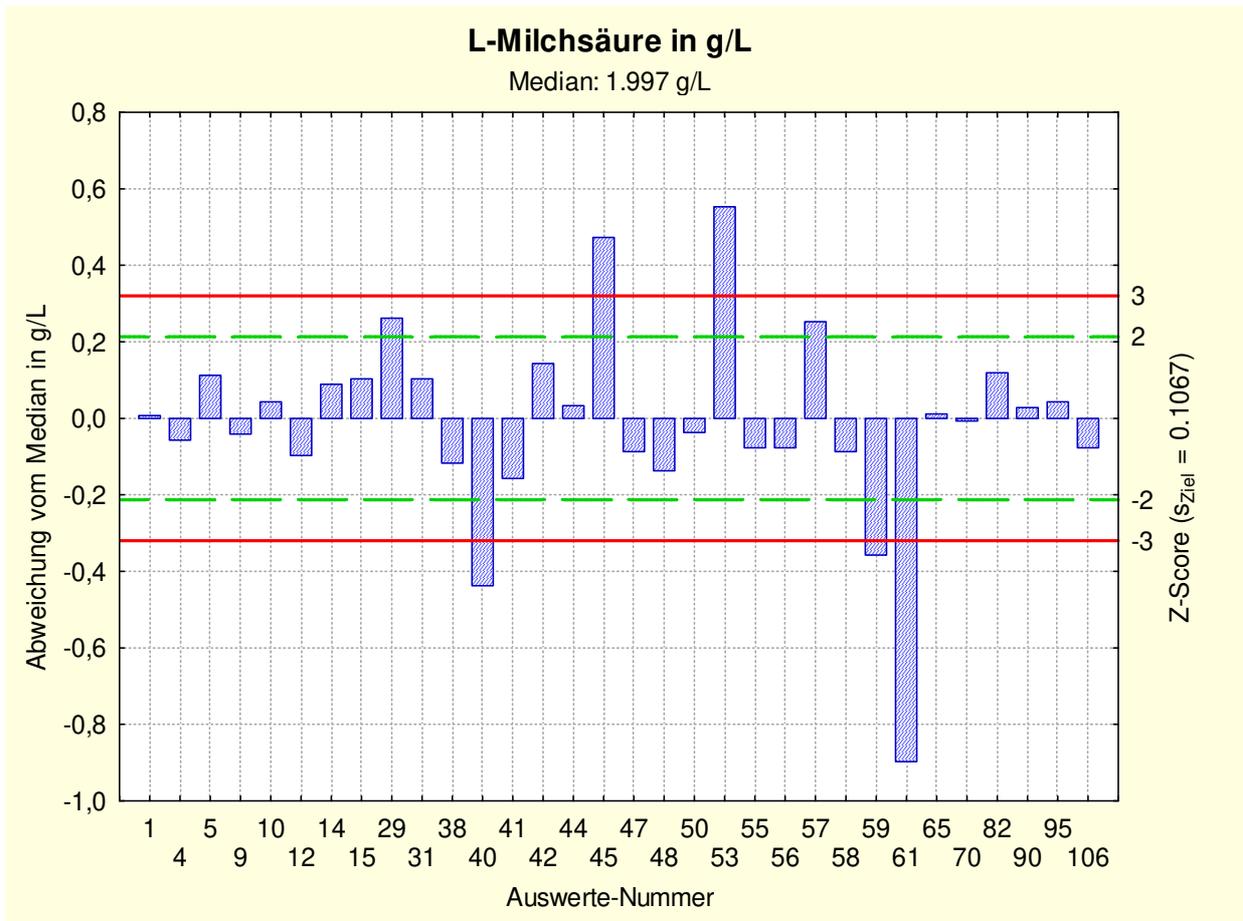
6.18.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse in g/L für :	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure	
	alle Werte	ber. Werte	alle Werte	ber. Werte
Gültige Werte	20	18	32	30
Minimalwert	1,64	2,00	1,10	1,56
Mittelwert	2,489	2,494	1,985	1,996
Median	2,495	2,495	1,997	1,997
Maximalwert	3,23	3,09	2,55	2,47
Standardabweichung (s _L)	0,334	0,222	0,252	0,172
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,075	0,052	0,045	0,031
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,123	0,123	0,102	0,102
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,209	0,209		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	2,71	1,81	2,48	1,69
Quotient (s _L /s _{exp})			2,36	1,62
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,60	1,06	0,34	0,22
Quotient (u _M /s _H)	0,61	0,43	0,44	0,31
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)			0,42	0,30
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,36	0,25		

6.18.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	2,457	0,455
IC	Ionenchromatographie	1	2,630	
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	2,530	0,117
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	2,508	0,054
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	20	2,488	0,203
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	74	2,190	0,288
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,354	0,071
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	28	1,996	0,175
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	4	2,009	0,085
	alle Verfahren L-Milchsäure	32	1,997	0,150





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	Acetaldehyd/potent.	300	2,0	-14,00	-8,30	(*)
10	Glyoxal/Stärke	20	17,0	1,00	0,59	
11	Glyoxal/potentiometr.	20	13,0	-3,00	-1,78	
12	Glyoxal/potentiometr.		15,0	-1,00	-0,59	
13	Glyoxal/potentiometr.	20	15,0	-1,00	-0,59	
14	Glyoxal/potentiometr.	12	16,0	0,00	0,00	
15	Glyoxal/Stärke	5	16,0	0,00	0,00	
16	Propionaldehyd/Stärke	20	32,0	16,00	9,49	(*)
17	Glyoxal/Stärke	20	14,0	-2,00	-1,19	
18	Glyoxal/potentiometr.	20	10,6	-5,40	-3,20	
19	Glyoxal/Stärke	20	14,0	-2,00	-1,19	
20	Glyoxal/Stärke	20	16,0	0,00	0,00	
21	Glyoxal/potentiometr.	20	19,0	3,00	1,78	
22	Glyoxal/Stärke	20	14,0	-2,00	-1,19	
23	Glyoxal/Stärke	20	16,0	0,00	0,00	
24	Glyoxal/potentiometr.		18,0	2,00	1,19	
25	Glyoxal/potentiometr.	25	11,5	-4,54	-2,69	
26	Glyoxal/potentiometr.	5	18,0	2,00	1,19	
28	Glyoxal/Stärke	20	21,0	5,00	2,96	
29	Glyoxal/Stärke	20	24,0	8,00	4,74	
30	Glyoxal/potentiometr.	12	5,0	-11,00	-6,52	(*)
31	Glyoxal/Stärke	20	16,0	0,00	0,00	
32	Propionaldehyd/Stärke	15	17,0	1,00	0,59	
33	Glyoxal/potentiometr.	10	10,0	-6,00	-3,56	
34	Glyoxal/Stärke	20	15,0	-1,00	-0,59	
35	Glyoxal/Stärke	20	18,0	2,00	1,19	
36	Glyoxal/Stärke		18,0	2,00	1,19	
37	Glyoxal/potentiometr.	20	33,0	17,00	10,08	(*)
38	k. A.	20	6,0	-10,00	-5,93	(*)
39	Glyoxal/potentiometr.	15-20	12,1	-3,90	-2,31	
40	Glyoxal/Stärke	20	13,0	-3,00	-1,78	
41	Glyoxal/Stärke	30	17,0	1,00	0,59	
42	Glyoxal/Stärke	20	15,0	-1,00	-0,59	
43	Glyoxal/Stärke	20	14,0	-2,00	-1,19	
44	Propionaldehyd/Stärke	10	21,0	5,00	2,96	
45	Glyoxal/potentiometr.	20	8,0	-8,00	-4,74	
46	Glyoxal/Stärke	15	14,0	-2,00	-1,19	
48	Glyoxal/Stärke	10	21,0	5,00	2,96	
49	Glyoxal/Stärke	20	13,0	-3,00	-1,78	
50	Glyoxal/Stärke	20	10,0	-6,00	-3,56	
51	Glyoxal/Stärke	20	8,0	-8,00	-4,74	
52	Propionaldehyd/Stärke	20	20,0	4,00	2,37	
55	Glyoxal/Stärke	20	11,0	-5,00	-2,96	
56	Glyoxal/MTT	30	6,6	-9,40	-5,57	(*)
58	Glyoxal/potentiometr.	20	12,0	-4,00	-2,37	
59	Acetaldehyd/potent.	20	17,1	1,10	0,65	
60	Glyoxal/potentiometr.	20	12,0	-4,00	-2,37	
61	Glyoxal/Stärke	5	11,0	-5,00	-2,96	
62	Glyoxal/Stärke		20,0	4,00	2,37	
65	Glyoxal/Stärke	5	24,0	8,00	4,74	
66	Glyoxal/Stärke	20	17,0	1,00	0,59	
67	Glyoxal/potentiometr.	5	11,0	-5,00	-2,96	
69	Glyoxal/potentiometr.	10	12,0	-4,00	-2,37	
70	Glyoxal/potentiometr.	10	21,9	5,88	3,49	
72	Glyoxal/potentiometr.		34,0	18,00	10,67	(*)
74	Glyoxal/Stärke	5	16,8	0,80	0,47	
75	Glyoxal/Stärke	5	10,0	-6,00	-3,56	
77	Glyoxal/Stärke	20	19,0	3,00	1,78	
78	Glyoxal/Stärke	20	6,0	-10,00	-5,93	(*)
79	Glyoxal/potentiometr.	5	20,0	4,00	2,37	
80	Glyoxal/Stärke	5	23,0	7,00	4,15	
82	Acetaldehyd/Stärke	20	28,0	12,00	7,12	(*)

(*) 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
84	Glyoxal/potentiometr.	5	15,0	-1,00	-0,59	
85	Glyoxal/potentiometr.	20	24,0	8,00	4,74	
86	Glyoxal/potentiometr.	10	17,0	1,00	0,59	
100	Glyoxal/Stärke		15,0	-1,00	-0,59	
103	Glyoxal/Stärke	20	22,0	6,00	3,56	
106	Glyoxal/Stärke	5	22,0	6,00	3,56	
121	Acetaldehyd/Stärke	10	17,0	1,00	0,59	
122	Glyoxal/potentiometr.	10	9,0	-7,00	-4,15	
123	Propionaldehyd/Stärke	10	23,0	7,00	4,15	
124	Glyoxal/Stärke	5	21,0	5,00	2,96	
125	Propionaldehyd/Stärke	5	15,0	-1,00	-0,59	
126	Glyoxal/potentiometr.	10	7,0	-9,00	-5,34	(*)
127	Propionaldehyd/Stärke	10	18,0	2,00	1,19	
129	Glyoxal/potentiometr.	5	14,0	-2,00	-1,19	
130	Propionaldehyd/Stärke	5	28,0	12,00	7,12	(*)
131	Acetaldehyd/Stärke	10	18,0	2,00	1,19	
132	Glyoxal/potentiometr.	10	10,0	-6,00	-3,56	
133	k. A.		19,0	3,00	1,78	
134	k. A.	5	3,0	-13,00	-7,71	(*)
135	Glyoxal/Stärke	10	23,0	7,00	4,15	
136	Glyoxal/Stärke	30	22,6	6,60	3,91	
137	Glyoxal/potentiometr.	10	14,0	-2,00	-1,19	
138	Glyoxal/potentiometr.	10	15,0	-1,00	-0,59	
139	Glyoxal/Stärke	5	17,0	1,00	0,59	
140	Glyoxal/potentiometr.	20	9,0	-7,00	-4,15	
141	Propionaldehyd/Stärke	15	17,0	1,00	0,59	
143	Glyoxal/potentiometr.	15	10,0	-6,00	-3,56	
144	Acetaldehyd/Stärke	20	12,0	-4,00	-2,37	
145	Glyoxal/potentiometr.	15	15,0	-1,00	-0,59	
147	Acetaldehyd/Stärke	15	19,0	3,00	1,78	
148	Glyoxal/Stärke	5	26,0	10,00	5,93	(*)
149	Glyoxal/Stärke	5	25,0	9,00	5,34	(**)
150	Glyoxal/Stärke	20	22,0	6,00	3,56	
151	Glyoxal/potentiometr.	25	7,0	-9,00	-5,34	(*)
152	Propionaldehyd/Stärke	5	19,0	3,00	1,78	
153	Glyoxal/potentiometr.	20	17,0	1,00	0,59	
154	Glyoxal/Stärke	5	22,0	6,00	3,56	
155	Glyoxal/Stärke	5	18,0	2,00	1,19	

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

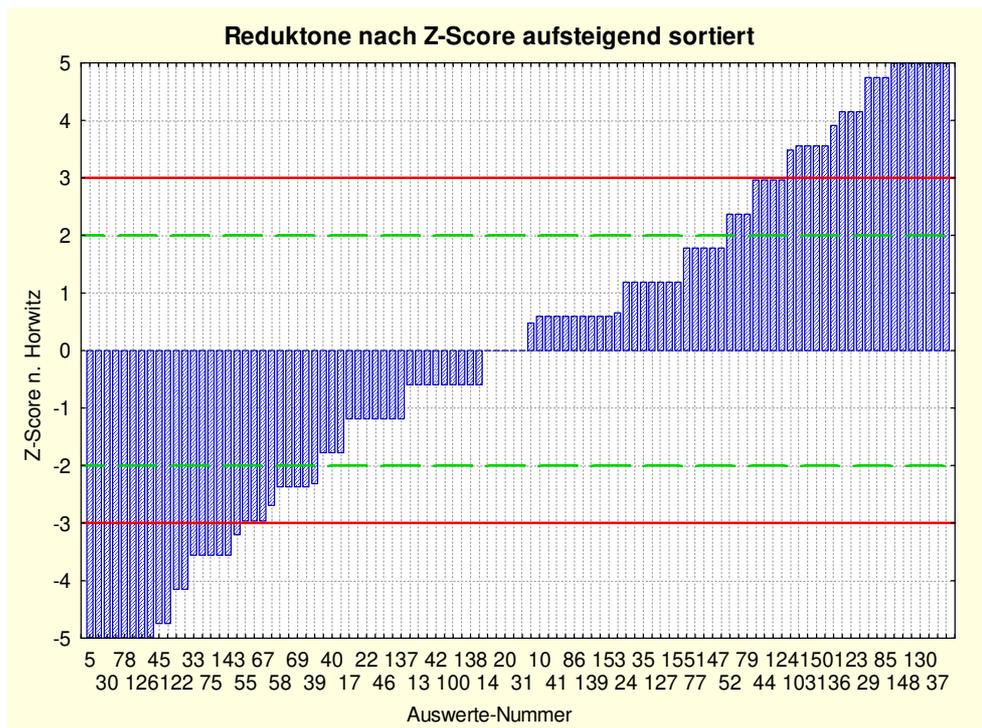
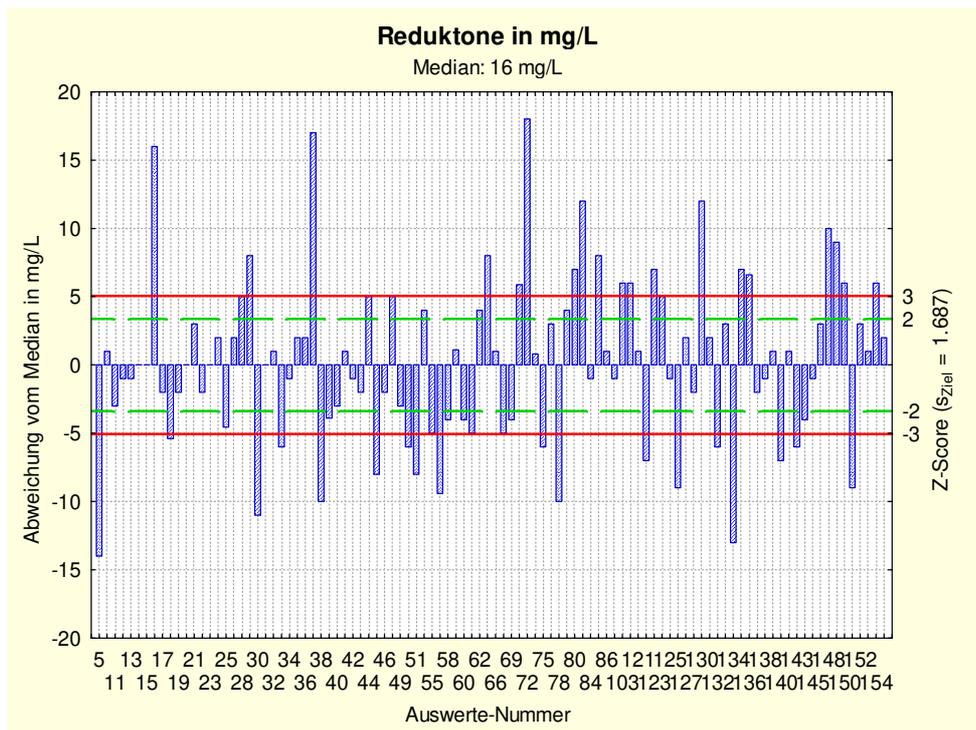
(**) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

6.19.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone in mg/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	85	84
Minimalwert	8,0	8,0
Mittelwert	16,27	16,16
Median	16,00	16,00
Maximalwert	25,0	24,0
Standardabweichung (s_L)	4,272	4,188
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,463	0,457
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,687	1,687
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})		
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,53	2,48
Quotient (s_L/s_{exp})		
Quotient (u_M/s_H)	0,27	0,27
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		

6.19.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	5	18,78	6,305
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	9,55	12,108
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	10	20,62	5,157
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	44	17,31	5,056
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	35	13,83	5,051
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Farbreaktion mit MTT	1	6,60	
k. A.	keine Verfahrensangabe	3	8,22	7,494
	alle Verfahren	100	16,09	5,825



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
01	LwK 6.2	54,4	20,90	6,61	(*)
04	LwK 6.3	44,0	10,50	3,32	
05	LwK 6.2	36,1	2,60	0,82	
06	LwK 6.2	38,1	4,60	1,46	
09	LwK 6.2	40,5	7,00	2,22	
10	LwK 6.4	25,0	-8,50	-2,69	
12	LwK 6.3	28,0	-5,50	-1,74	
45	LwK 6.3	32,0	-1,50	-0,47	
47	LwK 6.3	31,0	-2,50	-0,79	
53	LwK 6.3	29,0	-4,50	-1,42	
55	LwK 6.4	30,0	-3,50	-1,11	
56	LwK 6.4	37,1	3,60	1,14	
57	LwK 6.4	36,0	2,50	0,79	
91	LwK 6.2	41,0	7,50	2,37	
92	LwK 6.3	33,1	-0,40	-0,13	
95	LwK 6.2	41,1	7,60	2,41	
98	LwK 6.2	33,5	0,00	0,00	
102	LwK 6.3	27,0	-6,50	-2,06	
104	LwK 6.2	36,3	2,80	0,89	
124	LwK 6.3	26,0	-7,50	-2,37	
128	LwK 6.3	48,0	14,50	4,59	
142	LwK 6.3	32,0	-1,50	-0,47	
202	LwK 6.5	44,8	11,30	3,58	
205	LwK 6.5	29,0	-4,50	-1,42	
206	LwK 6.5	32,9	-0,60	-0,19	
208	LwK 6.5	38,1	4,60	1,46	
210	LwK 6.5	24,0	-9,50	-3,01	
212	LwK 6.5	29,0	-4,50	-1,42	
215	LwK 6.5	27,0	-6,50	-2,06	
218	LwK 6.5	35,0	1,50	0,47	
224	LwK 6.5	38,0	4,50	1,42	
236	LwK 6.5	33,0	-0,50	-0,16	
237	LwK 6.5	35,0	1,50	0,47	
244	LwK 6.5	45,0	11,50	3,64	
249	LwK 6.5	38,0	4,50	1,42	
251	LwK 6.5	35,0	1,50	0,47	
252	LwK 6.5	39,0	5,50	1,74	
254	LwK 6.5	42,0	8,50	2,69	
258	LwK 6.5	38,0	4,50	1,42	
262	LwK 6.5	20,0	-13,50	-4,27	
263	LwK 6.5	44,9	11,37	3,60	
264	LwK 6.5	28,0	-5,50	-1,74	
266	LwK 6.5	47,0	13,50	4,27	
267	LwK 6.5	28,0	-5,50	-1,74	
281	LwK 6.5	39,0	5,50	1,74	
282	LwK 6.5	42,0	8,50	2,69	
283	LwK 6.5	34,0	0,50	0,16	
285	LwK 6.5	33,0	-0,50	-0,16	
337	LwK 6.5	36,0	2,50	0,79	
365	LwK 6.5	40,0	6,50	2,06	

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

6.20.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
11	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-3,00	-0,80	
13	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	-15,00	-4,00	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	22,0	-19,00	-5,07	(**)
15	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-3,00	-0,80	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	3,00	0,80	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	35,0	-6,00	-1,60	
19	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-11,00	-2,93	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	46,0	5,00	1,33	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-7,00	-1,87	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-2,00	-0,53	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	41,7	0,67	0,18	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-5,00	-1,33	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	0,00	0,00	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	2,00	0,53	
32	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	2,00	0,53	
35	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	10,00	2,67	
36	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-3,00	-0,80	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	10,00	2,67	
38	Redox incl.	35,0	-6,00	-1,60	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	4,00	1,07	
48	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	7,00	1,87	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-2,00	-0,53	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
51	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
52	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
58	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	46,0	5,00	1,33	
62	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	3,00	0,80	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	-3,00	-0,80	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	2,00	0,53	
67	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	6,00	1,60	
74	LwK 6.1(incl.Red.)	38,9	-2,10	-0,56	
77	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	4,00	1,07	
78	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-5,00	-1,33	
79	Redox incl.	38,0	-3,00	-0,80	
82	LwK 6.1(incl.Red.)	54,0	13,00	3,47	
83	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	0,00	0,00	
85	LwK 6.1(incl.Red.)	50,0	9,00	2,40	
86	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-16,00	-4,27	
100	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	-2,00	-0,53	
103	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	7,00	1,87	
106	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
127	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	-1,00	-0,27	
129	LwK 6.1(incl.Red.)	33,4	-7,60	-2,03	
136	LwK 6.1(incl.Red.)	43,8	2,80	0,75	
139	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
141	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-5,00	-1,33	
145	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	4,00	1,07	
146	Redox incl.	26,0	-15,00	-4,00	
147	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	0,00	0,00	
148	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	10,00	2,67	
149	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-16,00	-4,27	
150	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	4,00	1,07	
152	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	0,00	0,00	
153	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	1,00	0,27	
154	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	3,00	0,80	

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

6.20.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score	Z-Score	Hinweis
				Horwitz	SH incl. Red.	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	1,00	0,38	0,27	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	1,00	0,38	0,27	
30	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	6,00	2,28	1,60	
33	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	2,00	0,76	0,53	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	26,7	-0,30	-0,11	-0,08	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-7,00	-2,66	-1,87	
44	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	-6,00	-2,28	-1,60	
46	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 6.1(excl.Red.)	10,4	-16,60	-6,31	-4,43	
61	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-1,00	-0,38	-0,27	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	35,0	8,00	3,04	2,13	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	14,6	-12,42	-4,72	-3,31	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	5,00	1,90	1,33	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-7,00	-2,66	-1,87	
84	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	5,00	1,90	1,33	
121	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	1,00	0,38	0,27	
122	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	2,00	0,76	0,53	
123	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-8,00	-3,04	-2,13	
125	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-7,00	-2,66	-1,87	
126	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-3,00	-1,14	-0,80	
130	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-9,00	-3,42	-2,40	
131	LwK 6.1(excl.Red.)	35,0	8,00	3,04	2,13	
132	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	2,00	0,76	0,53	
133	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	-4,00	-1,52	-1,07	
134	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	1,00	0,38	0,27	
135	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	-2,00	-0,76	-0,53	
137	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-9,00	-3,42	-2,40	
138	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-12,00	-4,56	-3,20	
140	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	5,00	1,90	1,33	
143	LwK 6.1(excl.Red.)	29,5	2,50	0,95	0,67	
144	LwK 6.1(excl.Red.)	39,0	12,00	4,56	3,20	
151	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	0,00	0,00	0,00	
155	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-1,00	-0,38	-0,27	

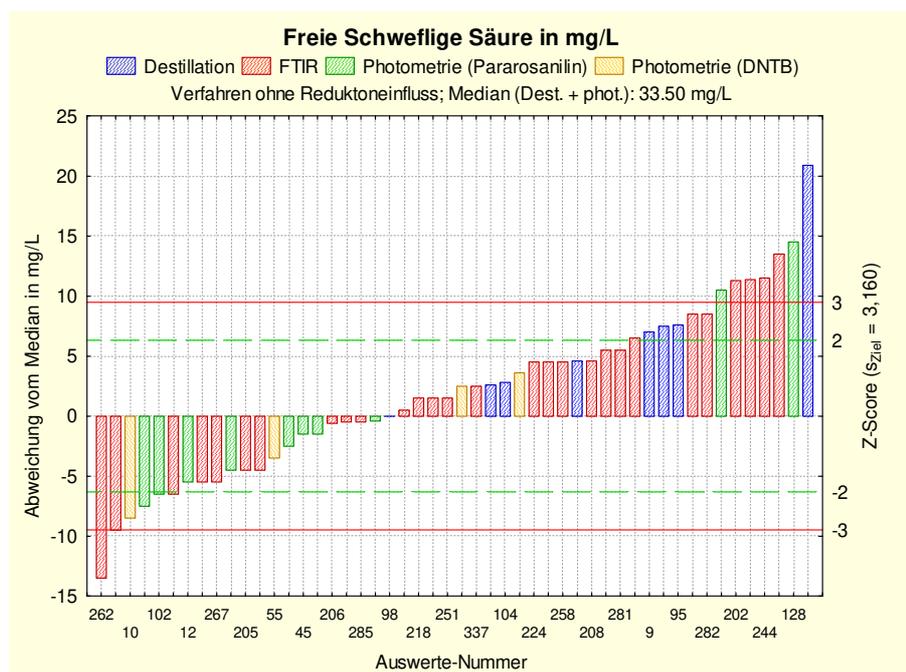
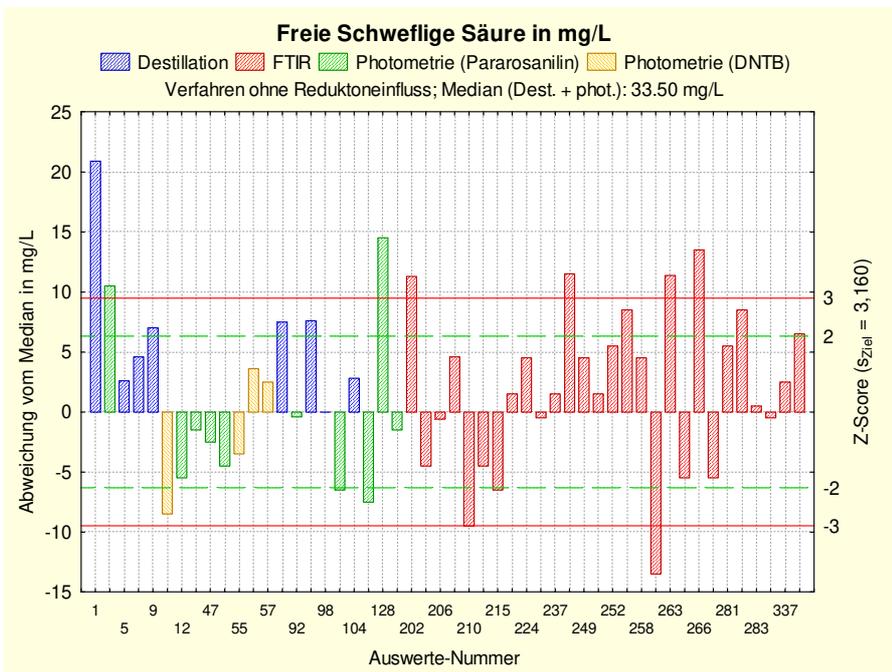
SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone

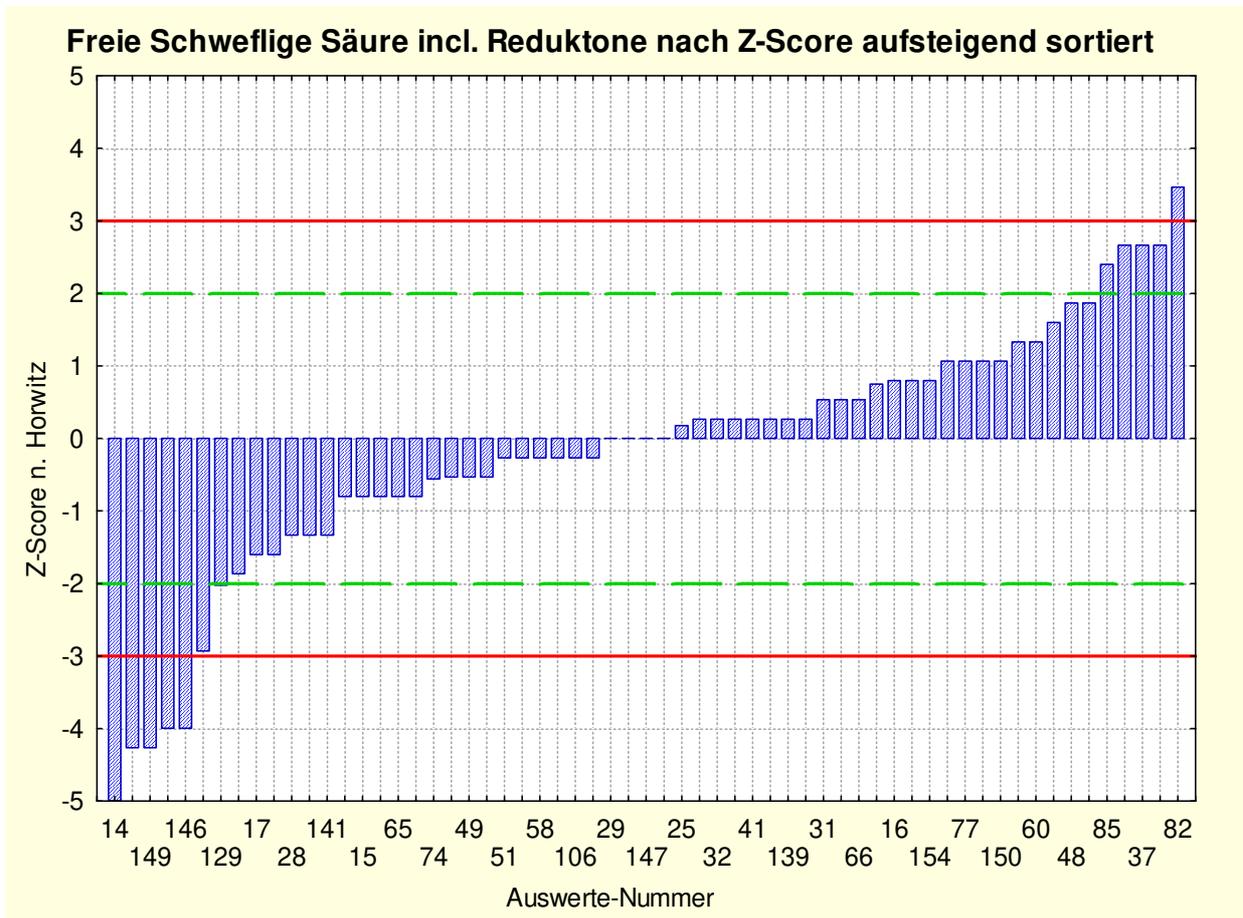
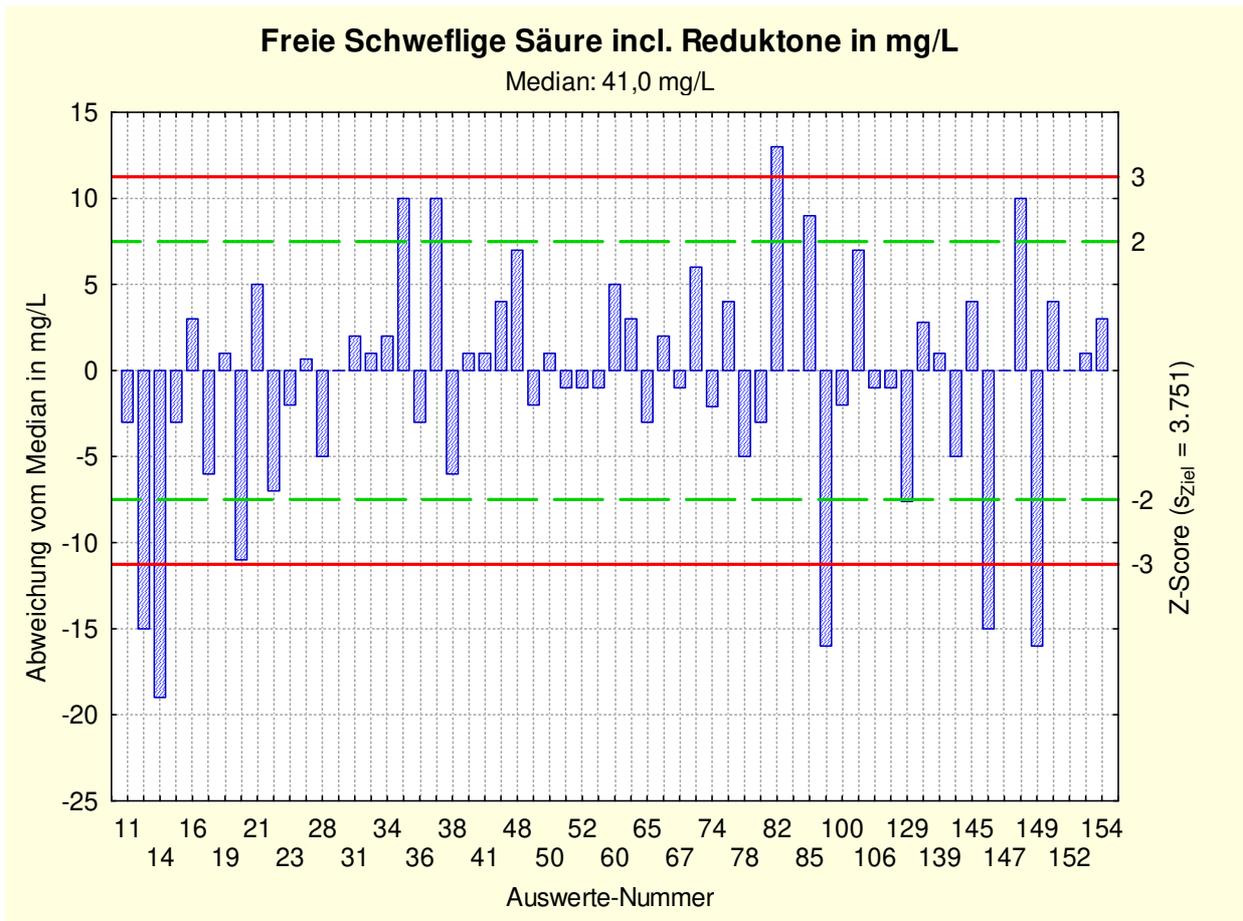
6.20.4 Deskriptive Ergebnisse

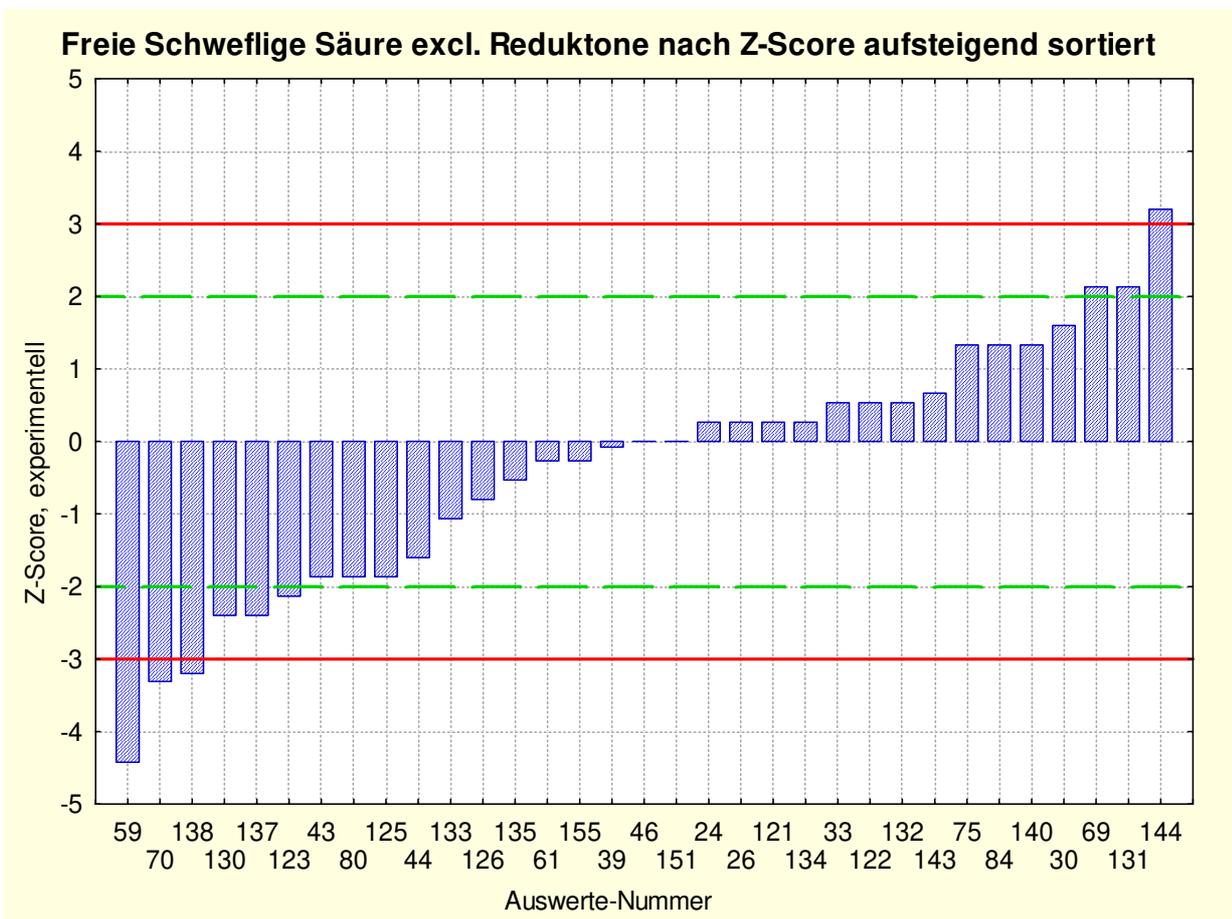
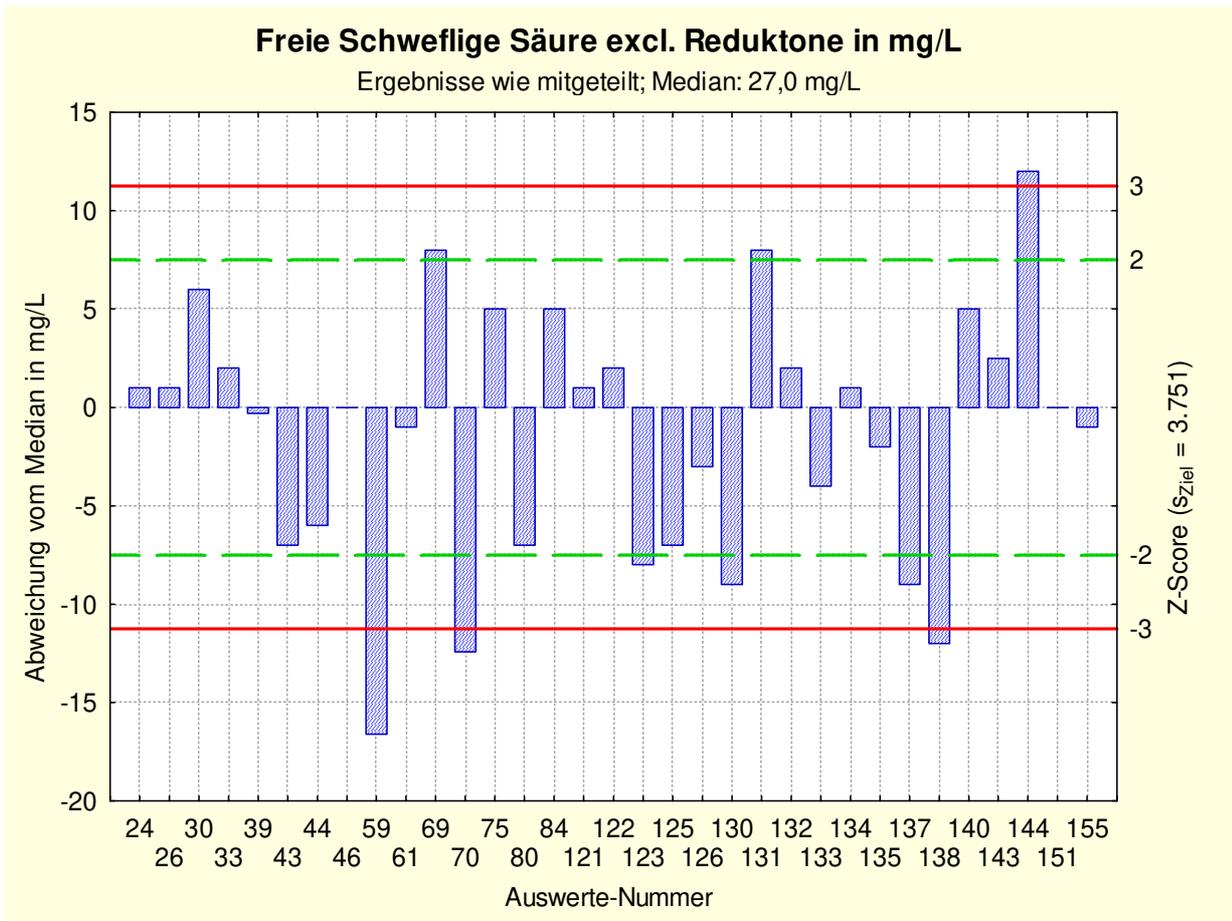
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation	Destillation, Photometrie	jodometrisch Reduktone		
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	ber. Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	8	21	61	60	33
Minimalwert	33,5	25,0	22,0	25,0	10,4
Mittelwert	40,13	34,51	40,36	40,66	25,67
Median	39,30	33,50	41,00	41,00	27,00
Maximalwert	54,4	48,0	54,0	54,0	39,0
Standardabweichung (s _L)	6,375	6,170	6,573	6,175	6,522
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	2,254	1,346	0,842	0,797	1,135
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	3,619	3,160	3,751	3,751	2,631
- n. Horwitz incl. Reduktone (s _H incl. Red.)					3,751
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,76	1,95	1,75	1,65	2,48
Quotient (s _L /s _{exp})					1,74
Quotient (u _M /s _H)	0,62	0,43	0,22	0,21	0,43
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)					0,30

6.20.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Redox (incl. Red.)	Jodometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der elektrometr. Endpunktbest. ohne Abzug der Reduktone	3	33,78	5,62
LwK 6.1 (incl. Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	58	41,21	5,11
(excl. Red.)	alle jodometrischen Verfahren einschließlich Reduktone	61	40,86	5,26
(excl. Red.)	mit Abzug der Reduktone	33	25,80	6,68
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	39,02	4,06
LwK 6.3	Pararosanilinmethode (auch automatisiert)	10	31,97	5,89
LwK 6.4	photometrisch mit DNTB (auch automatisiert)	4	32,05	6,33
	Destillations- und photometrische Verfahren	22	34,90	7,08
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	28	35,67	6,91
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	50	35,36	7,05







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

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.3	136,0	25,00	2,86	4,67	
04	LwK 7.7	118,0	7,00	0,80	1,31	
05	LwK 7.3	117,7	6,70	0,77	1,25	
06	LwK 7.4.2	126,0	15,00	1,72	2,80	
09	LwK 7.3	119,0	8,00	0,92	1,49	
11	LwK 7.3	100,0	-11,00	-1,26	-2,05	
12	LwK 7.4.2	119,0	8,00	0,92	1,49	
13	LwK 7.4.2	119,0	8,00	0,92	1,49	
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	9,00	1,03	1,68	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
19	LwK 7.4.2	111,0	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	3,00	0,34	0,56	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	11,00	1,26	2,05	
22	LwK 7.4.2m	116,0	5,00	0,57	0,93	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	95,0	-16,00	-1,83	-2,99	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,8	9,84	1,13	1,84	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	-9,00	-1,03	-1,68	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	14,00	1,60	2,61	
29	LwK 7.4.1	112,0	1,00	0,11	0,19	
30	LwK 7.4.1	126,0	15,00	1,72	2,80	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
32	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	7,00	0,80	1,31	
33	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	5,00	0,57	0,93	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	4,00	0,46	0,75	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	100,0	-11,00	-1,26	-2,05	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	14,00	1,60	2,61	
37	LwK 7.4.1	106,5	-4,50	-0,51	-0,84	
38	LwK 7.7	114,0	3,00	0,34	0,56	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	113,3	2,30	0,26	0,43	
40	LwK 7.4.1	110,0	-1,00	-0,11	-0,19	
41	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	6,00	0,69	1,12	
42	LwK 7.4.2	111,0	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	-22,00	-2,52	-4,11	
44	LwK 7.4.1	118,0	7,00	0,80	1,31	
45	LwK 7.7	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	14,00	1,60	2,61	
47	LwK 7.4.2	112,0	1,00	0,11	0,19	
48	LwK 7.4.2	96,0	-15,00	-1,72	-2,80	
49	LwK 7.4.2	113,0	2,00	0,23	0,37	
50	LwK 7.4.2	111,0	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	116,0	5,00	0,57	0,93	
53	LwK 7.4.1	117,0	6,00	0,69	1,12	
55	LwK 7.7	110,4	-0,60	-0,07	-0,11	
56	LwK 7.7	107,5	-3,50	-0,40	-0,65	
57	LwK 7.4.2	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
58	LwK 7.4.2	111,0	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 7.5.3(excl. Red.)	117,3	6,30	0,72	1,18	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	121,0	10,00	1,14	1,87	
61	LwK 7.3	81,0	-30,00	-3,43	-5,60	(**)
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	116,0	5,00	0,57	0,93	
65	LwK 7.4.2	102,0	-9,00	-1,03	-1,68	
66	LwK 7.5.3(incl. Red.)	119,0	8,00	0,92	1,49	
67	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	3,00	0,34	0,56	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	9,00	1,03	1,68	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,7	-7,34	-0,84	-1,37	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	17,00	1,94	3,17	
74	LwK 7.1	60,8	-50,20	-5,74	-9,37	(**)
75	LwK 7.4.2	101,0	-10,00	-1,14	-1,87	

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

Fortsetzung: Laboregebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-13,00	-1,49	-2,43	
79	LwK 7.5.3(incl. Red.)	107,0	-4,00	-0,46	-0,75	
80	LwK 7.5.3(excl. Red.)	89,0	-22,00	-2,52	-4,11	
82	LwK 7.4.1	111,0	0,00	0,00	0,00	
83	LwK 7.5.3(incl. Red.)	122,0	11,00	1,26	2,05	
84	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
85	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	10,00	1,14	1,87	
86	LwK 7.5.1(incl. Red.)	121,0	10,00	1,14	1,87	
91	LwK 7.3	120,0	9,00	1,03	1,68	
92	LwK 7.6	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	6,00	0,69	1,12	
95	LwK 7.3	109,6	-1,40	-0,16	-0,26	
96	LwK 7.4.2	117,0	6,00	0,69	1,12	
97	LwK 7.4.2	120,0	9,00	1,03	1,68	
98	LwK 7.3	115,0	4,00	0,46	0,75	
99	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-1,00	-0,11	-0,19	
100	LwK 7.4.2	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
102	LwK 7.6	113,0	2,00	0,23	0,37	
103	LwK 7.7	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
104	LwK 7.3	109,8	-1,20	-0,14	-0,22	
106	LwK 7.4.2	104,0	-7,00	-0,80	-1,31	
121	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
122	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	13,00	1,49	2,43	
123	LwK 7.3	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
124	LwK 7.7	117,0	6,00	0,69	1,12	
125	LwK 7.4.2	96,0	-15,00	-1,72	-2,80	
126	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	-1,00	-0,11	-0,19	
127	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
128	LwK 7.4.2	113,0	2,00	0,23	0,37	
129	LwK 7.4.2	111,0	0,00	0,00	0,00	
130	LwK 7.3m2	120,0	9,00	1,03	1,68	
131	LwK 7.3	108,8	-2,20	-0,25	-0,41	
132	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	12,00	1,37	2,24	
133	LwK 7.4.2	97,0	-14,00	-1,60	-2,61	
134	LwK 7.4.2	117,0	6,00	0,69	1,12	
135	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	-7,00	-0,80	-1,31	
136	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,4	13,40	1,53	2,50	
137	LwK 7.4.2	113,0	2,00	0,23	0,37	
138	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
139	LwK 7.5.2(incl. Red.)	98,0	-13,00	-1,49	-2,43	
140	LwK 7.4.1	118,0	7,00	0,80	1,31	
141	LwK 7.5.1(incl. Red.)	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
142	LwK 7.7	105,0	-6,00	-0,69	-1,12	
143	LwK 7.4.1	109,5	-1,50	-0,17	-0,28	
144	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	1,00	0,11	0,19	
145	LwK 7.4.2	113,0	2,00	0,23	0,37	
146	LwK 7.4.2	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
147	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	2,00	0,23	0,37	
148	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	17,00	1,94	3,17	
149	LwK 7.1	90,0	-21,00	-2,40	-3,92	
150	LwK 7.4.2	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
151	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
152	LwK 7.4.1	118,0	7,00	0,80	1,31	
153	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	6,00	0,69	1,12	
154	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	1,00	0,11	0,19	
155	LwK 7.4.2	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
202	LwK 7.8	102,0	-9,00	-1,03	-1,68	
205	LwK 7.8	103,0	-8,00	-0,92	-1,49	
206	LwK 7.8	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
207	FTIR(direkt)	165,0	54,00	6,18	10,08	(***)
208	LwK 7.8	139,0	28,00	3,20	5,23	(***)
210	LwK 7.8	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
212	LwK 7.8	117,0	6,00	0,69	1,12	

Mit (***) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.
Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

Fortsetzung: Laborergebnisse (Verfahren ohne Reduktoneinfluß)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
215	LwK 7.8	108,0	-3,00	-0,34	-0,56	
218	LwK 7.8	115,0	4,00	0,46	0,75	
224	LwK 7.8	106,0	-5,00	-0,57	-0,93	
236	LwK 7.8	102,0	-9,00	-1,03	-1,68	
237	LwK 7.8	99,0	-12,00	-1,37	-2,24	
244	LwK 7.8	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
249	LwK 7.8	115,0	4,00	0,46	0,75	
251	LwK 7.8	103,0	-8,00	-0,92	-1,49	
252	LwK 7.8	96,0	-15,00	-1,72	-2,80	
254	LwK 7.8	124,0	13,00	1,49	2,43	
258	LwK 7.8	135,0	24,00	2,75	4,48	
262	LwK 7.8	117,0	6,00	0,69	1,12	
263	LwK 7.8	100,1	-10,89	-1,25	-2,03	
264	LwK 7.8	104,0	-7,00	-0,80	-1,31	
266	LwK 7.8	109,0	-2,00	-0,23	-0,37	
267	LwK 7.8	100,0	-11,00	-1,26	-2,05	
281	LwK 7.8	95,0	-16,00	-1,83	-2,99	
282	LwK 7.8	112,0	1,00	0,11	0,19	
283	LwK 7.8	120,0	9,00	1,03	1,68	
285	LwK 7.8	96,0	-15,00	-1,72	-2,80	
337	LwK 7.8	99,0	-12,00	-1,37	-2,24	
365	LwK 7.8	92,0	-19,00	-2,17	-3,55	

Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

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.)	109,0	-7,00	-0,77	-1,31	
15	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	108,0	-8,00	-0,88	-1,49	
16	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	120,0	4,00	0,44	0,75	
17	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	105,0	-11,00	-1,21	-2,05	
20	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	114,0	-2,00	-0,22	-0,37	
21	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	122,0	6,00	0,66	1,12	
23	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	106,0	-10,00	-1,10	-1,87	
25	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	120,8	4,84	0,53	0,90	
28	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	125,0	9,00	0,99	1,68	
32	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	118,0	2,00	0,22	0,37	
34	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	115,0	-1,00	-0,11	-0,19	
35	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	100,0	-16,00	-1,76	-2,99	
36	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	125,0	9,00	0,99	1,68	
41	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	117,0	1,00	0,11	0,19	
46	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	125,0	9,00	0,99	1,68	
51	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	106,0	-10,00	-1,10	-1,87	
52	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	116,0	0,00	0,00	0,00	
60	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	121,0	5,00	0,55	0,93	
62	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	116,0	0,00	0,00	0,00	
66	LwK 7.5.3 (incl. Red.)	119,0	3,00	0,33	0,56	
67	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	114,0	-2,00	-0,22	-0,37	
72	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	128,0	12,00	1,32	2,24	
77	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	106,0	-10,00	-1,10	-1,87	
78	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	98,0	-18,00	-1,98	-3,36	
79	LwK 7.5.3 (incl. Red.)	107,0	-9,00	-0,99	-1,68	
83	LwK 7.5.3 (incl. Red.)	122,0	6,00	0,66	1,12	
85	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	121,0	5,00	0,55	0,93	
86	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	121,0	5,00	0,55	0,93	
94	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	117,0	1,00	0,11	0,19	
99	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	110,0	-6,00	-0,66	-1,12	
127	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	109,0	-7,00	-0,77	-1,31	
135	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	104,0	-12,00	-1,32	-2,24	
136	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	124,4	8,40	0,93	1,57	
139	LwK 7.5.2 (incl. Red.)	98,0	-18,00	-1,98	-3,36	
141	LwK 7.5.1 (incl. Red.)	108,0	-8,00	-0,88	-1,49	

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometr. Verfahren einschließlich Reduktone)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
147	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	-3,00	-0,33	-0,56	
148	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	12,00	1,32	2,24	
153	LwK 7.5.1(incl. Red.)	117,0	1,00	0,11	0,19	
154	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	-4,00	-0,44	-0,75	

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.)	93,0	-7,50	-0,93	-1,40	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,0	-8,50	-1,06	-1,59	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	88,0	-12,50	-1,56	-2,33	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-9,50	-1,18	-1,77	
20	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	-2,50	-0,31	-0,47	
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,0	2,50	0,31	0,47	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	-10,50	-1,31	-1,96	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	95,0	-5,50	-0,68	-1,03	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,4	8,88	1,11	1,66	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	1,50	0,19	0,28	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	3,50	0,44	0,65	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	109,0	8,50	1,06	1,59	
32	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	0,50	0,06	0,09	
33	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	15,50	1,93	2,89	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	-0,50	-0,06	-0,09	
35	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	-18,50	-2,30	-3,45	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	6,50	0,81	1,21	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	113,3	12,80	1,59	2,39	
41	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	-0,50	-0,06	-0,09	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	-11,50	-1,43	-2,15	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	10,50	1,31	1,96	
51	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	-2,50	-0,31	-0,47	
52	LwK 7.5.2(excl. Red.)	96,0	-4,50	-0,56	-0,84	
59	LwK 7.5.3(excl. Red.)	117,3	16,80	2,09	3,14	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	109,0	8,50	1,06	1,59	
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	-4,50	-0,56	-0,84	
66	LwK 7.5.3(excl. Red.)	102,0	1,50	0,19	0,28	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,0	2,50	0,31	0,47	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	19,50	2,43	3,64	
70	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,7	3,16	0,39	0,59	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	-6,50	-0,81	-1,21	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	87,0	-13,50	-1,68	-2,52	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,0	-8,50	-1,06	-1,59	
79	LwK 7.5.3(excl. Red.)	87,0	-13,50	-1,68	-2,52	
80	LwK 7.5.3(excl. Red.)	89,0	-11,50	-1,43	-2,15	
84	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	4,50	0,56	0,84	
85	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	-3,50	-0,44	-0,65	
86	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	3,50	0,44	0,65	
121	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	4,50	0,56	0,84	
122	LwK 7.5.1(excl. Red.)	124,0	23,50	2,93	4,39	
126	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	9,50	1,18	1,77	
127	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-9,50	-1,18	-1,77	
132	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	22,50	2,80	4,20	
135	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	-19,50	-2,43	-3,64	
136	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,8	1,30	0,16	0,24	
138	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	7,50	0,93	1,40	
139	LwK 7.5.2(excl. Red.)	81,0	-19,50	-2,43	-3,64	
141	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-9,50	-1,18	-1,77	
144	LwK 7.5.1(excl. Red.)	112,0	11,50	1,43	2,15	
147	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	-6,50	-0,81	-1,21	
148	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	1,50	0,19	0,28	
151	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	7,50	0,93	1,40	
153	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	-0,50	-0,06	-0,09	
154	LwK 7.5.2(excl. Red.)	90,0	-10,50	-1,31	-1,96	

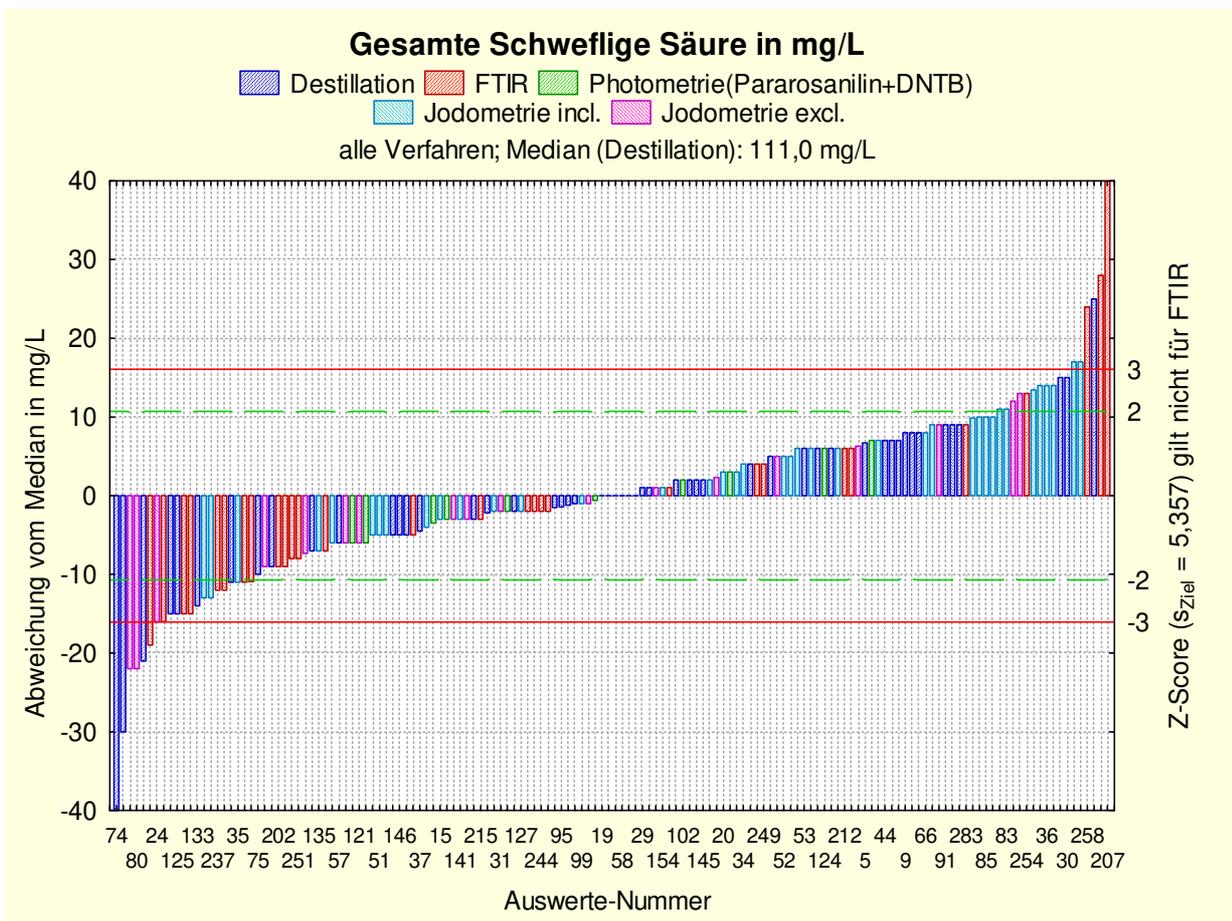
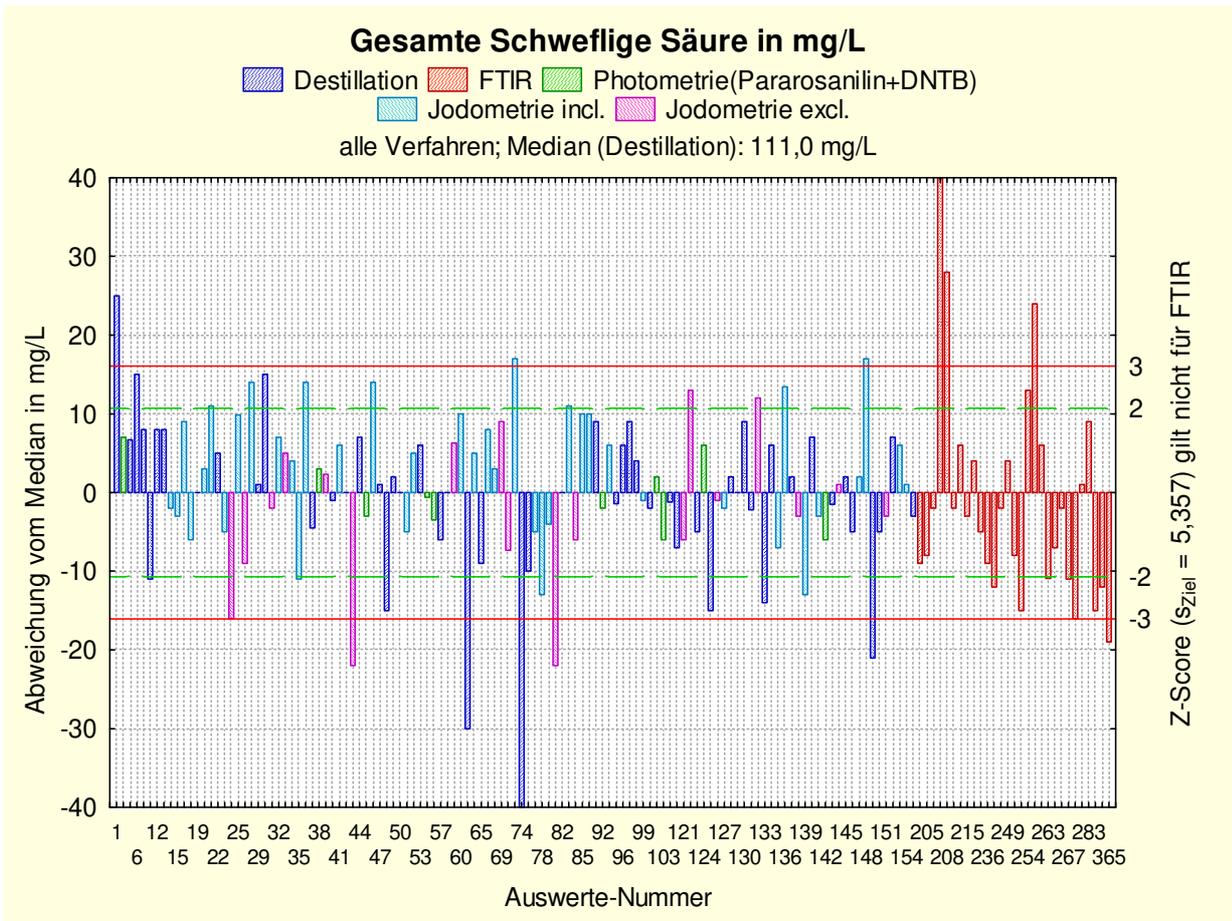
Methodenkode: **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer mitgeteilt; **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet.

6.21.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillation		Jodometrie, Reduktone		
	alle Daten	ber. Daten	inclusive alle Daten	exclusive, alle Daten wie mitgeteilt	Basis erweitert
Gültige Werte	52	50	39	18	54
Minimalwert	60,8	90,0	98,0	89,0	81,0
Mittelwert	110,05	111,62	114,49	108,29	100,29
Median	111,00	111,00	116,00	108,50	100,50
Maximalwert	136,0	136,0	128,0	124,0	124,0
Standardabweichung (s_L)	11,577	8,383	8,210	10,252	10,362
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,606	1,186	1,315	2,417	1,410
Zielstandardabweichung	8,742	8,742	9,075	8,574	8,034
- n. Horwitz (s_H)					
- experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,32	0,96	0,90	1,20	1,29
Quotient (s_L/s_{exp})	2,16	1,56	1,53	1,91	1,93
Quotient (u_M/s_H)	0,18	0,14	0,14	0,28	0,18
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,30	0,22	0,25	0,45	0,26

6.21.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	2	75,40	23,41
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	111,77	10,42
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	1	120,00	
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	10	114,34	5,88
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein modifiziert	27	109,97	7,61
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	116,00	
	alle Destillationsverfahren	52	111,10	8,17
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	32	114,84	9,04
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	4	111,76	11,17
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Reduktonabzug	3	116,78	7,49
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	39	114,71	8,85
	wie mitgeteilt:			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	14	110,38	8,93
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	102,00	11,23
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Reduktonabzug	2	103,15	22,69
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	18	108,69	10,33
	Basis erweitert:			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	44	100,64	10,06
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	6	96,67	12,39
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Reduktonabzug	4	97,55	13,39
	mit Abzug der Reduktone einschl. nachberechnete Werte	54	100,06	10,57
LwK 7.6	Pararosanilinverfahren	2	111,00	3,21
LwK 7.7	DNTB-Verfahren (z. B. FOSS FIAStar)	8	110,61	5,85
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	28	107,33	10,25
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Flüssigkeit	1	165,00	



6.22 Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
11	QZ 3,0 rote Früchte, kräftig im Alkohol , etwas Holz (Chips ?) , Kirchröte Farbe
12	ausgeprägte Kirschnote, etwas Dörrobst, weich und samtig, mittlerer Körper
13	Rotwein von handelsüblicher Beschaffenheit
14	Aussehen: blank, dunkel rot; Geruch: ohne Fehler, Holznoten, dezente Kirscharomen; Geschmack: ohne Fehler, holzbetont (Chips), leicht gerbig, reife rote Früchte, Vanille im Abgang; Gesamteindruck: sauber, rein, ohne Fehler
15	Der Wein ist fehlerfrei. Geschmacklich - harmonisch, mit ausgeprägten Aromen von roten Früchten. Die Farbe ist tiefdunkel mit leichten violetten Akzenten. Die Tanninstruktur ist angenehm weich und die süße/säure Balance ist zufriedenstellend.
16	Der Wein benötigt nach dem öffnen etwas Luft, kommt wird danach aber sehr schön fruchtig und ist nicht zu beanstanden.
17	sauber, fehlerfrei, Barriquearoma
18	Brombeere, Sauerkirsche, trotz BSA markante Säure, noch etwas unharmonische Phenolstruktur, rascher Abgang
20	typisch, fehlerfrei, leicht bitter im Abgang, 2,4 Punkte
21	insgesamt fehlerfrei.samtig,reintönig
22	Farbe: dunkelrot, typisch und blank; Bukett: reif, dezentes Aroma, leichte Frucht-Note, fehlerfrei; Geschmack: leichte Frucht-Note, leicht würzig, leicht gerbstoffbetont, fehlerfrei
24	Sensorik: 2,67; gerbstoffbetont
25	Gereifter Rotwein von handelsüblicher Beschaffenheit
26	In der Nase Aromen von Sauerkirsch und Kräuter treten hervor. Der Rotwein wirkt im Geschmack angenehm, d.h. Süße, Säure und Tannine harmonisieren sehr gut. Im 5-Punkte Schema bewerten wir den Wein wie folgt: Geruch: 3,0 Geschmack: 3,5 Harmonie: 3,5 Gesamturteil: 3,33
27	der Wein ist ok, es gibt nichts zu beanstanden. Schöne Tanninstruktur
28	Holznote, leicht und trocken, fehlerfrei
32	gereift, Burgunder-Typus, leicht laktisch, unharmonische Säure, im Abgang dünn, phenolisch, unreife Gerbstoffe
34	Aussehen: klar, bordeauxrot. Geruch: beerig, Brombeere, Pflaume, leichte Holznote.Geschmack: leichte Astringends, leicht brandig
35	Dezente Kirscharomen in der Nase. Im Geschmack weich, Kirschrucht, weiche Tannine, wirkt leicht oxidativ, vielleicht war das Gebinde vor der Abfüllung mal hohl gelegen.
36	reife, weiche Tannine, schöne Rotweinstruktur, erinnert an Schokolade im Geruch und Geschmack, Farbe hat einen braun-gelb Reflexe , ohne oxidiert zu sein. Gesamtnote 4 Punkte
37	Barrique-starker Holzgeschmack,harmonisch,ohne Fehler,in Ordnung,wenig Gerbstoffe
38	Keine Beanstandungen .
40	Sensorisch in Ordnung!
41	Konzentrierte Aromen, viela, aber recht weiche Tannine, etwas viel Säure, würziger Charakter
42	Wein ist klar, sauber, etwas kirschtige Aromen: Qualitätszahl 2,5
43	Vorbedingungen sind erfüllt. (Farbe,Klarheit usw.) Die Rebsorten Spätburgunder & Cabernet Dorsa sind im Cuvee sensorisch geprägt. Der Wein hat ein animierendes Mundgefühl, internationale Nase, schlanker bis mittlerer Körper, Grip am Gaumen, rote Frucht in der Nase wahrnehmbar. Die Qualitätszahl wurde mit 3,33 bestimmt.
44	Wein ist sauber, ohne Fehler (geringe Reife des Lesegutes)
45	ein Jahrgangstypischer einfacher trockener Rotwein
46	3,5 Punkte; Farbe rubinrot, Aroma reintönig , verhaltene Beerenfrucht, Süße/Säure gut balanciert, Körper etwas kurz
47	Typisch in Geruch, Geschmack und Farbe für Rotwein.
50	Brombeere, schw. Johannisbeere, Granatapfel, Sensorik = o.K.
51	Holzaromen, leicht bräunliche Reflexe, bitter im Abgang, Säure sticht leicht vor
52	Beurteilung noch Qualitätsweinprüfung: Geruch 3,0 Geschmack 2,5 Harmonie 3,0 Gesamt 2,83
53	Farbe nicht zu stark, gute Reife, harmonische Säure, kirschruchtig, leicht, kein Holz.
55	Geruch 3,0 Geschmack 3,5 Harmonie 3,5 = 3,33
56	Sauber im Geruch, aber verhaltene Frucht. Leicht gerbig, etwas belegend. 2,17 Punkte
57	Klare samt-rote Farbe mit lila Reflexen. Es sind Aromen nach Pflaume und Kirsche mit Noten nach Kakao und gerösteter Kaffeebohne erkennbar. Im Geschmack sind Beerenfrüchte vorhanden. Die Säure ist angenehm und das spürbare Tanningerüst sorgt für Struktur.
58	leuchtendes Rubinrot, schöne Beerenfrucht nach Süßkirsche, dezenter Gerbstoff, ausgeglichen,
62	angenehm im Duft, offen mit beginnender Oxidation. Sauerkirscharomatik, für einen Rotwein eine kräftige Säure, weich und füllig bei mittlerer Länge.
74	leicht, fruchtig und süffig. (persönlich) Ein bisschen zu süß für mein Geschmack aber ich würde gerne es trinken.

Fortsetzung: Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
79	Kirschrote Farbe mit leichten violetten Reflexen. In der Nase sind beerige Aromen wahrnehmbar gepaart mit einem filigranen Duft an Kirsche, Vanille, Vollmilchschokolade und Kräuter, im Hintergrund sind ledrige Aromen und etwas Brett wahrnehmbar. Im Geschmack präsentiert sich der Rotwein eher schlank mit einer wahrnehmbaren Säurestruktur, die leichten Tannine wirken austrocknend. Negativ fällt auf das der Wein im Nachhall etwas unsauber wirkt, nahezu einen Muffton aufweist.
85	Farbe: leicht oxidativ, rötlich-bräunlich Geschmack: angenehme Säure, ausgewogen, insgesamt: i.O.
121	Dieser Wein ist sehr fruchtig und samtig.
125	in Geruch und Geschmack in Ordnung, mittlere Qualität
126	Geruch: 2,8 Punkte, Geschmack: 2,5 Punkte, Harmonie: 2,0 Punkte, Qualitätszahl: 2,43 Punkte
128	2,0-3,0-2,5 --> 2,5
129	Farbe: tiefes Rubinrot mit leicht braunen Reflexen, klar; Geruch: Holz, Vanille, Röstaromen; Geschmack: klar, mittlerer Körper, Vanille, Schokolade, leicht oxidative Noten, Waldfrüchte; Produkt von handelsüblicher Beschaffenheit
130	Es handelt sich hierbei um einen kleinen, dünnen, leicht bräunlichen Rotwein mit erhöhter flüchtiger Säure. Qualitätszahl: 2,33 Punkte
131	leichter Barrique-Ton
133	kräftige rote Farbe, volles Bukett, ohne Beanstandung
134	Geruch, Geschmack und Harmonie mit der Note 3 = gut
136	Schöner, runder Rotwein mit ausgewogener Tanninstruktur.
137	Der Rotwein ist sehr harmonisch, samtig und weich. Im Geruch besticht der Wein von roten Beeren und eine Holznote ist gut eingebunden. Die Farbe tendiert in eine leicht bräunliche Richtung. Es könnte eine Burgunderrotweinsorte sein.
138	keine Fehler, kräftige dunkle Aromen, helle rubinrote Farbe, sauber, klar,
139	Fruchtig, Nase sauber, harmonisch, Tannin-reich
140	gerbstoffreich, leicht oxidativ, Maischegärung
141	ohne Beanstandung
142	Fruchtiger Rotwein -> rote Beerenfrüchte; einfache Struktur; relativ grüne, unreife Säure im Abgang.
144	Einfacher typischer Rotwein, dem Jahrgang entsprechend. Präsentiert sich von der Säure zu sauer. Qualitätszahl: 2,5
145	Fehlerfrei leichte Oxidative Note
147	Körperreich, dicht, nachhaltig, etwas Brettanomyces, ohne Beanstandungen, Qualitätszahl: 3,2
148	mittleres Rubinrot leicht ziegelrote Reflexe schlanke Kirsch-Erdbeerblume mit dezenter Kräuterwürze im Bukett; dezentes Würzspiel im Geschmack mit leicht grünlich-herben Effekt im Abgang und kühlem Kirscheffekt im Nachhall
150	In Farbe, Geschmack und Geruch liegen keine Fehler vor.
152	Aromen: Kaffee, Vanillie, röstaromen, rund weich, samtig
153	keine wesentliche Beanstandung – 2,2 Punkte.
154	Farbe rubinrot, klar, Geruch sauber, reintonig, Geschmack schlank, weich im Tannin, ausgewogene Säure, dezente Restsüße.
155	fehlerhaft, oxidativ in Farbe/Geruch/Geschmack; das Säure/Gerbstoffverhältnis wirkt unangenehm adstringent.

7 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
ABC-Labor GmbH, Dr.Ralf Lutterbach u. Dr. Cornelia Schröder	54486	Mülheim
Adam Müller GmbH & Co KG	69181	Leimen
Affentaler Winzer eG	77815	Bühl
Ahr-Winzer eG, Betriebslabor	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Analytisches Labor Link, Niederlassung Rheinhessen	67551	Worms-Pfeddersheim
Analytisches Labor Link, Zweigstelle Weisenheim	67256	Weisenheim a.S.
Anton Paar Germany GmbH	73760	Ostfildern-Scharnhausen
Anton Paar GmbH	A-8054	Graz
Arauner Paul GmbH & Co KG	97306	Kitzingen/Main
AUSTRIA JUICE Germany GmbH	55411	Bingen
Badischer Winzerkeller EG	79206	Breisach
Bay. Landesanstalt für Weinbau und Gartenbau, Fachzentrum Analytik	97209	Veitshöchheim
Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit	97082	Würzburg
Briegel e.K.	67146	Deidesheim
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	54470	Bernkastel-Kues
Emil Wissing GmbH	76887	Bad Bergzabern
Export Union GmbH	55232	Alzey
Fellbacher Weingärtner eG	70734	Fellbach
Felsengartenkellerei Besigheim eG	74394	Besigheim
Franz Stettner & Sohn GmbH	83059	Kolbermoor
Franz Wilhelm Langguth Erben GmbH & Co. KG, Abt. Qualitätssicherung	56841	Traben-Trarbach
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	6632	Freyburg / Unstrut
Institut für Hygiene und Umwelt Abteilung Lebensmittel II	20539	Hamburg
Institut Heidger KG	54518	Osann-Monzel
Jordan Analytik	97246	Eibelstadt
Josef Drathen GmbH & Co KG	56856	Zell
Julius Kimmle GmbH & Co KG	76889	Kapellen-Drusweiler
Julius Kühn Institut	76833	Siebeldingen
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, Zweigstelle Zell	56856	Zell
Kost GmbH & Co. KG	55459	Aspishheim
Lacher Laboratorium	79238	Ehrenkirchen
Landesamt für Verbraucherschutz Sachsen-Anhalt	06128	Halle/Saale
Landesuntersuchungsamt		
Inst. f. Lebensmittelchemie und Arzneimittelprüfung	55129	Mainz
Landesuntersuchungsanstalt für das Gesundheits- und Veterinärwesen	01217	Dresden
Lehr- und Forschungszentrum für Wein- und Obstbau	A-3400	Klosterneuburg
Markgräfler Winzer eG	79588	Efringen-Kirchen
Pieroth AG	55450	Langenlonsheim
PK-Weinlabor	67273	Weisenheim/Berg
Raiffeisen Lagerhaus Absdorf - Ziersdorf eGen Weinbaucenter Langenlois	A-3550	Langenlois
Raiffeisen Lagerhaus Korneuburg und Umgebung eGen.m.b.H.		
Weinbaucenter Wolkersdorf	A-2120	Wolkersdorf
Reh-Kendermann GmbH Betriebslabor Bingen	55411	Bingen
Rheinberg-Kellerei GmbH	55411	Bingen
Rimuss & Strada Wein AG	CH 8215	Hallau
Rolf Willy GmbH	74226	Nordheim
Rotkäppchen-Mumm Sektkellereien GmbH	65343	Eltville
Sektkellerei Henkell & Söhnlein	65187	Wiesbaden
Sektkellerei Schloss Wachenheim AG, Labor	67157	Wachenheim
Sektkellerei Schloss Wachenheim, Betriebslabor	54294	Trier

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
SGS INSTITUT FRESENIUS GmbH	79108	Freiburg
Staatliche Lehr- und Versuchsanstalt	74189	Weinsberg
Staatliches Weinbauinstitut	79100	Freiburg
Tröndlin Oenologie GmbH	79418	Schliengen
Wagner Vinocare GmbH	67278	Bockenheim
Wein- u. Bodенlabor	97332	Volkach
Wein- und Bodенlabor Rebholz	55237	Flonheim
Weinchemisches Labor	76831	Birkweiler
Weinchemisches Labor Schöller	55294	Bodenheim
Weingut Graf	76835	Weyher/Pfalz
Weingut Herzog von Württemberg	71634	Ludwigsburg
Weinkellerei Adam Trautwein	55237	Lonsheim
Weinkellerei Andreas Oster	56812	Cochem
Weinkellerei Einig-Zenzen GmbH & Co KG	56759	Kaisersesch
Weinkellerei Hechtsheim GmbH	55129	Mainz
Weinkellerei Hohenlohe eG	74626	Bretzfeld-Adolzfurt
Weinkellerei Ortwin Welter GmbH & Co KG	55270	Engelstadt
Weinkellerei Peter Herres GmbH	54292	Trier
Weinkellerei Peter Mertes KG	54470	Bernkastel-Kues
Weinkellerei Schmitt Söhne GmbH	54340	Longuich
Weinlabor Anselmann	67483	Edesheim
Weinlabor Beate Lex, Inh. Rudolf Lex	54340	Klüsserath
Weinlabor Bollig	54349	Trittenheim
Weinlabor Braun, Inh. Günter Braun	67435	Neustadt/W.
Weinlabor Carl Klein GmbH	97318	Kitzingen
Weinlabor Emmel	67483	Edesheim
Weinlabor Geissel	67169	Kallstadt
Weinlabor Hans-Jürgen und Philipp Franzen	56814	Bremm
Weinlabor J. Neumann	67278	Bockenheim
Weinlabor Keßler	76829	Landau
Weinlabor Kiefer	67487	Maikammer
Weinlabor Klös	67578	Gimbsheim
Weinlabor Krauß	55291	Saulheim
Weinlabor Matthias Schreml	55444	Waldlaubersheim
Weinlabor Michaeli	54453	Nittel
Weinlabor Mündel-Börtzler	67487	Maikammer
Weinlabor Peitz	55595	Wallhausen
Weinlabor Porten, Inh. Mechthild Steck	56814	Bruttig-Fankel
Weinlabor Rößler	55599	Eckelsheim
Weinlabor Schmitt	55450	Langenlonsheim
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 Sonnenstück Schliengen-Müllheim	79418	Schliengen
Winzerkeller Hex vom Dasenstein	77876	Kappelrodeck
Winzerkeller Wiesloch eG	69168	Wiesloch
Winzerverein Hagnau	88709	Hagnau
WSB-Labor Ruzycki GbR	55278	Hahnheim
WSB-Labor Ruzycki GbR, Zweigstelle Nierstein	55283	Nierstein
Württembergische Weingärtner-Zentralgenossenschaft e.G.	71696	Möglingen
Zentrallabor Witowski	55232	Alzey
Zentrallabor Witowski, Zweigst. Bechtheim	67595	Bechtheim
Zimmermann-Graeff&Müller GmbH & Co KG	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH - Zwgstelle Werk 2 -	56856	Zell/Mosel