



Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

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

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2018“

Teil 1

**Durchführung und Ergebnisse der Untersuchungen
insbesondere eines Weißweins (FT18P01)**

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

Stand: 07.09.2018

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	8
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Auswahl des Untersuchungsmaterialies	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 FT18P01	10
2.1.5	Verteilung des Untersuchungsgutes	12
2.2	Informationen zu Behandlung und Untersuchung der Proben	13
2.3	Ergebnisübermittlung und Behandlung	15
2.4	Ergebnisauswertung	16
2.4.1	Bewertung der Laborleistung	17
2.4.2	Untere Grenze des Anwendungsbereiches	18
2.4.3	Spezielle Regelungen für einzelne Parameter	19
2.4.3.1	Vorhandener Alkohol	19
2.4.3.2	Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	19
2.4.3.3	Vergärbare Zucker	19
2.4.3.4	Flüchtige Säure	20
2.4.3.5	Acetat (als Essigsäure)	21
2.4.3.6	Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure	21
3	Gesamtergebnis der herkömmlichen Untersuchungen	22
3.1	Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses	23
3.2	Gesamtergebnis für das Weißweinprüfgut (FT18P01)	26
4	Anmerkungen zu den Untersuchungsergebnissen mit herkömmlichen Methoden für einzelne Parameter bei allen Prüfgütern	27
4.1	Flüchtige Säure und Acetat	27
4.1.1	Flüchtige Säure	27
4.1.2	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	28
4.2	Gesamte und L-Äpfelsäure	29
4.3	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure	30
4.4	Schweflige Säure und Reduktone	31
4.4.1	Reduktone	31
4.4.2	Freie Schweflige Säure	32
4.4.3	Gesamte Schweflige Säure	34
5	Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen	36
5.1	Spezielle Gegebenheiten für die FTIR-Ergebnisse einzelner Parameter	36
5.1.1	Gesamtalkohol	36
5.1.2	Kodierung der Analysenmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt	36
5.1.3	Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter	36
5.1.4	Vergärbare Zucker	37

5.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	38
5.3	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT18P01	39
5.4	Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter	42
6	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern	44
6.1	Berechnete Parameter	44
6.2	Darstellung der analytischen Ergebnisse	44
6.2.1	Aufbau der Tabellen der Laborergebnisse	45
6.2.2	Aufbau der Tabelle der Deskriptiven Ergebnisse	45
6.2.3	Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren	45
6.2.4	Aufbau der Graphiken	45
6.3	Relative Dichte 20 °C/20 °C	47
6.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	47
6.3.2	FTIR-Laborergebnisse	48
6.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	50
6.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	50
6.4	Gesamtalkohol [g/L]	52
6.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	52
6.4.2	FTIR-Laborergebnisse	53
6.4.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	54
6.4.4	Angaben zu den Analyseverfahren	54
6.5	Vorhandener Alkohol [g/L]	56
6.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	56
6.5.2	FTIR-Laborergebnisse	58
6.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	59
6.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	59
6.6	Gesamtextrakt [g/L]	61
6.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	61
6.6.2	FTIR-Laborergebnisse	62
6.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	63
6.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	63
6.7	Zuckerfreier Extrakt [g/L]	65
6.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	65
6.7.2	FTIR-Laborergebnisse	66
6.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	67
6.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	67
6.8	Vergärbare Zucker [g/L]	69
6.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	69
6.8.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	70
6.8.3	Reduktometrische Laborergebnisse	72
6.8.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	72
6.8.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	74
6.8.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	75
6.8.7	Angaben zu den Analyseverfahren	75

6.9	Glucose [g/L]	79
6.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	79
6.9.2	FTIR-Laborergebnisse	80
6.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	81
6.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	81
6.10	Fructose [g/L]	83
6.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	83
6.10.2	FTIR-Laborergebnisse	84
6.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	85
6.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	85
6.11	Glycerin [g/L]	87
6.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	87
6.11.2	FTIR-Laborergebnisse	87
6.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	88
6.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	88
6.12	pH-Wert	90
6.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	90
6.12.2	Angaben zu den Analyseverfahren	90
6.12.3	FTIR-Laborergebnisse	91
6.12.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	92
6.13	Gesamtsäure [g/L]	94
6.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse	94
6.13.1	FTIR-Laborergebnisse	95
6.13.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	97
6.13.3	Angaben zu den Analyseverfahren	97
6.14	Weinsäure [g/L]	99
6.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse	99
6.14.2	FTIR-Laborergebnisse	99
6.14.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	101
6.14.4	Angaben zu den Analyseverfahren	101
6.15	Flüchtige Säure [g/L]	103
6.15.1	Herkömmliche Laborergebnisse	103
6.15.2	FTIR-Laborergebnisse	103
6.15.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO ₂ -Korrektur	105
6.15.4	Angaben zu den Analyseverfahren	105
6.16	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	107
6.16.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1	107
6.16.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	108
6.16.3	Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren	108
6.16.4	Angaben zu den Analyseverfahren	108

6.17	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	110
6.17.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	110
6.17.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	110
6.17.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	111
6.17.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	112
6.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	112
6.18	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	115
6.18.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	115
6.18.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	115
6.18.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	116
6.18.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	117
6.18.5	Angaben zu den Analyseverfahren	117
6.19	Reduktone [mg/L]	120
6.19.1	Laborergebnisse	120
6.19.2	Deskriptive Ergebnisse	120
6.19.3	Angaben zu den Analyseverfahren	121
6.20	Freie Schweflige Säure [mg/L]	122
6.20.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	122
6.20.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren wie mitgeteilt)	122
6.20.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	124
6.20.4	Deskriptive Ergebnisse	125
6.20.5	Angaben zu den Analyseverfahren	125
6.21	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	127
6.21.1	Laborergebnisse (Verfahren ohne Reduktoneinfluß)	127
6.21.2	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren; Werte wie mitgeteilt)	128
6.21.3	Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)	129
6.21.4	Deskriptive Ergebnisse	130
6.21.5	Angaben zu den Analyseverfahren	130
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 2018 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 10. April und dem 04. Mai 2018 durchgeführt, während die an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung beteiligten Laboratorien die Untersuchungen bis zum 10. Mai 2018 durchführten, soweit nicht in Einzelfällen ein späterer Abgabetermin vereinbart wurde. Insgesamt 127 zugelassene und eingeladene Laboratorien, da-

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

Die Durchführung und die Ergebnisse dieser Laborvergleichsuntersuchung werden in einem mehrteiligen Bericht beschrieben. Der vorliegende Teil 1 umfasst die allgemeinen organisatorischen Angaben zur Durchführung, behandelt für einzelne Parameter prüfgutübergreifende Beobachtungen und dokumentiert die Ergebnisse für das Prüfgut Weißwein (FT18P01) im Detail.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Auswahl des Untersuchungsmateriales

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 obengenannten Verwaltungsvorschrift müssen bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassene Laboratorien für die Parameter, zu deren Untersuchung sie zugelassen sind, in einem Turnus von drei Jahren die Teilnahme an einer Laborvergleichsuntersuchung nachweisen. Um den genannten Kriterien für die Auswahl des Untersuchungsgutes und den Vorgaben der Verwaltungsvorschrift auch für Teilnehmer im Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse zu genügen, wird als allen Teilnehmern zur Verfügung gestelltes Prüfgut im Turnus von drei Jahren jeweils ein Weißwein, ein Rotwein und ein schäumendes Weinerzeugnis, in der Regel ein Perlwein verwendet. Nachdem im Jahr 2016 ein Rotwein und im Jahr 2017 ein Perlwein als Prüfgut für alle Teilnehmer eingesetzt wurden, war in diesem Jahr ein Weißwein auszuwählen.

2.1.2 Angaben zu den Prüfgütern

Für die Durchführung der Untersuchungen wurde das Probenmaterial (Prüfgüter) in diesem Jahr überwiegend als lose Ware und nur ein Prüfgut aus gewerblicher Herstellung bezogen. Als Besonderheiten wurden ein Wein einer ungewöhnlichen Rebsorte ausgewählt und abgestufte Gehalte an Flüchtiger Säure bis in den Bereich der gesetzlichen Höchstwerte bei der Herstellung eines Teiles der Prüfgüter eingestellt. Die Proben für die Teilnehmer an den FTIR-Untersuchungen der Prüfgüter wurden als FT18LnnP01 bis FT18LnnP05 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:

FT18P01: Verschnitt weißer Qualitätsweine der Mosel mit Schwerpunkt Riesling aus der Qualitätsweinprüfung mit einem Zusatz von etwa 2 % stark essigstichigen fränkischem Müller-Thurgau zur Erzielung eines Gehaltes an Flüchtiger Säure im Grenzbereich der sensorischen Erkennung und der Notwendigkeit önologischer Korrekturmaßnahmen. Vorhandener Alkohol 89,8 g/L, Restzucker 14,7 g/L, Gesamtsäure 7,2 g/L, Flüchtige Säure etwa 0,7 g/L.

FT18P02: 2017er Pfalz, Acolon, als sortenreiner, farbstarker Rotwein unter Verwendung von Süßreserve der gleichen Rebsorte und desselben Jahrganges zur Prüfung der Robustheit von FTIR-Kalibrierungen. Vorhandener Alkohol 84,3 g/L, Restzucker 27,6 g/L, Gesamtsäure 5,8 g/L, Flüchtige Säure 0,6 g/L.

FT18P03: Verschnitt von 35 % 2016er stark essigstichigem fränkischen Müller-Thurgau mit 3,2 g/L Flüchtiger Säure, 25 % Verschnitt weißer Mosel-Qualitätsweine und 40 % Pfälzer Riesling mit dem Ziel einen Restzuckergehalt von knapp 20 g/L und einen Gehalt an Flüchtiger Säure von 1,25 g/L zu erhalten. Vorhandener Alkohol 86,8 g/L, Restzucker 18,9 g/L, Gesamtsäure 7,8 g/L, Flüchtige Säure 1,27 g/L.

FT18P04: Verschnittkomponenten: 78 % 2017er Pfalz, Dornfelder, ohne Restzucker mit 1,2 g/L Flüchtiger Säure; 22 % roter Traubensaft mit 157 g/L Restzucker. Vorhandener Alkohol 76,0 g/L, Restzucker 35,9 g/L, Gesamtsäure 6,5 g/L, Flüchtige Säure 1,03 g/L.

FT18P05: 2016er Südafrika Western Cape Pinotage, Rosé, trocken aus gewerblicher Produktion; Vorhandener Alkohol 101,7 g/L, Restzucker 9,2 g/L, Gesamtsäure 4,5 g/L, Flüchtige Säure nicht bestimmt.

Die vorstehenden Angaben zur Zusammensetzung entstammen mit Ausnahme der bei der Produktauswahl vorliegenden Analyse des Prüfgutes FT18P05 den während der Produktion erstellten Analysen. Sie sind als orientierende Angaben zu betrachten.

Keines der Erzeugnisse hat während der Herstellung einen Zusatz von Ascorbinsäure erhalten.

2.1.3 Zusammenfassung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfungen

Die Homogenitätsprüfung wurde von den Prüfgütern FT18P01 bis FT18P04 ohne Einschränkungen bestanden. Aus der Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P05 waren die Ergebnisse der Alkoholbestimmung wegen einer Messstörung nicht zur Auswertung geeignet. Die Quotienten s_r/s_{Ziel} lagen nach Ausschluss von Ausreißern oder Korrektur von Trends der Messdaten in der Regel unter 0,5. Die Ergebnisse der Varianzanalysen waren damit beweiskräftig. Nur in wenigen Fällen konnte eine Inhomogenität – überwiegend mit schwacher Signifikanz – nachgewiesen werden. In insgesamt 4 Fällen, von denen drei auf das Prüfgut FT18P05 bzw. drei auf den Parameter Schweflige Säure entfielen, war das Ergebnis der Varianzanalyse hochsignifikant. Die weiteren Prüfungen werden jeweils bei der Behandlung der Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für die einzelnen Prüfgüter besprochen. Für das Prüfgut FT18P01 z.B. im folgen-

den Abschnitt 2.1.4. Sie zeigten in allen Fällen, dass die Prüfgüter auch bei geringen Inhomogenitäten für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet waren.

2.1.4 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT18P01

Von dem Prüfgut FT18P01 wurden 386 Flaschen gefüllt. Die Füllung erfolgte überwiegend in 0,33-L-Bierflaschen und im Übrigen in 0,375-L-Sektflaschen. 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 Ethanol, Glucose, Fructose und Glycerin 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. Korrelationen der Messwerte zum Messverlauf können eine unzureichende Wiederholbarkeit der Messungen vortäuschen. Wie häufig zu beobachten, traten bei mehreren Parametern gesicherte Korrelationen zum Messverlauf aber nur bei dem Parameter Gesamtsäure, bei dem die Probe 1 graphisch auffällig niedrige Messwerte aufwies, zur Reihenfolge der Entnahme der Proben auf. Die graphischen Darstellungen zeigten weiter einzelne abweichende Messergebnisse, wobei der zweite Messwert unauffällig war. Diese Beobachtungen sind hilfreich bei der Interpretation der Ergebnisse der abschließenden Varianzanalytischen Untersuchung. 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. Diese Bedingung ist für alle Parameter mit einer Ausnahme erfüllt. Bei dem Parameter Vorhandener Alkohols weicht das Ergebnis der ersten Messung (Lfd. Nr. 1) auffällig ab, während das Ergebnis der wiederholten Messung unauffällig ist. Bei Nichtberücksichtigung der Probe 14 liegt der Quotient s_r/s_z ebenfalls unter 0,5. Zeigt die Varianzanalyse bei Erfüllung dieser Bedingung keine Signifikanz folgt, dass das Untersuchungsmaterial hinsichtlich dieses Parameters als homogen zu betrachten ist. Diese Doppelbedingung ist für 11 der 12 geprüften Parameter erfüllt. Damit ist für diese Parameter eine ausreichende Homogenität zuverlässig nachgewiesen.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P01

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	14	0,99854	88,97	35,0	4,49	9,19	13,70	3,23	7,04	6,8	43,2	152,7
2	9	0,99853	89,68	35,2	4,63	9,37	14,00	3,25	7,05	7,3	43,8	153,3
3	19	0,99858	89,84	35,4	4,64	9,41	14,05	3,22	7,05	7,3	43,8	152,5
4	21	0,99858	89,45	35,2	4,58	9,27	13,89	3,24	7,06	7,8	43,8	154,8
5	23	0,99858	89,45	35,2	4,56	9,22	13,86	3,23	7,03	6,8	43,2	154,2
6	16	0,99859	89,68	35,3	4,62	9,35	13,97	3,21	7,03	6,8	43,2	153,4
7	11	0,99853	89,92	35,3	4,56	9,27	13,91	3,22	7,04	7,3	43,2	154,2
8	18	0,99857	89,60	35,3	4,58	9,33	13,95	3,18	7,06	7,3	43,8	154,1
9	20	0,99859	89,92	35,4	4,59	9,25	13,86	3,23	7,03	6,8	43,2	151,9
10	10	0,99857	89,84	35,4	4,53	9,31	13,84	3,21	7,05	7,3	43,2	153,4
11	3	0,99858	90,00	35,5	4,58	9,31	13,93	3,21	7,03	7,0	43,8	153,3
12	1	0,99859	89,76	35,4	4,52	9,24	13,76	3,19	7,01	7,3	43,8	152,5
13	21	0,99857	89,52	35,3	4,45	9,28	13,83	3,19	7,05	7,0	43,2	155,8
14	19	0,99858	89,92	35,4	4,53	9,26	13,79	3,21	7,04	7,8	43,2	153,4
15	9	0,99857	90,16	35,5	4,59	9,26	13,87	3,22	7,04	7,3	43,2	152,7
16	23	0,99858	89,92	35,4	4,51	9,16	13,67	3,22	7,06	7,3	43,2	153,4
17	20	0,99859	89,92	35,4	4,65	9,17	13,82	3,22	7,05	7,3	42,7	151,3
18	11	0,99857	90,16	35,5	4,60	9,37	13,97	3,21	7,04	7,3	43,8	154,1
19	16	0,99858	90,00	35,4	4,52	9,53	14,20	3,21	7,06	7,3	43,2	154,2
20	10	0,99858	90,16	35,5	4,66	9,31	13,97	3,22	7,05	7,8	43,2	154,2
21	1	0,99858	89,76	35,4	4,65	9,39	14,04	3,20	7,01	7,3	43,2	151,9
22	18	0,99860	89,37	35,3	4,56	9,39	14,03	3,22	7,03	7,3	43,2	153,4
23	14	0,99859	90,08	35,5	4,69	9,44	14,13	3,20	7,04	7,8	43,2	151,9
24	3	0,99859	90,00	35,5	4,51	9,25	13,93	3,20	7,04	7,3	42,7	152,8

Rot markiert: auffällig abweichender Messwert

Tabelle 2: Ergebnisse der Varianzanalyse für Charge FT18P01

	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	0,998575	24	1,2433	0,3558	0,000017	0,000006	0,000132	0,130	0,045	0,0001
Vorh. Alkohol	89,795	24	1,0052	0,4931	0,289	0,015	0,535	0,541	0,027	0,3435
- ohne Probe 14	89,820	22	2,1690	0,1100	0,188	0,144	0,535	0,351	0,269	0,2827
Gesamtextrakt	35,363	24	0,6364	0,7689	0,137		0,594	0,231		0,2700
Verg. Zucker	13,915	24	0,6260	0,7769	0,140		0,419	0,334		0,2121
Glucose	4,575	24	0,3511	0,9533	0,073		0,166	0,438		0,0950
Fructose	9,305	24	1,1310	0,4157	0,086	0,022	0,294	0,294	0,075	0,1426
pH-Wert	3,214	24	0,8871	0,5753	0,017		0,0476	0,348		0,0245
Gesamtsäure	7,041	24	1,6909	0,1900	0,012	0,007	0,107	0,113	0,066	0,0444
Reduktone	7,275	24	0,4942	0,8734	0,352		0,863	0,408		0,4761
Freie SO ₂	43,333	24	0,4721	0,8879	0,388		3,932	0,099		1,6180
Gesamte SO ₂	153,308	24	7,7765	0,0007	0,508	0,936	5,36	0,095	0,175	2,2003

Nur bei dem Parameter Gesamte Schweflige Säure zeigt die Varianzanalyse bei sehr guter Präzision der Wiederholungen einen signifikanten Effekt, d.h. bei diesem Parameter 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 den Parameter Gesamte Schweflige Säure zu und spricht für ausreichende Homogenität. Letztlich entscheidend ist das Prüfkriterium nach Fearn und Thompson (Analyst 126 (2001), 1414-1417). Dieses berücksichtigt weitere statistische Einflüsse. Hiernach darf die Standardabweichung der 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 eingehalten wird. Somit gilt auch für diesen 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 04.04.2018 abgesandt. Die zur Abholung der Proben angemeldeten Laboratorien konnten somit ab dem 10.04.2018 das Untersuchungsgut bei der jeweils von ihnen gewählten Prüfstelle in Empfang nehmen. Insgesamt wurde einschließlich einer Reserve bei den Prüfstellen Material für 36 Laboratorien mit je 3 Flaschen a 0,33 L bzw. 0,375 L bereitgestellt. Je Labor wurde dieselbe Probenmenge an weitere 13 Laboratorien, die um Zusendung gebeten hatten, am 05.04.2018 abgesandt. Die 84 Teilnehmer an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung erhielten das Prüfmaterial per Paketdienst ebenfalls zu dieser Zeit. An diese Teilnehmer wurden außer dem Weißwein FT18P01 vier weitere Prüfgüter zu je 2 bis 4 Flaschen a 0,375 L bzw. 0,187 L (FT18P05) versandt. Die zugesandte Anzahl Flaschen je Probe richtete sich danach, welche der Prüfgüter den Teilnehmern zur Untersuchung mit herkömmlichen Methoden aufgegeben waren.

2.2 Informationen zu Behandlung und Untersuchung der Proben

Alle Laboratorien erhielten je nach dem Umfang ihrer Teilnahme an der Laborvergleichsuntersuchung Informationsblätter über die Aufgabenstellung und Hinweise für die Durchführung der Untersuchungen sowie Formblätter 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 Weißweins FT18P01 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 Zuckergehaltenen Extrakt berechneten Werte gefordert. Für den Fall, dass der Gehalt an Schwefliger Säure jodometrisch bestimmt werden sollte, wurde darauf hingewiesen, dass im Prüfgut keine Ascorbinsäure enthalten und eine Bestimmung der Reduktone nicht erforderlich war. Der Gehalt an Schwefliger Säure sollte nach den Regeln des Labors für die Mitteilung an Kunden bzw. nach den Regeln des Qualitätsmanagement berichtet werden. Im Fall der Mitteilung jodometrisch unter Abzug der Reduktone bestimmter Werte sollte jedoch zusätzlich der Reduktionwert mitgeteilt werden. Obwohl in der amtlichen Qualitätsweinanalytik nicht mehr gefordert, wurde die Abgabe eines Untersuchungsergebnisses für den Parameters Glucose ermöglicht. Weiterhin wurde auf die Regeln zur Auswahl der Untersuchungsmethoden hingewiesen. Das Untersuchungsgut sollte als "2017er Qualitätswein Mosel halbtrocken (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 exportiert und als Datei an den Auswertenden übermittelt werden. Darüber hinaus wurde um die Überlassung der benutzten Produktkalibrierung gebeten, soweit die Gerätesoftware deren Export ermöglicht und sie nicht bereits im Vorjahr eingesandt wurde. Zumindest waren aus der Produktkalibrierung die B0-Koeffizienten, Slope- und Interzept-Werte auf einem zur Verfügung gestellten Formblatt bzw. Registerblatt der Datei zur Ergebnismitteilung mitzuteilen.

Die zum Einsatz des FTIR-Verfahrens bei der Qualitätsweinprüfung zugelassenen Laboratorien waren gehalten, zur Messung der Parameter Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure und Vergärbare Zucker die verpflichtend für die Verwendung bei der amtlichen Qualitätsweinanalyse zugelassenen Parameterkalibrierungen nach dem Stand des Jahres 2011 zu verwenden. Diese stehen als Produktkalibrierung AP_2011 auf der Website der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zur allgemeinen Verfügung. Die in ihr enthaltenen Parameterkalibrierungen für Vorhandenen Alkohol und Gesamtsäure sind identisch mit den seit 2003 für die Bestimmung dieser Parameter vorgegebenen Parameterkalibrierungen. Die Parameterkalibrierungen für Glucose und Fructose ersetzen in Anpassung an die geänderte Definition des weinrechtlichen Zuckerbegriffes die frühere, auf reduktometrischen Zuckerbestimmungen beruhende Parameterkalibrierung für Vergärbare Zucker. Die Summe der Ergebnisse für Glucose und Fructose ist im Untersuchungsbefund als Vergärbare Zucker einzutragen. In der von der Landwirtschaftskammer zur Verfügung gestellten Fassung enthalten die Parameterkalibrierungen 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 04.05.2018 und als Ausschlusstermin der 07.05.2018 benannt. Für Laboratorien, die eine umfangreichere Aufgabenteilung zu bearbeiten hatten, wurde der Abgabetermin auf den 10.05.2018, der Ausschlusstermin auf den 15.05.2018 festgesetzt. In begründeten Einzelfällen konnte eine darüber hinausgehende Abgabefrist vereinbart werden.

2.3 Ergebnisübermittlung und Behandlung

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 31 Teilnehmer mit der zugesandten Exceldatei, während 12 Laboratorien ihre Ergebnisse schriftlich an die Landwirtschaftskammer einsandten, sodass letztlich 43 Laborergebnismitteilungen vorlagen. Von 84 angemeldeten Teilnehmern der FTIR-Laborvergleichsuntersuchung übermittelten 82 Ergebnisdateien unmittelbar an den Auswertenden. Zwei Teilnehmer sandten keine Ergebnisse ein. Sechs Teilnehmer waren an dem erweiterten Parameterumfang interessiert und beteiligten sich nur mit Untersuchungen nach anderen Methoden. Ein weiterer Teilnehmer des erweiterten Ringversuchs beschränkte sich vereinbarungsgemäß auf die Parameter der amtlichen Qualitätsweinprüfung. Vier Teilnehmer aus Laboratorien, die nur das FTIR-Verfahren einsetzen, konnten keine Ergebnisse mit anderen als der FTIR-Methode mitteilen. 5 Teilnehmer teilten Ergebnisse zu einer oder mehreren Proben mit, die sie mit zwei Kalibrierungen gemessen hatten. Daher konnten insgesamt bis zu 81 FTIR-Messergebnisse vorliegen. Von 26 Teilnehmern gingen 31 Produktkalibrierungen (PRD-Dateien), davon aus 4 Laboratorien für Rot- und Weißweine unterschiedliche Dateien ein. Rohdaten-Dateien (CSV- und FSS-Dateien) sandten 55 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 13 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 22 Teilnehmer, die das zweite Registerblatt zur Mitteilung von Ergebnissen mit anderen Methoden als auf dem ersten Registerblatt nutzten, wurden zusätzliche Auswertenummern aus dem Wertebereich 85 bis 106 zugeteilt, während unter den Auswertenummern 107 bis 110 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. 73 %, d.h. 55 der 75 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. Ebenfalls selten waren zweifelhafte oder fehlerhafte Methodenkodierungen bei dem Parameter Gesamtextrakt. Hier wurde die 2011 überarbeitete Regelung für die Verwendung der Kodierungen in Abhängigkeit von der angewandte Methode der Alkoholbestimmung nicht beachtet. Alle Kodierungsmängel wurden in den Laborteilnahmebescheinigungen angesprochen.

Der Bitte um Mitteilung des sensorischen Befundes an der Probe, die von allen bei der Landwirtschaftskammer zugelassenen Laboratorien zu untersuchen war, entsprachen 65 der 92 Laboratorien. Die sensorischen Befunde sind ohne Bewertung im Abschnitt 6.22 wiedergeben. Überwiegend wurde der Weißwein zufrieden stellend beschrieben und bewertet. Nur in einzelnen Fällen wurden der leicht erhöhte Anteil Flüchtige Säure angesprochen, widersprüchliche Beschreibungen mitgeteilt oder nicht vorhandene Fehler angegeben. Die weitere Auswertung bleibt den einzelnen Teilnehmern überlassen, da Qualitätszahlen nur unvollständig angegeben wurden und eine standardisierte Bewertung der verbalen Beschreibungen nicht möglich ist.

2.4 Ergebnisauswertung

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

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

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

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

2.4.1 Bewertung der Laborleistung

Nach den allgemeinen Regeln gilt der Median aller Laborergebnisse als 'wahrer Wert'. Einer Empfehlung des „Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinanalytik“ folgend, wird für alle Laborergebnisse als maßgeblich der Median der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden (siehe Seite 14), 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 Laboratorium nicht beherrschbar sind. Daher hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss angeregt, zu deren Bewertung experimentell ermittelte Zielstandardabweichungen (Übereinstimmungsstandardabweichung s_{ij}) zu verwenden, die den Einfluss der Matrix auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse um den Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden nach statistischen Regeln berücksichtigen. Für fast alle in dieser Laborvergleichsuntersuchung erfassten Parameter hat er eine Zusammenstellung statistischer Kennzahlen des FTIR-Verfahrens erarbeitet, die in Teil 1 der Berichte über die Laborvergleichsuntersuchung 2010 als Tabelle 5 ent-

halten ist. Abweichend von dieser Tabelle werden für den Parameter Fructose eine Übereinstimmungsstandardabweichung ($s_{\bar{U}}$) 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 ($s_{\bar{U}}$). In diesem Fall würden die FTIR-Laborergebnisse strenger bewertet als die Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren. Der wissenschaftliche Arbeitsausschuss ist in seiner 8. Sitzung (2011) zu dem Ergebnis gekommen, dass dies nicht erforderlich ist. Er hat empfohlen, die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse herkömmlicher Verfahren auch zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse anzuwenden, falls ihr Wert gleich oder größer ist als der Wert der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung. Diese Empfehlung wurde bei der Berechnung der Z-Score für die FTIR-Ergebnisse berücksichtigt.

2.4.2 Untere Grenze des Anwendungsbereiches

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

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

ergebnis 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-Score geeignet.

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

2.4.3.2 Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreier Extrakt

Die berechneten Werte für Gesamtalkohol, Gesamtextrakt und Zuckerfreien Extrakt gehören zu den Standardparametern der amtlichen Qualitätsweinanalyse. Ergebniswerte sind für das Prüfgut FT18P01 durch die bei der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zugelassenen Laboratorien mitzuteilen. Daher sind für das Prüfgut FT18P01 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 relativ etwa 3 % des Messwertes größer als die zu etwa 2 % des Messwertes kodifizierte Vergleichsstandardabweichung des Verfahrens zur Bestimmung der Reduzierenden Stoffe nach Luff-Schoorl (OIV-MA-AS311-01A, LwK Nr. 4.1).

In der Praxis werden die reduktometrischen Verfahren zur Zuckerbestimmung nach wie vor weit verbreitet eingesetzt, so bei dem Prüfgut FT18P01 bei 35 von insgesamt 96 Laborergebnissen mit herkömmlichen Methoden. Sie können – allerdings nur bei Beachtung der Einflüsse des Prüfgutes auf das Ergebnis – trotz im Widerspruch zur OIV-Methode größerer Streuung der reduktometrischen Laborergebnisse zur Ermittlung vergleichbarer Laborergebnisse geeignet sein. Einschränkungen sind – verstärkt in Abhängigkeit von der konkreten Ausgestaltung des reduktometrischen Bestimmungsverfahrens hinsichtlich der Anwendung einer Klärung – vor allem bei Rotweinen mit geringen Zuckergehalten gegeben und zu beachten.

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

2.4.3.4 Flüchtige Säure

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

Entsprechend der Definition des Parameters wird regelmäßig um die Mitteilung der Ergebnisse für Flüchtige Säure unter Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure gebeten. Bei der Auswahl bzw. Beschreibung der Untersuchungsmethode ist eine abweichende Angabe möglich. Da die Bestimmung der Sorbinsäure in der Regel nicht Gegenstand dieser Laborvergleichsun-

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

2.4.3.5 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-Score zu hoch ist. Daher erfolgt erstmals eine getrennte Auswertung der beiden Ergebnisgruppen.

2.4.3.6 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-Score.

Bei der Anwendung jodometrischer Verfahren zur der Bestimmung 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-Score 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.

Wie im Vorjahr galten gegenüber früheren Jahren **geänderte** Vorgaben für die Mitteilung der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen. Im Begleitschreiben und dessen Anlage 2 wurde 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 Reduktionabzug 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 Schweflicher 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 Schweflicher Säure ergeben. Lediglich zur Information werden die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen jeweils einschließlich und ausschließlich des Beitrages der Reduktone zusätzlich durch den Vergleich mit dem Median der jeweiligen Ergebnisgruppe bewertet. Als Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) wurde stets die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet, weil diese die Erwartung an die Vergleichbarkeit der Laborergebnisse prägt.

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 FT18P01 und im folgenden Abschnitt 4 auf prüfgutübergreifenden Ergebnisse für einzelne Parameter eingegangen.

3.1 Regeln zur Bewertung des Gesamtergebnisses

Einen laborübergreifenden Überblick über die Untersuchungsergebnisse gibt für jedes Prüfgut eine Zusammenstellung deskriptiv-statistischer Ergebnisse wie hier für die Probe FT18P01 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-Score nimmt sowohl für die Ergebnisse herkömmlicher als auch der FTIR-Untersuchungen Bezug auf den Median dieser Ergebnisse als 'wahren Wert'. Die Berechnung der Z-Score erfolgt jedoch in der Regel für herkömmliche und FTIR-Untersuchungsergebnisse mit unterschiedlichen Zielstandardabweichungen. Daher enthält Tabelle 3 wie die entsprechenden Tabellen für die weiteren Prüfgüter für Parameter, die mit dem FTIR-Verfahren bestimmt wurden, in jeder der beiden Spalten „Zielstdabw. exp. herk. s_{exp} “ und „Zielstdabw. exp. FTIR $s_{\bar{U}}$ “ einen Eintrag. Dies berücksichtigt die Empfehlungen des „Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinanalytik“ (siehe auch Abschnitt 2.4.1).

Grundlagen der Bewertung des Gesamtergebnisses sind bei allen Proben:

- (1.) die Anzahl resp. der Anteil ausgeschlossener Ergebnisse,
- (2.) die Quotienten s_L/s_{Ziel} aus der Standardabweichung zwischen den Laborergebnissen (s_L) geteilt durch die Zielstandardabweichung (s_{Ziel}). Verwendet werden für die Ergebnisse herkömmlicher Verfahren nach Horwitz berechnete Zielstandardabweichungen (s_H) bzw. experimentelle Zielstandardabweichungen (s_{exp}), die als Vergleichsstandardabweichung in Methodenprüfenden Ringversuchen ermittelt wurden, und für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens experimentelle, Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichungen ($s_{\bar{U}}$ bzw. $s_{\bar{U} FTIR}$).
- (3.) der Quotient aus 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 An-

zahl 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 in diesen Fällen zu dem jeweiligen Parameter in den Spalten „Alle Werte“ und „Gültige Werte“ unterschiedliche Zahlen. Der Anteil der wegen überhöhter Z-Score oder mehr als 50 % Abweichung vom Median ausgeschlossenen Ergebnisse soll weniger als 22 % betragen.

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

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

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

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

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

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

Tabelle 3: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für die Weißweinprobe (FT18P01)

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	105	102	0,99863	0,99862	0,000128	0,000013			0,000132	0,000190		0,97	0,67	0,10	0,07
Gesamtalkohol (g/L)	85	84	95,193	95,300	0,841	0,0918	2,715		1,063	1,063	0,31	0,79	0,79	0,09	0,09
Vorhandener Alkohol (g/L)	39	39	88,406	88,300	0,664	0,1063	2,545		0,535	0,886	0,26	1,24	0,75	0,20	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	98	97	35,02	35,00	0,482	0,0489	1,159		0,594	0,594	0,42	0,81	0,81	0,08	0,08
Zuckerfreier Extrakt (g/L)	93	92	20,91	20,90	0,657	0,0685	0,748		1,048	1,048	0,88	0,63	0,63	0,07	0,07
Vergärbare Zucker (g/L)															
- enzymatisch + HPLC	59 (2)	59	14,00	14,00	0,298	0,0388	0,532		0,421	0,584	0,56	0,71	0,51	0,09	0,07
- (reduktom.) (g/L)	35	34	14,20	14,35	0,671	0,1151	0,544		0,430	0,584	1,23	1,56	1,15	0,27	0,20
Glucose (g/L)	55 (1)	55	4,387	4,410	0,201	0,0271	0,200		0,162	0,408	1,01	1,24	0,49	0,17	0,07
Fructose (g/L)	55 (1)	55	9,620	9,600	0,239	0,0323	0,386		0,302	0,330	0,62	0,79	0,73	0,11	0,10
Glycerin (g/L)	21	20	5,947	5,900	0,175	0,0392	0,256			0,348	0,69		0,50	0,15	0,11
pH-Wert	48	48	3,261	3,260	0,047	0,0068			0,048	0,049		0,99	0,95	0,14	0,14
Gesamtsäure (g/L)	96	95	7,110	7,100	0,125	0,0128	0,299		0,107	0,145	0,42	1,17	0,86	0,12	0,09
Weinsäure (g/L)															
- HPLC + IC	12	12	2,072	2,059	0,086	0,0249	0,104			0,227	0,83		0,38	0,24	0,11
- alle herkömmlichen Verfahren	37	37	2,161	2,170	0,147	0,0242	0,109			0,227	1,35		0,65	0,22	0,11
Flüchtige Säure (g/L)	30	30	0,648	0,656	0,0690	0,0126	0,0395			0,0891	1,75		0,77	0,32	0,14
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- enzymatisch, automatisiert	23	22	0,707	0,695	0,0617	0,0131	0,0415			0,0415	1,49		1,49	0,32	0,32
- sonst. Verfahren, z _{Max} =4,5	10	9	0,586	0,577	0,0453	0,0151	0,0355			0,0355	1,28		1,28	0,43	0,43
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	11	11	3,118	3,120	0,0912	0,0275	0,149		0,0971	0,218	0,61	0,94	0,42	0,28	0,13
L-Äpfelsäure (g/L)	33	30	3,117	3,090	0,162	0,0295	0,147		0,0964		1,10	1,68		0,31	
Gesamte Milchsäure (g/L)															
alle herkömmlichen Verfahren	17	16	0,580	0,581	0,0690	0,0173	0,0356			0,209	1,94		0,33	0,48	0,08
nur enzymatische Verfahren	10	9	0,591	0,581	0,0451	0,0150	0,0357			0,209	1,27		0,22	0,42	0,07
L-Milchsäure (g/L), alle	29 (2)	29	0,447	0,440	0,0575	0,0107	0,0282		0,0372		2,04	1,54		0,29	
Reduktone (mg/L)	25 (4)	23	4,187	4,000	1,041	0,217	0,519				2,00			0,42	
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
Destillation	7	7	30,51	28,60	4,43	1,673	2,76				1,60			0,61	
Destillation + Photometrie	21	20	30,40	30,00	5,20	1,164	2,88				1,81		1,81	0,40	0,40
- jodometrisch incl. Reduktone	78	78	29,76	29,00	3,97	0,449	2,80				1,42			0,16	
- jodometrisch excl. Reduktone	15	15	29,30	29,00	5,36	1,383	2,80		2,795		1,92	1,92		0,49	
- wie vor, Basis erweitert	31	31	28,04	28,00	4,53	0,814	2,71		2,795		1,67	1,62		0,29	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	43	43	124,73	124,00	7,84	1,195	9,60		5,357	9,60	0,82	1,46	0,82	0,22	0,12
- jodometrisch incl. Reduktone	56	56	129,40	128,50	7,21	0,963	9,90		5,357		0,73	1,35		0,18	
- jodometrisch excl. Reduktone	9	9	132,94	133,00	9,81	3,269	10,19		5,357		0,96	1,83		0,61	
- wie vor, Basis erweitert	22	22	129,58	129,00	8,42	1,795	9,93		5,357		0,85	1,57		0,34	
- wie vor, Basis erw. z _{Max} = 4,5	22	21	128,42	128,00	6,57	1,434	9,87		5,357		0,67	1,23		0,27	

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

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

3.2 Gesamtergebnis für das Weißweinprüfgut (FT18P01)

Bei dem Prüfgut FT18P01 traten bei der Mehrzahl der Parameter keine oder bis zu zwei auszuschließende Laborergebnisse auf. Es handelte sich sowohl um grob fehlerhafte, um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte als auch Laborergebnisse mit einem absoluten Betrag des Z-Score über 5. Eine höhere Anzahl auszuschließender Laborergebnisse ergaben sich für die Parameter L-Äpfelsäure und Reduktone. Beim Parameter Reduktone wichen vier Ergebnisse um mehr als 50 % vom Median ab, zwei weitere wiesen einen Z-Scorebetrag über 5 auf. Mit 6 von 29 Laborergebnissen wurde somit ein Anteil von 20,7 % der Laborergebnisse ausgeschlossen und der Höchstanteil von 22 % fast erreicht.

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 **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)**, **Flüchtige Säure**, **L-Äpfelsäure**, **Gesamte Milchsäure** (bei Berücksichtigung aller Analyseverfahren), **Freie Schweflige Säure** (Destillations- und photometrische Verfahren) sowie bei den Varianten der Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen der **Freien und Gesamten Schwefligen Säure unter Abzug der Reduktone**. Der Höchstwert von 2,0 wurde nur bei dem Parameter **Reduktone** erreicht.

Während bei den Parametern **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)**, **Flüchtige Säure** und **L-Äpfelsäure** bedingt durch die große Anzahl vorliegender Laborergebnisse unauffällige Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " resultieren und die Zuverlässigkeit der Bezugswerte gegeben ist, weisen die Parameter **Gesamte Milchsäure**, **Reduktone** und **Freie Schweflige Säure** (Destillations- und photometrische Verfahren; jodometrisch nach Abzug der Reduktone) zugleich mäßig erhöhte Werte des Quotienten " u_M/s_{Ziel} " auf. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist ferner eingeschränkt für die Gruppe der Ergebnisse der **Acetatbestimmung** mit HPLC, manueller Enzymatik und $^1\text{H-NMR}$ sowie der **L-Milchsäure**. Dies ist bei einer kritischen Betrachtung der Z-Score zugunsten des einzelnen Teilnehmers zu berücksichtigen.

Bei zusammenfassender Betrachtung aller Kriterien zur Ermittlung **gültiger Z-Score** ergibt sich, dass für **alle Parameter eine** – zumindest formal – **aussagekräftige Bewertung** der Laborleistung **durch die Z-Score** gegeben ist. Die Einschränkung betrifft vor allem den Parameter Reduktone, bei dem das Ergebnis der formalen Betrachtung aus fachlicher Sicht unbefriedigend ist, da alle Ausschlusskriterien eingestellt aber gerade noch nicht überschritten sind.

Von den 92 teilnehmenden Laboratorien, die durch die Landwirtschaftskammer zugelassen sind, wurden die Parameter der amtlichen Qualitätsweinanalyse mit herkömmlichen Methoden zwischen einmal (Gesamte Schweflige Säure) und dreimal (Dichte, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Freie Schweflige Säure) nicht erfolgreich bestimmt, d.h. der Absolutbetrag des Z-Score überschritt den Wert 3 ($|Z| > 3$). Dazwischen lagen die Laborergebnisse für Vorhandenen Alkohol (zwei falsche Ergebnisse). Es ergab sich also keine Häufung fehlerhafter Ergebnisse für einzelne Parameter und die Fehlerhäufigkeit ist mit 15 fehlerhaften Werten insgesamt gering.

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

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

4.1 Flüchtige Säure und Acetat

4.1.1 Flüchtige Säure

Die Auswertung der Laborergebnisse für diesen in der Regel nicht unproblematischen Parameter erfolgte gemäß den im Abschnitt 2.4.3.4 dargestellten Regeln. Diesen folgend wurde die Zielstandardabweichung $\pm 0,029$ g/L nur für das Prüfgut FT18P05 angewandt, für das der Median der Laborergebnisse unter 0,45 g/L lag. Im Übrigen wurde die Zielstandardabweichung nach Horwitz ermittelt. 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}
FT18P01	30 (0)	0,648	0,0690	1,75	0,32
FT18P02	23 (1)	0,635	0,0711	1,81	0,38
FT18P03	27 (1)	1,239	0,1391	2,05	0,39
FT18P04	25 (1)	1,014	0,0875	1,49	0,30
FT18P05	29 (0)	0,367	0,0466	1,63	0,30

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

Die in der Spalte 'Gültige Werte' jeweils in Klammern angegebene Anzahl an (zusätzlichen) Laborergebnissen wurde ausgeschlossen, weil der absolute Betrag des Z-Score über 5 lag. Der Richtwert 1,5 für den Quotienten aus Laborstandardabweichung und Zielstandardabweichung s_L/s_Z wurde mit Ausnahme des Prüfgutes FT18P04 stets überschritten und der Höchstwert 2,0 bei dem Prüfgut FT18P03 (unter Rundung auf eine Nachkommastelle) erreicht. Die Zuverlässigkeit der Bezugswerte ist bei zwei Prüfgütern eingeschränkt. Zwar wurden für alle Prüfgüter gültige Z-Score erhalten, doch zeigen diese Befunde im Bereich von Gehalten, die önologische Maßnahmen erfordern oder sogar den weinrechtlich zulässigen Höchstwert erreichen, 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 insgesamt zwischen 36 und 41 Laborergebnisse eingesandt, wobei jeweils 18 bis 23 Laborergebnisse automatisiert enzymatisch bestimmt wurden. Weitere 9 bis 10 Ergebnisse wurden mittels ^1H -Kernresonanzspektroskopie (^1H -NMR), Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und manueller enzymatischer Bestimmung erhalten. In der Gesamtzahl der Laborergebnisse sind für jedes Prüfgut 9 FTIR-Untersuchungsergebnisse enthalten.

Wie bei den vorangegangenen Laborvergleichsuntersuchungen seit mehreren Jahren beobachtet, führte die automatisierte enzymatische Bestimmung zu gegenüber den übrigen Verfahren (ohne FTIR) höheren Werten. Der Unterschied der Mittelwerte beider Datengruppen war bei allen fünf Prüfgütern signifikant. Bei gemeinsamer Auswertung aller Laborergebnisse prägen die automatisierten enzymatischen Ergebnisse den Bezugswert. Es ergeben sich Quotienten (s_L/s_{Ziel}), deren Wert, wie ebenfalls seit mehreren Jahren, insbesondere im Vorjahr beobachtet, stark erhöht oder für die Ermittlung gültiger Z-Score zu hoch ist. 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}	
FT18P01	22 (1)	0,707	1,49	0,32	9 (1)	0,586	1,28	0,43	+++
FT18P02	21 (0)	0,625	1,20	0,26	9 (0)	0,585	1,17	0,39	+
FT18P03	18 (1)	1,348	1,65	0,39	9 (0)	1,183	1,26	0,42	++
FT18P04	18 (0)	1,020	1,15	0,27	9 (0)	0,962	0,92	0,31	+
FT18P05	20 (0)	0,365	1,82	0,41	10 (0)	0,305	1,52	0,48	+++

Bei getrennter Auswertung waren die Quotienten s_L/s_{Ziel} unauffällig bis mäßig erhöht, für die Ergebnisse der automatisierten enzymatischen Bestimmungen zumindest numerisch höher als für die Ergebnisse der Gruppe der anderen Verfahren. Für letztere Gruppe war infolge der geringen Ergebnisanzahl die Zuverlässigkeit des Bezugswertes in der Regel jedoch leicht eingeschränkt, was auch für Ergebnisse der automatisierten enzymatischen Bestimmungen bei zwei Prüfgütern zutrifft. Es konnten für alle Datengruppen auf der Basis der Quotienten s_L/s_{Ziel} **gültige Z-Score** ermittelt werden, vor deren Bewertung zu Lasten eines Labors allenfalls die geringfügig eingeschränkte Zuverlässigkeit der Bezugswerte zu berücksichtigen ist.

Das Gesamtergebnis für diesen Parameter belegt in Anbetracht der signifikanten systematischen Unterschiede zwischen den Ergebnissen der eingesetzten Methoden, die bei den Rotwein-Prüfgütern weniger ausgeprägt war als bei den anderen Prüfgütern, die Notwendigkeit zur Aufklärung der Ursache der systematischen Differenzen.

4.2 Gesamte und L-Äpfelsäure

Bei Prüfgütern, die wie im vorliegenden Fall keinen Zusatz von D-Äpfelsäure erfahren haben, ist für die Parameter Gesamte und L-Äpfelsäure eine weitgehende Übereinstimmung der Bezugswerte bzw. Mittelwerte zu erwarten. Dies belegen die in Tabelle 6 und in Tabelle 7 zusammengestellten statistischen Kennzahlen für die laborübergreifenden Gesamtergebnisse aller Prüfgüter.

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}
FT18P01	11 (0)	3,118	0,0912	0,94	0,28
FT18P02	10 (1)	0,936	0,0438	1,05	0,33
FT18P03	12 (0)	2,608	0,1410	1,70	0,49
FT18P04	10 (0)	0,965	0,0512	1,20	0,38
FT18P05	13 (0)	1,289	0,0721	1,44	0,40

Für den Parameter **Gesamte Äpfelsäure**, liegen je Prüfgut mit 10 bis 13 nur eine geringe Anzahl gültiger Laborergebnisse vor. Diese wurden meist mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie erhalten. Die Quotienten s_L/s_{Ziel} liegen mit Ausnahme des Prüfgutes **FT18P03** im unauffälligen Bereich unter 1,5. **Die Übereinstimmung der Laborergebnisse ist damit erheblich besser als in den Vorjahren.** Daher werden für alle Prüfgüter **gültige Z-Score** erhalten. Die **Zuverlässigkeit** der Bezugswerte ist trotz der geringen Ergebnisanzahl bei den Prüfgütern FT18P01 und FT18P02 uneingeschränkt und bei den Prüfgütern FT18P04 und FT18P05 nur sehr geringfügig eingeschränkt. Lediglich bei dem Prüfgut FT18P03 ist die Unsicherheit des Bezugswertes zu berücksichtigen. Die stärkere Streuung der Laborergebnisse kann bei diesem Prüfgut durch dessen Beschaffenheit ist aber eher durch ein stärker abweichendes, noch nicht ausgeschlossenes Laborergebnis verursacht. Für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse ist die gegebene Unsicherheit des Bezugswertes in Anbetracht der angewandten, Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung stets ausreichend.

Obwohl bei enzymatischen Bestimmungsmethoden in der Regel eher eine geringere Streuung der Laborergebnisse als bei der Anwendung der HPLC beobachtet wird, trifft dies, wie Tabelle 7 verdeutlicht, auf die Gesamtergebnisse für den Parameter **L-Äpfelsäure** nicht zu.

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}
FT18P01	30 (3)	3,117	0,1618	1,68	0,31
FT18P02	29 (2)	0,949	0,0661	1,57	0,29
FT18P03	30 (1)	2,564	0,1345	1,64	0,30
FT18P04	28 (2)	0,983	0,0509	1,19	0,23
FT18P05	30 (2)	1,149	0,0642	1,36	0,25

Die Quotienten s_L/s_{Ziel} streuen bei diesem überwiegend automatisiert enzymatisch bestimmten Parameter um den Richtwert 1,5 und sind damit zum Teil leicht erhöht aber gegenüber dem Vorjahr ebenfalls verbessert. Infolge der gegenüber dem Parameter Gesamte Äpfelsäure etwa dreimal so hohen Anzahl an Laborergebnissen ist die Zuverlässigkeit der Bezugswerte stets gegeben. Die **Z-Score** sind **uneingeschränkt gültig**.

Für die Bestimmung der Gesamten Äpfelsäure mittels HPLC ist keine aus einem methodenprüfenden Ringversuch abgeleitete Vergleichsstandardabweichung bekannt. Für beide Parameter wird daher die Zielstandardabweichung aus der Vergleichsstandardabweichung des enzymatischen Bestimmungsverfahrens nach Methode OIV-MA-AS313-11 abgeleitet. Abschließend stellt sich daher für den Parameter L-Äpfelsäure die fachliche Frage, ob die Zielstandardabweichung unter primär analytischem Gesichtswinkel bei normaler Sorgfalt nicht eingehalten werden kann und damit zu streng ist oder ob aus önologischen bzw. wirtschaftlichen Gründen die vorliegende Streuung der Laborergebnisse akzeptiert wird. In diesem Fall ist die Empfehlung aus den Vorjahren zu wiederholen, dass ein **geeignetes Leistungskriterium** in Form einer Standardabweichung **entwickelt werden sollte**.

4.3 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure

Die Gehalte an **Gesamter Milchsäure** lagen bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfgütern in den, für die jeweilige Weinart, typischen Bereichen. Anders als im Vorjahr ergab sich keine Häufung ungewöhnlicher, insbesondere geringer Gehalte an Milchsäure. Bis auf eine als fehlerhaft zu bewertende Meldung wurden dementsprechend auch keine Unterschreitungen der Bestimmungsgrenze mitgeteilt. 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}
FT18P01	16 (1)	0,580	0,0690	1,94	0,48
FT18P02	18 (0)	2,422	0,2374	1,94	0,46
FT18P03	18 (0)	0,967	0,0902	1,62	0,38
FT18P04	15 (0)	3,027	0,2350	1,59	0,41
FT18P05	18 (1)	0,337	0,0428	1,86	0,44

Der Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} war dennoch mit Beträgen zwischen 1,6 und 1,9 gegenüber dem Richtwert stets so erhöht, dass bei je Prüfgut zwischen 15 und 19 Laborergebnissen für die Prüfgüter FT18P01 und FT18P02 eine merkliche und für die übrigen Prüfgüter eine geringfügig erhöhte Unsicherheit des Bezugswertes gegeben ist. Die **Gültigkeit** der **Z-Score** ist damit **etwas eingeschränkt**.

Zum Parameter **L-Milchsäure** wurden 26 bis 31 Laborergebnisse je Prüfgut eingesandt, die in Tabelle 9 für alle fünf Prüfgüter zusammengefasst sind. Dabei war auffällig, dass trotz überwiegend automatisierter enzymatischer Analytik insgesamt 10 Laborergebnisse, davon 6 wegen einer Abweichung um mehr als 50 % vom Median bei der Auswertung ausgeschlossen wurden. Hier muss von wesentlichen Fehlern bei der Durchführung der Analysen ausgegangen werden.

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}
FT18P01	29 (2)	0,447	0,0575	1,54	0,29
FT18P02	28 (1)	1,989	0,1473	1,38	0,26
FT18P03	27 (2)	0,587	0,0623	1,43	0,28
FT18P04	24 (2)	2,071	0,1549	1,42	0,29
FT18P05	26 (3)	0,264	0,0354	1,21	0,24

Bei der Auswertung der verbleibenden Laborergebnisse wurde der Richtwert 1,5 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} bei Rundung auf eine Nachkommastelle nicht überschritten. Damit war auch die Sicherheit der Bezugswerte gegeben. Die **Z-Score** für die Laborergebnisse sind daher **uneingeschränkt gültig**.

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

Die in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfgüter hatten keinen Zusatz von Ascorbinsäure erfahren. Daher waren bei Weißwein- und Rosé-Prüfgütern Gehalte unter der Bestimmungsgrenze und in der Folge keine Ermittlung gültiger Z-Score zu erwarten. Es wurde daher nur für die Rotwein-Prüfgüter FT18P02 und FT18P04 im Falle jodometrischer Bestimmung der Schwefligen Säure die Bestimmung der Reduktone unter Empfehlung einer Reaktionszeit von 20 Minuten für die Bindung der Freien Schwefligen Säure erbeten. Ungeachtet dieser Empfehlungen wurden zu den Prüfgütern, für die keine Bestimmung der Reduktone erbeten war, zwischen 17 und 29 Laborergebnisse vorgelegt, während für die Rotwein-Prüfgüter jeweils 41 Laborergebnisse eingesandt wurden, wobei allerdings die Empfehlung zur Reaktionszeit nur von rund 55 % der Einsender beachtet wurde.

Tabelle 10: Ergebnisse der Bestimmung der Reduktone

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw n. Horwitz (s_H)	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	23 (6)	4,19	1,04	0,519	2,00	0,42
FT18P02	36 (5)	18,72	4,48	1,91	2,35	0,39
FT18P03	16 (2)	4,30	1,50	0,557	2,69	0,67
FT18P04	34 (7)	15,89	4,09	1,73	2,36	0,40
FT18P05	13 (4)	4,62	1,83	0,628	2,92	0,81

Das Gesamtergebnis ist für alle fünf Prüfgüter in der Tabelle 10 durch beschreibende statistische Kennzahlen zusammengefasst. Zwischen 12,5 % und 23,5 % dieser Laborergebnisse wurden wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median bei der Auswertung nicht berücksichtigt. Für die Prüfgüter **FT18P02 bis FT18P05** ergaben sich Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} zwischen 2,4 und 2,9. Somit konnten – auch für die Rotwein-Prüfgüter – **keine gültigen Z-Score**

ermittelt werden. Lediglich im Fall des Prüfgutes **FT18P01**, bei dem der Quotient s_L/s_{Ziel} mit 2,0 den Höchstwert einstellte und die Zuverlässigkeit des Bezugswertes nur gering beeinträchtigt war, konnten formal noch gültige Z-Score ermittelt werden. Deren Aussagekraft ist in Anbetracht des Gesamtergebnisses dennoch aus fachlicher Sicht zweifelhaft. Insgesamt sind 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 in Anbetracht der durch die Bestimmungsverfahren geprägten Unterschiede in drei Gruppen aufgeteilt. In der ersten wurden durch **Destillations-** oder **photometrische Verfahren** bestimmte Laborergebnisse zusammengefasst. Die zweite Gruppe bildeten die Ergebnisse **jodometrischer Bestimmungen ohne Abzug der Reduktone**. Die dritte Gruppe bildeten die Laborergebnisse aus **jodometrischen Bestimmungen unter Abzug der Reduktone**. Die Bewertung erfolgte unter Bezug auf den Median der jeweiligen Datengruppe mit Leistungskriterien, die gemäß den im Abschnitt 2.4.3.6 dargestellten Regeln als Zielstandardabweichung berechnet wurden.

Die **verbindliche Bewertung** der Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure**, die nach **Destillations- und photometrischen Verfahren** bestimmt wurden, erfolgt unter Zusammenfassung aller mit diesen Verfahren erhaltenen Laborergebnisse, da sie verfahrensbedingt vom Gehalt an Reduktonen im Prüfgut unabhängig sind. Die statistischen Kenndaten der Gesamtergebnisse sind für alle fünf Prüfgüter in der Tabelle 11 zusammengefasst.

Tabelle 11: Ergebnisse der Bestimmung der Freien Schweflige Säure [mg/L] mit Destillations- und photometrische Verfahren

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw n. Horwitz (s_H)	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	20 (1)	30,40	5,20	2,88	1,81	0,40
FT18P02	18 (0)	48,62	7,49	4,53	1,65	0,39
FT18P03	17 (2)	29,24	4,94	2,86	1,73	0,42
FT18P04	18 (0)	40,23	5,88	3,81	1,55	0,36
FT18P05	19 (0)	24,01	3,33	2,38	1,40	0,32

Für die Prüfgüter **FT18P01** bis **FT18P03** ergaben sich mäßig erhöhte Werte der Kennzahl zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und in der Folge eine **geringfügig eingeschränkte** Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_H). Letzteres trifft auch für das Prüfgut **FT18P04** zu, bei dem der Richtwert für den Quotienten s_L/s_H erreicht wurde. Nur für das Prüfgut **FT18P05** ergaben sich somit **uneingeschränkt gültige Z-Score**.

Die hier zusammengefassten Laborergebnisse zeigen jedoch bei einer näheren Betrachtung der Daten häufig verfahrensabhängig sowohl unterschiedliche Mittelwerte als auch unterschiedliche Streuungen der Laborergebnisse. Daher sind wie hier oft erhöhte Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} bzw. eine Beeinträchtigung der Zuverlässigkeit des Bezugswertes zu beobachten. Für eine Auswertung, die diese Unterschiede berücksichtigt sind jedoch die Anzahlen der Ergebnisse je Methode zu gering. Dies ist z.B. für das Prüfgut FT18P01 aus Abschnitt 6.20.5 ersichtlich.

Innerhalb dieser Gruppe gilt das dem Destillationsverfahren OIV-MA-AS323-04A als Referenzverfahren. Auch die Anzahl der hiermit ermittelten Laborergebnisse ist in der Regel für eine darauf gegründete Bewertung der Laborergebnisse zu gering. Da die Anzahl dieser Laborergebnisse aber allmählich zunimmt, werden in der Tabelle 12 die deskriptiv-statistischen Gesamtergebnisse für dieses Verfahren **zur Information** zusammengefasst.

Tabelle 12: Ergebnisse der Bestimmung der Freien Schwefligen Säure nach dem Destillationsverfahren OIV-MA-AS323-04a

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw n. Horwitz (s_H)	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	7 (0)	30,51	4,43	2,76	1,60	0,61
FT18P02	10 (0)	52,91	3,82	4,71	0,81	0,26
FT18P03	10 (0)	30,79	6,16	2,93	2,10	0,66
- z_{Max} 4,5	9 (1)	29,19	3,74	2,91	1,29	0,43
FT18P04	9 (0)	44,55	3,45	4,02	0,86	0,29
FT18P05	10 (0)	24,82	3,34	2,45	1,36	0,43

Die Daten der Tabelle 12 zeigen, dass in der Mehrzahl unauffällige Werte des Quotienten s_L/s_{Ziel} erreicht werden. Sie demonstrieren am Beispiel des Prüfgutes FT18P01 die Auswirkung einer geringen Ergebniszahl auf die Zuverlässigkeit u_M/s_{Ziel} sowie am Beispiel des Prüfgutes FT18P03 die Auswirkung einzelner stark abweichender Laborergebnisse auf das Gesamtergebnis.

Die Auswertung der jodometrischen Laborergebnisse erfolgte jeweils einschließlich und ausschließlich des Beitrages der Reduktone. Die deskriptiv-statistischen Kennzahlen für die einschließlich des Gehaltes an Reduktonen mitgeteilten Laborergebnisse enthält Tabelle 13.

Tabelle 13: Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen der Freien Schwefligen Säure einschließlich der Reduktone [mg/L]

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw n. Horwitz (s_H)	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	78 (0)	29,76	3,97	2,80	1,42	0,16
FT18P02	28 (0)	56,73	4,98	5,00	1,00	0,19
FT18P03	30 (2)	29,29	5,62	2,75	2,04	0,37
FT18P04	25 (0)	49,99	3,54	4,44	0,80	0,16
FT18P05	28 (0)	27,70	3,27	2,59	1,26	0,24

Die entsprechenden Daten sind für die Gruppe der jodometrisch unter Abzug der Reduktone ermittelten Laborergebnisse in der Tabelle 14 zusammengefasst.

Tabelle 14: Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen der Freien Schwefligen Säure ausschließlich der Reduktone [mg/L]

	mitgeteilte Werte	gültige Werte ⁾	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw n. Horwitz (s_H) ^{**)}	Quotient s_L/s_H	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	15 (0)	31 (0)	28,04	4,53	2,79	1,62	0,29
FT18P02	10 (0)	34 (1)	38,98	7,33	5,00	1,47	0,25
FT18P03	11 (0)	19 (0)	30,07	6,89	2,75	2,50	0,57
FT18P04	11 (0)	35 (0)	34,94	7,46	4,44	1,68	0,28
FT18P05	12 (0)	19 (0)	25,24	3,67	2,59	1,42	0,32

⁾ Erweiterte Basis durch Nachberechnung von Laborergebnissen exclusive Reduktone

^{**)} Berechnet auf der Basis des Median der jodometrischen Laborergebnisse einschließlich der Reduktone

Zu dieser Gruppe der Laborergebnisse wurden, wie die Spalte "mitgeteilte Werte" der Tabelle 14 zeigt, in der Regel eine zu geringe Anzahl Laborergebnisse für eine gültige eigenständige Auswertung mitgeteilt. Daher wurde die Basis für die Auswertung erweitert, indem zusätzliche Werte aus ohne Reduktionabzug mitgeteilten Laborergebnissen und zugehörigen Reduktionwerten vom Auswerter berechnet wurden. Als Bezugswert wurde der Median aller unter Reduktionabzug erhaltenen Werte verwendet. Für die Ermittlung des Leistungskriteriums wurde gemäß den im Abschnitt 2.4.3.6 dargestellten Regeln derselbe Wert wie bei der Bewertung der Ergebnisse einschließlich der Reduktone verwendet.

Die Kenndaten zur Methodenbeherrschung (Quotient s_L/s_H) und zur Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Quotient u_M/s_{Ziel}) lagen für die Gruppe der jodometrisch ohne Reduktionabzug ermittelten Laborergebnisse mit nur einer Ausnahme unter den Richtwerten. Für die unter Reduktionabzug mitgeteilten Laborergebnisse ergaben sich stets höhere Beträge der Kenndaten, worin sich die unbefriedigende Vergleichbarkeit der Ergebnisse der Reduktionbestimmung niederschlägt. Insgesamt konnten dennoch für den Parameter Freie Schweflige Säure **in der Regel uneingeschränkt gültige Z-Score** erhalten werden. Lediglich bei dem Prüfgut **FT18P03** wurde bei den jodometrischen Laborergebnissen einschließlich der Reduktone der Höchstwert 2,0 des Quotienten erreicht und bei den **unter Abzug der Reduktone** mitgeteilten Ergebnissen auch nach Erweiterung der Datenbasis überschritten. Daher konnten für diese Datengruppe **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden.

In den Laborergebnismitteilungen zum Prüfgut **FT18P01** erfolgte für Ergebnisse **jodometrischer** Bestimmungen keine Differenzierung nach ohne oder mit Abzug der Reduktone mitgeteilten Laborergebnissen, da für beide Gruppen praktisch übereinstimmende Medianwerte und damit Z-Score erhalten wurden.

4.4.3 Gesamte Schweflige Säure

Wie im Abschnitt 2.4.3.6 ausgeführt, ergibt sich die verbindliche 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 15 zusammengefasst.

Tabelle 15: Ergebnisse von Destillationsverfahren zur Bestimmung der Gesamten Schweflige Säure [mg/L]

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s_L)	Zielstdabw exper. (s_{exp})	Quotient s_L/s_{exp}	Quotient u_M/s_{Ziel}
FT18P01	43 (0)	124,73	7,84	5,36	1,46	0,22
FT18P02	32 (0)	91,03	7,04	5,36	1,31	0,23
FT18P03	30 (2)	214,68	7,50	5,36	1,40	0,26
FT18P04	32 (0)	81,29	4,46	5,36	0,83	0,15
FT18P05	31 (0)	103,84	5,45	5,36	1,02	0,18

Für **alle Prüfgüter** wurden **gültige Z-Score** erhalten, da die Quotienten s_L/s_{Ziel} stets unter 1,5 lagen und die Zuverlässigkeit der Bezugswerte gegeben war.

Zusätzlich und vor allem als eine fachliche Orientierung, z.B. im Rahmen einer Fehlerursachensuche, wurde für die **jodometrisch bestimmten** Gehalte an Gesamter Schwefliger Säure eine Bewertung der Laborergebnisse unter Einschluss bzw. unter Ausschluss der Reduktone bei Bezug auf den Median der jeweiligen Datengruppe durchgeführt und in die Laborergebnismittelung aufgenommen. Für die **einschließlich** des Beitrages der Reduktone mitgeteilten Laborergebnisse sind die Gesamtergebnisse für alle Prüfgüter in der Tabelle 16 zusammengefasst.

Tabelle 16: Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen der Gesamten Schwefligen Säure [mg/L] einschließlich Reduktone

	gültige Werte	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s _L)	Zielstdabw. n. Horwitz (s _H)	Quotient s _L /s _H	Quotient u _M /s _{Ziel}
FT18P01	56 (0)	129,40	7,21	5,357	1,35	0,18
FT18P02	17 (0)	94,85	8,26	5,36	1,54	0,37
FT18P03	17 (1)	208,14	6,75	5,36	1,26	0,31
FT18P04	14 (1)	86,80	6,70	5,36	1,25	0,33
FT18P05	16 (1)	101,71	7,20	5,36	1,34	0,34

Für **alle Prüfgüter konnten gültige Z-Score** ermittelt werden. Nur bei dem Prüfgut **FT18P02** (Rotwein) ist eine geringe Beeinträchtigung der Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben.

Die Anzahl der **unter Abzug** des Beitrages der Reduktone mitgeteilten Laborergebnisse war wie bei dem Parameter Freie Schweflige Säure für eine eigenständige gültige Auswertung zu gering. Daher wurde wie bei diesem Parameter die Basis vom Auswerter durch Nachberechnung von Werten mit Abzug der Reduktone soweit möglich verstärkt. Die so erhaltenen Gesamtergebnisse für alle Prüfgüter sind in der Tabelle 17 zusammengefasst.

Tabelle 17: Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen der Gesamten Schwefligen Säure ausschließlich der Reduktone [mg/L]

	mitgeteilte Werte	gültige Werte ^{*)}	Mittelwert	Labor-Stdabw. (s _L)	Zielstdabw. n. Horwitz (s _H) ^{**)}	Quotient s _L /s _H	Quotient u _M /s _{Ziel}
FT18P01	9 (0)	22 (0)	129,58	8,42	5,357	1,57	0,34
FT18P02	6 (0)	22 (0)	79,33	11,36	5,36	2,12	0,45
FT18P03	8 (0)	12 (0)	211,53	11,74	5,36	2,19	0,63
FT18P04	6 (0)	19 (2)	73,91	11,01	5,36	2,06	0,47
FT18P05	8 (0)	12 (0)	102,21	7,45	5,36	1,39	0,40

^{*)} Erweiterte Basis durch Nachberechnung von Laborergebnissen exclusive Reduktone

^{**)} Berechnet auf der Basis des Median der jodometrischen Laborergebnisse einschließlich der Reduktone

Für die beiden Rotwein-Prüfgüter **FT18P02** und **FT18P04** sowie für das Weißwein-Prüfgut **FT18P03** konnten **keine gültigen Z-Score** ausgewiesen werden, weil die Quotienten s_L/s_{Ziel} den Höchstwert 2,0 überschritten. Zugleich ist bei den Prüfgütern FT18P02 und FT18P04 die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt und bei dem Prüfgut FT18P03 nicht gegeben. Auch bei dem Prüfgut FT18P05 war die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt. Die Z-Score dieser Laborergebnisse haben daher auch aus diesen Gründen allenfalls informative Bedeutung. Sie spiegeln wie bei dem Parameter Freie Schweflige Säure nachteilige Einflüsse der mangelhaften Vergleichbarkeit der Ergebnisse der Reduktonbestimmung wider.

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 FT18P01 und eine entsprechende Auswahl des Methoden-Code auf dem Registerblatt 'FTIR-Ergebnisse' der Datei zur Ergebnismitteilung vorgesehen.

5.1.2 Kodierung der Analysenmethode für Gesamtextrakt und Zuckerfreier 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 nur unzureichend genutzt, da offensichtlich von relativ vielen Teilnehmern übersehen wurde, dass abweichend von den anderen Parametern keine Vorauswahl eingestellt und daher eine eigene Auswahl erforderlich war. Fehlende Angaben wurden durch eine Nachfrage bei den Teilnehmern ergänzt, zeigten aber, dass bei den Teilnehmern erhebliche Unsicherheiten bei der Einordnung der eigenen Ergebnisse bestehen. Diese Unsicherheit dürfte auch bei Teilnehmern bestehen, die eine der angebotenen Möglichkeiten ausgewählt haben. 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 FT18P01 in den Abschnitten 6.6.4 und 6.7.4 dieses Berichtes dokumentiert.

5.1.3 Besondere Auswahl der Zielstandardabweichung für einzelne Parameter

Die Grundregel zur Bewertung der FTIR-Laborergebnisse mit einer Zielstandardabweichung, die den Matrixeinfluss auf die Streuung der FTIR-Untersuchungsergebnisse berücksichtigt als Leistungskriterium (siehe Abschnitt 2.4.1) war generell bei dem Parameter **Gesamtextrakt** sowie bei den Prüfgütern **FT18P02** und **FT18P04** für die Parameter **Vergärbare Zucker** und **Fructose** sowie für das Prüfgut **FT18P04** auch für den Parameter **Glucose** nicht erfüllt. Darüber hinaus erreichte bei dem Prüfgut **FT18P02** für **Glucose** und bei dem Prüfgut **FT18P03** für

Fructose die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden den Betrag der Übereinstimmungsstandardabweichung. Daher erfolgten die Berechnung der Z-Score und damit die Bewertung der Laborleistung mit der im Betrag größeren Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden.

Die FTIR-Messergebnisse für die Parameter **Acetat** 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-Score 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-Score 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 berücksichtigten, 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 entspre-

chenden 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-Score unmittelbar die Leistungsfähigkeit der eigenen Arbeitsumgebung (Gerätezustand, Eignung der Kalibrierung des jeweils betrachteten Parameters, Arbeitsweise bei der Durchführung der Messung). Bei ausgeprägten Matrixeffekten wird diese Aussage, gegebenenfalls nur für einzelne Parameter, beeinträchtigt.

Diese Prüfung kann grundsätzlich verbessert werden, wenn die mit dieser Methode erhaltenen Ergebnisse untereinander verglichen werden und eine einheitliche Kalibrierung verwendet wird, weil dann die Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens (s_{FTIR}) als Leistungskriterium herangezogen werden kann. Ihr Betrag ist für die Mehrzahl der Parameter deutlich kleiner als der zusätzliche Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung $s_{\bar{0}}$. Wird keine einheitliche Kalibrierung vorausgesetzt, so zeigt sich das Maß der Ausschöpfung der erreichbaren Vergleichbarkeit von FTIR-Ergebnissen untereinander.

Für jedes Prüfgut werden daher in einer eigenen Tabelle, z.B. für das Prüfgut FT18P01 in der nachfolgenden Tabelle 18, die wesentlichen beschreibenden Daten einer ausschließlich die FTIR-Ergebnisse berücksichtigenden Auswertung zusammengefasst. Diese wurden nicht unter Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse, wie bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren, sondern vereinfacht durch ein robustes Verfahren zur Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung erhalten. Hierbei werden Ausreißer nicht ausgeschlossen. Der Median aller Messergebnisse einschließlich der Ausreißer bleibt erhalten aber der Einfluss von Ausreißern auf Mittelwert und Standardabweichung wird vermindert.

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

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

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

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

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

5.3 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen für das Prüfgut FT18P01

Für das Prüfgut FT18P01 zeigt der in Tabelle 18 durchgeführte Vergleich der in dieser Laborvergleichsuntersuchung gefundenen Standardabweichungen der Laborergebnisse (Spalte "Labor-Stdabw. s_L ") mit den nach Horwitz berechneten Standardabweichungen (Spalte "Zielstdabw. n. Horwitz s_H ") in der Spalte "Quotient s_L/s_H ", dass bei den Messungen mit den Laborkalibrierungen nur für etwa die Hälfte der Parameter ein vergleichbarer Wert, d.h. $s_L/s_H < 1,5$, erreicht wurde. Dabei zeigt ein Vergleich der Standardabweichungen nach Horwitz mit den experimentell erhaltenen Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw. exp. FTIR, s_{FTIR} "), dass für die Mehrzahl der Parameter Quotienten unter 1,5 erreichbar sind. Das Ergebnis ist noch ungünstiger bei einem Vergleich der Standardabweichungen der Laborergebnisse (s_L) mit den Vergleichsstandardabweichungen (s_{FTIR}). Wie die Daten in Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR} " zeigen, wurde nur bei den Parametern Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Glycerin, Weinsäure, Freie und 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.

Tabelle 18: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut (FT18P01)

Parameter	alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw.	Zielstdabw n. Horwitz	Zielstdabw exp. FTIR	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
				s_L	s_H	s_{FTIR}			
Relative Dichte 20 °C/20 °C	78	0,99874	0,998720	0,000220		0,000146		1,51	0,17
Vorhandener Alkohol (g/L)	81	88,617	88,550	0,959	2,551	0,739	0,38	1,30	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	49	35,353	35,300	0,727	1,168	0,415	0,62	1,75	0,25
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	75	14,194	14,310	0,724	0,542	0,354	1,34	2,05	0,24
Vergärbare Zucker(S) (g/L)	79	13,964	14,000	0,728	0,532	0,354	1,37	2,06	0,23
Glucose (g/L)	77	4,579	4,580	0,455	0,206	0,288	2,21	1,58	0,18
Fructose (g/L)	77	9,343	9,310	0,445	0,376	0,222	1,18	2,01	0,23
Glycerin (g/L)	68	5,882	5,890	0,380	0,255	0,265	1,49	1,43	0,17
pH-Wert	78	3,266	3,260	0,0673		0,0188		3,58	0,41
Gesamtsäure (g/L)	82	7,112	7,110	0,177	0,299	0,0816	0,59	2,18	0,24
Weinsäure (g/L)	73	2,000	2,000	0,201	0,102	0,132	1,97	1,52	0,18
Flüchtige Säure (g/L)	73	0,652	0,640	0,0877	0,0387	0,0427	2,27	2,05	0,24
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	73	3,155	3,190	0,298	0,152	0,0975	1,97	3,05	0,36
Gesamte Milchsäure (g/L)	70	0,463	0,440	0,190	0,0282	0,0805	6,75	2,36	0,28
Freie Schweflige Säure (mg/L)	20	29,72	29,00	6,45	2,80	4,46	2,31	1,45	0,32
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	21	132,30	131,26	13,49	10,08	10,08	1,34	1,34	0,29

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 18:

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

Zu mehreren Parametern werden nachstehend ausführlichere Anmerkungen gemacht, die sich in der Regel nicht nur auf das Prüfgut FT18P01 beziehen, sondern auch auf die Ergebnisse bei den weiteren Prüfgütern übertragbar sind.

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

In der Tabelle 18 fällt weiter der Parameter **pH-Wert** durch einen besonders hohen Wert des Quotienten s_L/s_{FTIR} auf und gibt damit ein Beispiel für den Unterschied zwischen der üblichen Verfahrensweise bei der Auswertung der Laborergebnisse unter Ausschluss von Messwerten mit extremen Werten des Z-Score und der Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung mit robusten statistischen Methoden, da bei diesem Parameter in vorangegangenen Laborver-gleichsuntersuchungen wiederholt ein erhöhter Anteil von auszuschließender Ergebnisse auf-trat. Die in Betracht kommenden Ursachen sind bereits oben angesprochen worden, wobei der Befund vor allem auf die Verwendung ungeeigneter Parameterkalibrierungen deutet, weil nach früheren Erfahrungen die experimentell ermittelte Vergleichsstandardabweichung von $\pm 0,0188$ bei Neuberechnung der Laborergebnisse aus den Rohdaten praktisch eingehalten wurde.

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

Dahingegen ist das unbefriedigende Gesamtergebnis für den Parameter **Milchsäure** nicht be-achtlich, weil der vorliegende Gehalt unter der Bestimmungsgrenze liegt und daher keine zuver-lässige Bestimmung möglich ist. Aus diesem Grund werden für diesen Parameter weder im Ab-schnitt 6.18.3 noch in den Laborergebnismitteilungen Z-Score ausgewiesen

Durch die Verwendung der Zielstandardabweichung s_0 zur Bewertung der Laborergebnisse werden Effekte der Matrix der Proben nur "statistisch", d.h. gemäß einer Zufallsverteilung be-rücksichtigt. Bei jeder Probe liegt aber ein konkreter Matrixeffekt vor, der – auch abhängig von der im einzelnen Labor verwendeten Kalibrierung – im Einzelfall zu einem erheblichen systema-tischen Unterschied der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Ergebnissen der herkömmlichen Ana-lytik führen kann. Für die Gesamtheit bzw. den "Durchschnitt" und geprägt von der jeweils am häufigsten eingesetzten Parameterkalibrierung gibt ein Vergleich der Mediane der FTIR-Ergebnisse und der herkömmlichen Ergebnisse einen Hinweis auf einen möglichen besonderen Matrixeffekt bei dem jeweils betrachteten Prüfgut, hier FT18P01.

Tabelle 19: Vergleich herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgutes FT18P01

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw $s_{\bar{y}}$	$Z_{\bar{y}}$ -Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99886	0,99862	0,000240	0,000190	1,26
Vorhandener Alkohol [g/L]	88,550	88,300	0,250	0,886	0,28
Gesamtextrakt [g/L]	35,300	35,000	0,300	0,594	0,51
Vergärbare Zucker ('wie mitgeteilt') [g/L]	14,310	14,350	-0,040	0,584	-0,07
Vergärbare Zucker (Summe) [g/L]	14,000	14,000	0,000	0,584	0,00
Glucose [g/L]	4,580	4,410	0,170	0,408	0,42
Fructose [g/L]	9,310	9,600	-0,290	0,330	-0,88
Glycerin [g/L]	5,890	5,900	-0,010	0,348	-0,03
pH-Wert	3,260	3,260	0,000	0,049	0,00
Gesamtsäure [g/L]	7,110	7,100	0,010	0,145	0,07
Weinsäure [g/L]	2,000	2,170	-0,170	0,227	-0,75
Flüchtige Säure [g/L]	0,640	0,656	-0,016	0,089	-0,18
Gesamte Äpfelsäure [g/L]	3,190	3,120	0,070	0,218	0,32
Gesamte Milchsäure [g/L]	0,440	0,581	-0,141	0,209	-0,67
Freie Schweflige Säure [mg/L]	29,00	30,00	-1,00	2,88	-0,35
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	131,26	124,00	7,26	9,60	0,76

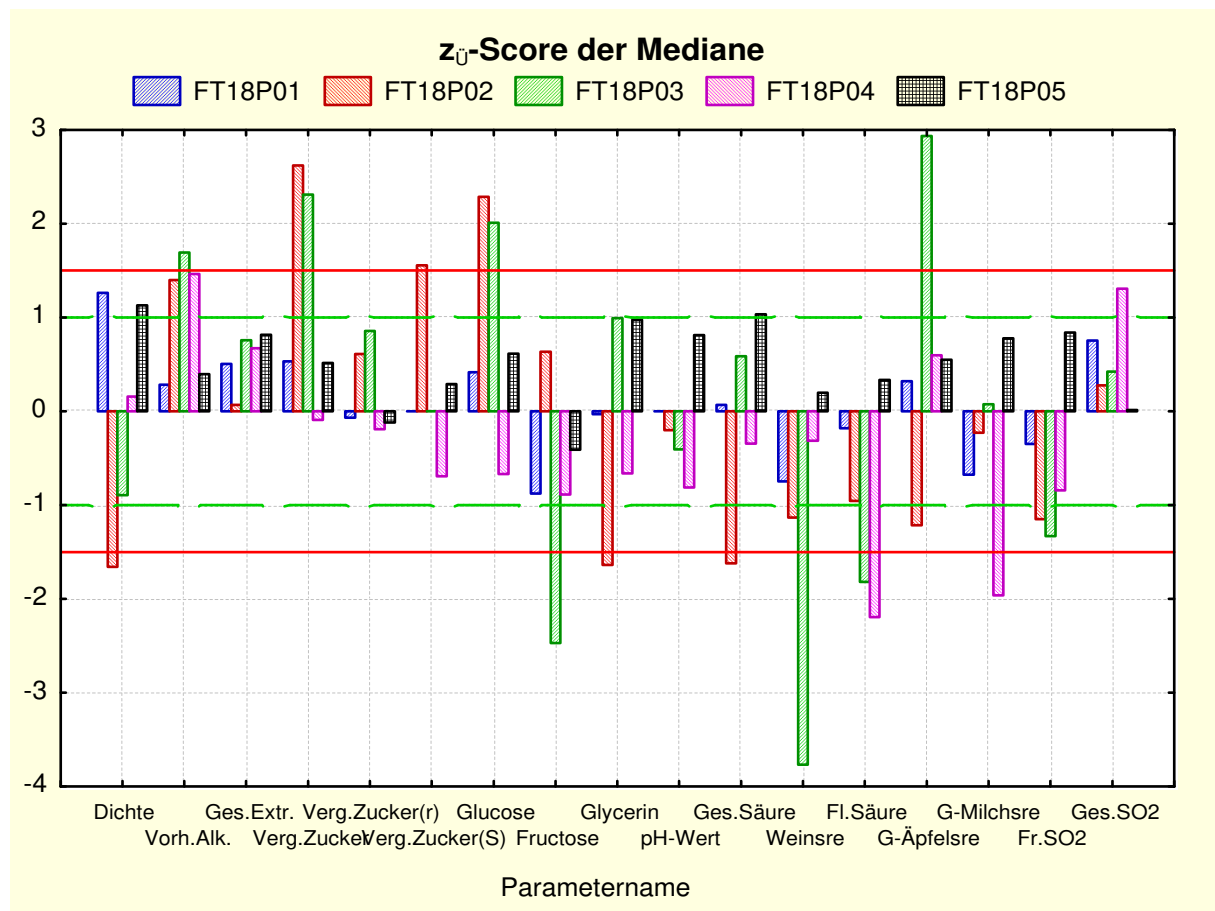
Hierzu sind in Tabelle 19 die Abweichung des Median der FTIR-Ergebnisse vom Median der Ergebnisse herkömmlicher Methoden sowie die Z-Score zusammengestellt, die nach Division der Differenz durch die Matrixeffekte berücksichtigende Zielstandardabweichung ($s_{\bar{y}}$) erhalten werden. Bei dem Parameter Gesamtextrakt wurde nicht die strengere Übereinstimmungsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens sondern wie bei der Bewertung der Laborergebnisse die Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens verwendet.

Bei dem vorliegenden Prüfgut FT18P01 stimmen die Mediane der FTIR-Ergebnisse mit denen der herkömmlichen Untersuchungsverfahren gut überein, d.h. der absolute Betrag des Z-Score der Differenz der Mediane liegt deutlich unter eins. Derartige Differenzen werden auch zwischen den Ergebnissen verschiedener herkömmlicher Verfahren beobachtet. Sie sind nicht signifikant bzw. für die praktische Nutzung der Untersuchungsergebnisse nicht relevant. Die **$Z_{\bar{y}}$ -Score** der FTIR-Laborergebnisse sind daher **gültig** und sehr gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen geeignet, zumal die Unsicherheit der Bezugswerte in Relation zur Zielstandardabweichung $s_{\bar{y}}$ stets eine ausreichende Zuverlässigkeit ergibt. Nur bei dem Parameter **Relative Dichte** ist ein geringer Matrixeffekt zu berücksichtigen.

5.4 Gegenüberstellung herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse für alle Prüfgüter

Einen – an dieser Stelle vorausschauenden – und zugleich zusammenfassenden Überblick über die Eignung der FTIR-Untersuchungsergebnisse zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen gibt auf der Grundlage von Gegenüberstellungen aller herkömmlichen und FTIR-Untersuchungsergebnisse analog zur Tabelle 19 für alle Prüfgüter die nachstehende Abbildung. Sie zeigt für die Gesamtheit der eingesetzten Kalibrierungen die $Z_{\bar{y}}$ -Score der Mediane der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Medianen der herkömmlichen Ergebnisse und gibt eine Orientierung über das Ausmaß der (mittleren) Matrixeffekte für jeden Parameter bei den in dieser Laborvergleichsuntersuchung eingesetzten Prüfmaterialien. Die kritischen Grenzen für die $Z_{\bar{y}}$ -Score sind in der Graphik durch grüne bzw. rote Linien markiert. Liegt der absolute Betrag der dargestellten $Z_{\bar{y}}$ -Score über 1, ist ein erhöhter Anteil von FTIR-Untersuchungsergebnissen mit unbefriedigendem, d.h. über dem Absolutbetrag von 2 (d.h. mit über + 2 bzw. unter -2) liegen-

den Z-Score zu erwarten. Wenn der $Z_{\bar{0}}$ -Score des Median über 1,5 liegt, kann der unbefriedigende Z-Score eines einzelnen Laborergebnisses nicht ohne kritische, alle Umstände umfassende Betrachtung als zutreffende Beschreibung der Laborleistung bewertet werden.



Zunächst zeigt eine globale Betrachtung der Graphik, dass bei der Mehrzahl der Parameter systematische Abweichungen ($|Z_{\bar{0}}| > 1$) zwischen den herkömmlichen und den FTIR-Ergebnissen auftreten. Hierbei sind vor allem die Prüfgüter FT18P02 (Acolon) und FT18P03 (stark essigstichiger Weißwein) auffällig. Dennoch liegen für die Mehrzahl der Parameter/Prüfgut-Kombinationen (51 von 75) vernachlässigbare Matrixeffekte vor. Hierbei wurden die Varianten 'Verg. Zucker(r)' und 'Verg. Zucker(S)' der Auswertung für den Parameter Vergärbare Zucker nicht mitgezählt. Keine Hinweise auf wesentliche systematische Unterschiede liegen für alle Prüfgüter jedoch nur bei den Parametern Gesamtextrakt und pH-Wert sowie bei dem Vergleich zwischen reduktometrisch bestimmten Werten für Vergärbare Zucker (Verg. Zucker(r)) und den FTIR-Messergebnissen vor. Es ist vielleicht nicht zufällig, dass das gute Ergebnis bei dieser Kombination den anzunehmenden Gegebenheiten bei der Entwicklung der Basiskalibrierung für Vergärbare Zucker entspricht. Bei diesen Parametern und bei allen unauffälligen Parameter/Prüfgut-Kombinationen charakterisieren die Z-Score 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.

Von den insgesamt 25 Parameter/Prüfgut-Kombinationen, bei denen der Betrag des z_{ij} -Score ($|z_{ij}| > 1$) den Wert eins erreicht oder überschreitet, entfallen allein 10, davon 6 mit einem z_{ij} -Score-Betrag $> 1,5$, auf das Prüfgut **FT18P02**, das aus Wein und Süßreserve der seltenen Rebsorte Acolon hergestellt wurde. Weitere 8 auffällige Parameter/Prüfgut-Kombinationen, davon 7 mit einem z_{ij} -Score-Betrag $> 1,5$, entfallen auf das Prüfgut **FT18P03**, das unter Verwendung von 35 % eines stark essigstichigen Weißweines hergestellt wurde. Weitere 4 auffällige Kombinationen, davon 2 mit einem z_{ij} -Score-Betrag $> 1,5$, entfallen auf das Prüfgut FT18P04 einem ebenfalls essigstichigen Dornfelder Rotwein. Es liegt nahe anzunehmen, dass hierfür Unterschiede in der Matrix ursächlich sind, die in der Rebsorte bzw. in der mikrobiologischen Geschichte der Erzeugnisse begründet sind. War derartiges Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen nicht ausreichend vertreten, so werden sie durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen. Dies gilt insbesondere für den Parameter Flüchtige Säure, bei dem für eine verbreitete Basiskalibrierung bekannt ist, dass sie erhöhte Gehalte an Flüchtiger Säure unterschätzt. Unbefriedigende Z-Score der FTIR-Laborergebnisse sind bei derartigen Prüfgütern nicht ungewöhnlich und die Z-Score der eigenen FTIR-Messergebnisse unter Berücksichtigung dieser Möglichkeit zu bewerten.

6 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern

6.1 Berechnete Parameter

Bei dem Prüfgut Weißwein (FT18P01) wurden von allen Laboratorien die Angaben zu den berechneten Parametern gefordert. Diese Angaben erfolgten vollständig. 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 FT18P01 dennoch eine solche Bewertung durchgeführt.

6.2 Darstellung der analytischen Ergebnisse

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

6.2.1 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 ($s_{\bar{U}_{FTIR}}$)		
Zeile 11:	Horrat-Wert (s_L/s_H): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 8		
Zeile 12:	Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$): Quotient der Werte in Zeile 6 und Zeile 9		
Zeile 13:	Quotient ($s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$): 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 ($u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 10		

6.2.3 Aufbau der Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren

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

6.2.4 Aufbau der Graphiken

Zur Veranschaulichung und zum optischen Vergleich werden für jeden Parameter die Ergebnisse als Abweichungen vom Median der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden graphisch dargestellt. Die Graphiken geben einen Eindruck über die Verteilung der Analysendaten. Die Darstellung wurde so gewählt, dass die Graphiken möglichst übersichtlich sind. Hierzu wurde die Skala so gewählt, dass die Abweichungsbeträge in der Regel vollständig dargestellt sind. Es wird in begrenztem Maß Kauf genommen, dass bei erheblichen Abweichungen einzelner Labo-

ratorien 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-Score kann der Laborergebnistabelle entnommen werden. Zur Verbesserung der Übersichtlichkeit wird zur Grundlinie der Graphiken nur jede zweite bzw. dritte Auswertenummer angegeben, wenn mehr als 50 Ergebnisse dargestellt oder die Auswertenummern dreistellig sind.

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

6.3 Relative Dichte 20 °C/20 °C

6.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99858	-0,000040	-0,30	
02	LwK 8.1	0,99860	-0,000020	-0,15	
04	LwK 8.4	0,99861	-0,000010	-0,08	
05	LwK 8.4	0,99856	-0,000060	-0,45	
06	LwK 8.4	0,99867	0,000050	0,38	
07	LwK 8.4	0,99866	0,000040	0,30	
11	LwK 8.4	0,99874	0,000120	0,91	
12	LwK 8.4	0,99866	0,000040	0,30	
13	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
14	LwK 8.4	0,99863	0,000010	0,08	
15	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
16	LwK 8.4	0,99850	-0,000120	-0,91	
17	LwK 8.4	0,99861	-0,000010	-0,08	
19	LwK 8.4	0,99850	-0,000120	-0,91	
20	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
21	LwK 8.4	0,99900	0,000380	2,88	
22	LwK 8.4	0,99855	-0,000070	-0,53	
23	LwK 8.4	0,99880	0,000180	1,36	
24	LwK 8.4	0,99853	-0,000090	-0,68	
25	LwK 8.4	0,99863	0,000010	0,08	
26	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
27	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
28	LwK 8.4	0,99850	-0,000120	-0,91	
29	LwK 8.4	0,99864	0,000020	0,15	
30	LwK 8.1	0,99860	-0,000020	-0,15	
31	LwK 8.4	0,99866	0,000040	0,30	
32	LwK 8.4	0,99863	0,000010	0,08	
33	LwK 8.1	0,99870	0,000080	0,61	
34	LwK 8.4	0,99872	0,000100	0,76	
35	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
37	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
38	LwK 8.3	0,99842	-0,000200	-1,52	
39	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
40	LwK 8.4	0,99865	0,000030	0,23	
41	LwK 8.4	0,99857	-0,000050	-0,38	
42	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
43	LwK 8.4	0,99864	0,000020	0,15	
44	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
45	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
46	LwK 8.4	0,99861	-0,000010	-0,08	
47	LwK 8.4	0,99859	-0,000030	-0,23	
48	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
49	LwK 8.4	0,99854	-0,000080	-0,61	
50	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
51	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
53	LwK 8.4	0,99880	0,000180	1,36	
55	LwK 8.4	0,99204	-0,006580	-49,85	(**)
56	LwK 8.4	0,99853	-0,000090	-0,68	
57	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
58	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
59	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
60	LwK 8.4	0,99820	-0,000420	-3,18	
61	LwK 8.4	0,99880	0,000180	1,36	
63	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
64	LwK 8.4	0,99890	0,000280	2,12	
68	LwK 8.4	0,99865	0,000030	0,23	
74	LwK 8.4	0,99890	0,000280	2,12	
81	LwK 8.4	0,99958	0,000960	7,27	(**)
84	LwK 8.2	0,99680	-0,001820	-13,79	(**)
86	LwK 8.4	0,99871	0,000090	0,68	
87	LwK 8.1	0,99865	0,000030	0,23	
92	LwK 8.4	0,99856	-0,000060	-0,45	
111	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
112	LwK 8.4	0,99859	-0,000030	-0,23	
113	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
114	LwK 8.1	0,99850	-0,000120	-0,91	
115	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
116	LwK 8.2	0,99880	0,000180	1,36	
117	LwK 8.2	0,99850	-0,000120	-0,91	
118	LwK 8.4	0,99810	-0,000520	-3,94	
119	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
120	LwK 8.2	0,99880	0,000180	1,36	
121	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
122	LwK 8.4	0,99861	-0,000010	-0,08	
123	LwK 8.4	0,99868	0,000060	0,45	
124	LwK 8.4	0,99864	0,000020	0,15	
125	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
126	LwK 8.4	0,99864	0,000019	0,14	
127	LwK 8.4	0,99868	0,000060	0,45	
128	LwK 8.1	0,99870	0,000080	0,61	
129	LwK 8.1	0,99860	-0,000020	-0,15	
130	LwK 8.1	0,99850	-0,000120	-0,91	
131	LwK 8.4	0,99850	-0,000120	-0,91	
132	LwK 8.4	0,99874	0,000120	0,91	
133	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
134	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
135	LwK 8.1	0,99840	-0,000220	-1,67	
136	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
137	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
138	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
139	LwK 8.4	0,99874	0,000120	0,91	
140	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
141	LwK 8.1	0,99860	-0,000020	-0,15	
142	LwK 8.4	0,99862	0,000000	0,00	
143	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
144	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
145	LwK 8.1	0,99890	0,000280	2,12	
146	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
147	LwK 8.1	0,99890	0,000280	2,12	
148	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	
149	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
150	LwK 8.4	0,99870	0,000080	0,61	
151	LwK 8.2	0,99820	-0,000420	-3,18	
152	LwK 8.4	0,99869	0,000070	0,53	
153	LwK 8.4	0,99860	-0,000020	-0,15	

6.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
202	FTIR	0,99877	0,000150	0,79	
203	FTIR	0,99846	-0,000160	-0,84	
204	FTIR	0,99903	0,000410	2,16	
205	FTIR	0,99850	-0,000120	-0,63	
206	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
207	FTIR	0,99857	-0,000050	-0,26	
208	FTIR	0,99844	-0,000180	-0,95	
209	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
210	FTIR	0,99863	0,000010	0,05	
211	FTIR	0,99876	0,000140	0,74	
212	FTIR	0,99875	0,000130	0,68	
213	FTIR	0,99850	-0,000120	-0,63	
214	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
216	FTIR	0,99830	-0,000320	-1,68	
217	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
218	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
219	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	0,99885	0,000230	1,21	
221	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
222	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
223	FTIR	0,99866	0,000040	0,21	
224	FTIR	0,99864	0,000020	0,11	
225	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
226	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
227	FTIR	0,99886	0,000240	1,26	
228	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
229	FTIR	0,99885	0,000230	1,21	
230	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
231	FTIR	0,99849	-0,000130	-0,68	
233	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
235	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
236	FTIR	0,99890	0,000280	1,47	
237	FTIR	0,99896	0,000340	1,79	
238	FTIR	0,99916	0,000540	2,84	
241	FTIR	0,99874	0,000120	0,63	
242	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
243	FTIR	0,99863	0,000010	0,05	
244	FTIR	0,99850	-0,000120	-0,63	
245	FTIR	0,99890	0,000280	1,47	
246	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
247	FTIR	0,99850	-0,000120	-0,63	
249	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
250	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
251	FTIR	0,99890	0,000280	1,47	
254	FTIR	0,99910	0,000480	2,53	
255	FTIR	0,99900	0,000380	2,00	
256	FTIR	0,99877	0,000150	0,79	
257	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
258	FTIR	0,99830	-0,000320	-1,68	
259	FTIR	0,99868	0,000060	0,32	
260	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
261	FTIR	0,99880	0,000180	0,95	
262	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
263	FTIR	0,99850	-0,000120	-0,63	
264	FTIR	0,99900	0,000380	2,00	
265	FTIR	0,99910	0,000480	2,53	
266	FTIR	0,99854	-0,000080	-0,42	
267	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
268	FTIR	0,99915	0,000530	2,79	
269	FTIR	0,99930	0,000680	3,58	
270	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
271	FTIR	0,99896	0,000340	1,79	
273	FTIR	0,99908	0,000460	2,42	
274	FTIR	0,99830	-0,000320	-1,68	
275	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
276	FTIR	0,99890	0,000280	1,47	
277	FTIR	0,99890	0,000280	1,47	
278	FTIR	0,99900	0,000380	2,00	
280	FTIR	0,99790	-0,000720	-3,79	
281	FTIR	0,99840	-0,000220	-1,16	
282	FTIR	0,99910	0,000480	2,53	
283	FTIR	0,99853	-0,000090	-0,47	
284	FTIR	0,99720	-0,001420	-7,47	(**)
322	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	
338	FTIR	0,99916	0,000540	2,84	
349	FTIR	0,99860	-0,000020	-0,11	
363	FTIR	0,99870	0,000080	0,42	

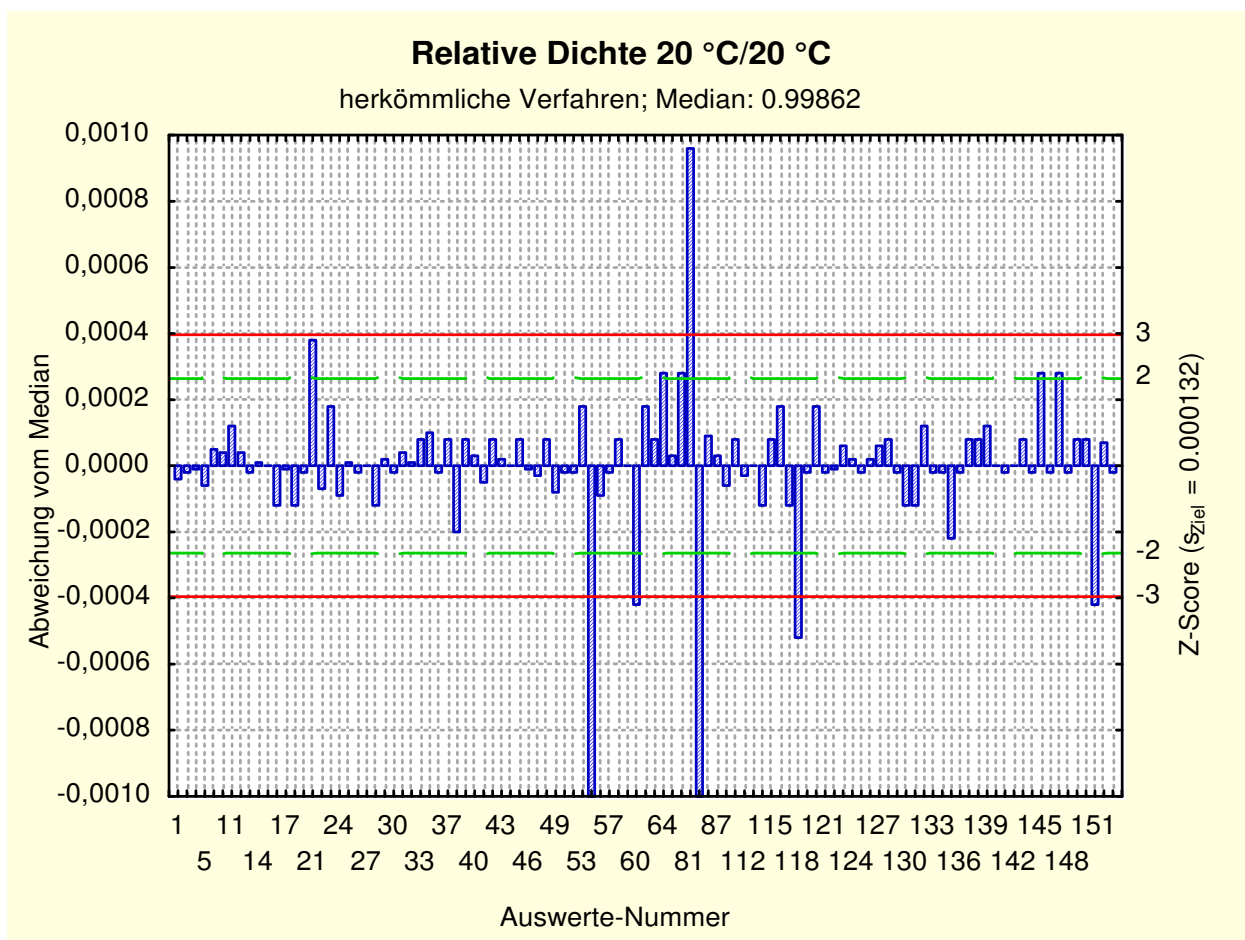
(**) Der Messwert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der hekömmlichen Werte ab.

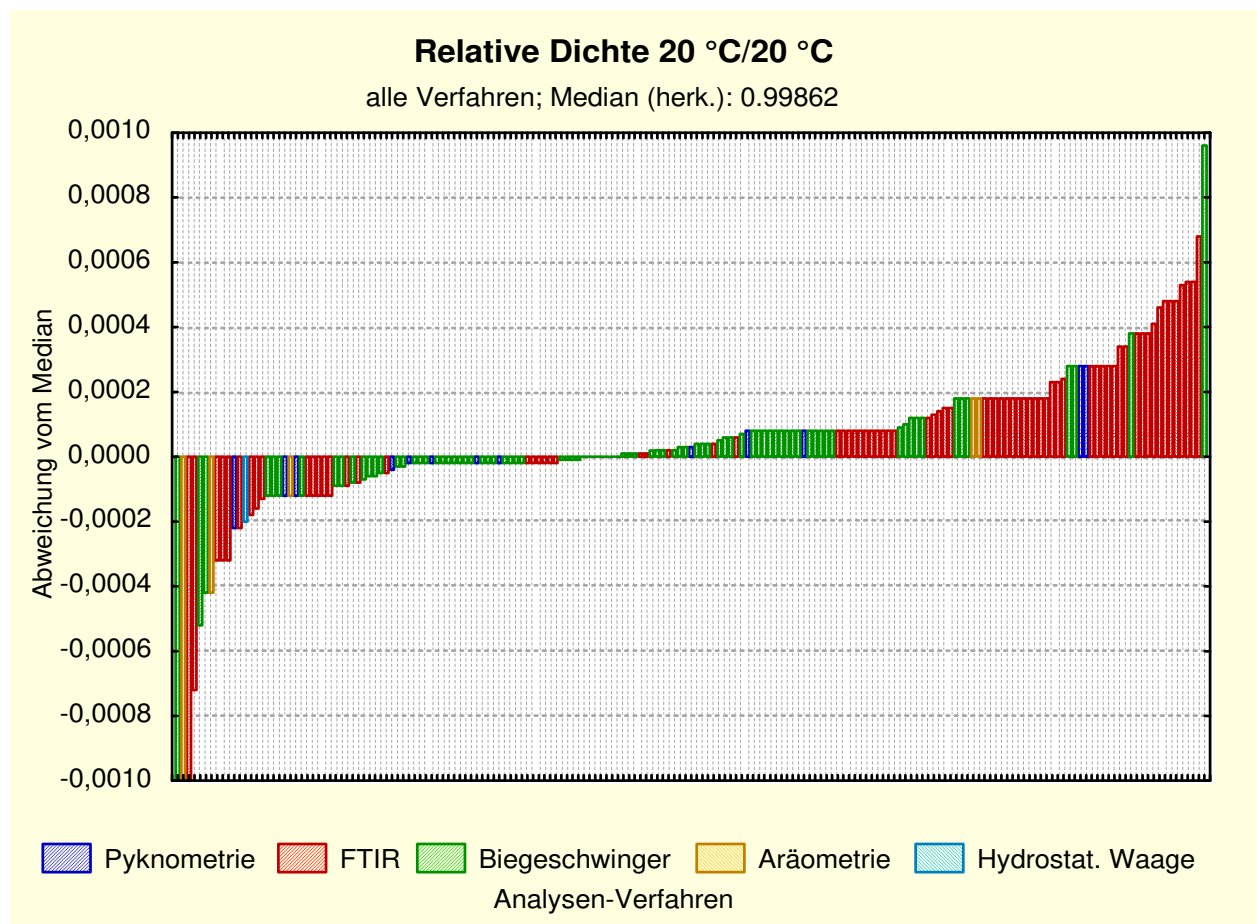
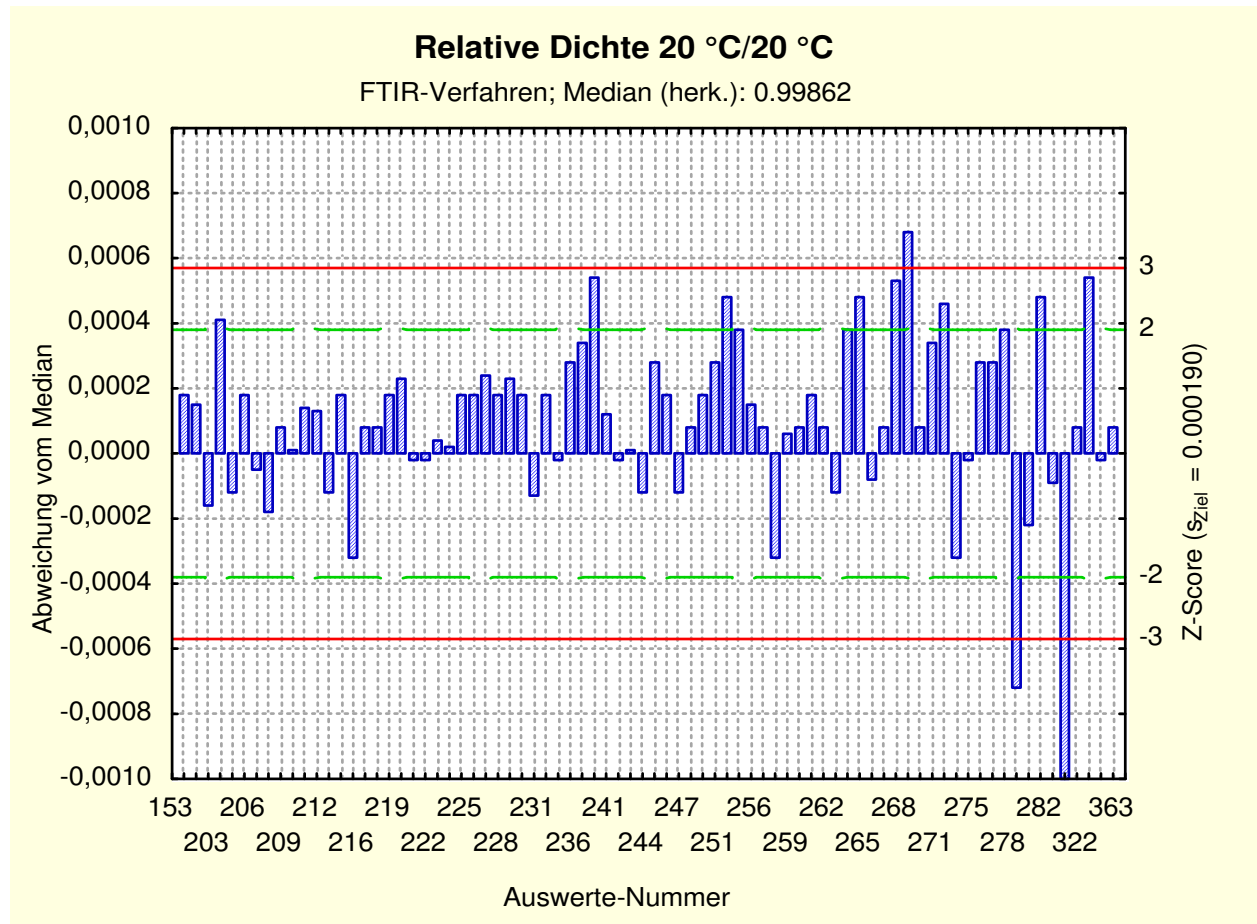
6.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	105	102
Minimalwert	0,99204	0,99810
Mittelwert	0,998560	0,998631
Median	0,998620	0,998620
Maximalwert	0,99958	0,99900
Standardabweichung (s_L)	0,000685	0,000128
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000067	0,000013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	5,19	0,97
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	3,61	0,67
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,51	0,10
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,35	0,07

6.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	13	0,99862	0,000135
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	5	0,99824	0,000901
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2B	1	0,99842	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	86	0,99864	0,000075
	herkömmliche Verfahren	105	0,99863	0,000091
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,99874	0,000220





6.4 Gesamtalkohol [g/L]

6.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 1.1 (FTIR)	96,19	0,890	0,33	0,84	
06	LwK 1.1 (herk.)	94,50	-0,800	-0,29	-0,75	
07	LwK 1.1 (herk.)	95,85	0,550	0,20	0,52	
11	LwK 1.1 (herk.)	95,50	0,200	0,07	0,19	
12	LwK 1.1 (herk.)	95,40	0,100	0,04	0,09	
13	LwK 1.1 (herk.)	95,10	-0,200	-0,07	-0,19	
14	LwK 1.1 (herk.)	93,80	-1,500	-0,55	-1,41	
15	LwK 1.1 (herk.)	95,90	0,600	0,22	0,56	
16	LwK 1.1 (herk.)	95,58	0,280	0,10	0,26	
17	LwK 1.1 (herk.)	96,20	0,900	0,33	0,85	
19	LwK 1.1 (FTIR)	96,20	0,900	0,33	0,85	
20	LwK 1.1 (herk.)	95,80	0,500	0,18	0,47	
21	LwK 1.1 (herk.)	95,40	0,100	0,04	0,09	
22	LwK 1.1 (herk.)	94,50	-0,800	-0,29	-0,75	
23	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
24	LwK 1.1 (NMR)	95,30	0,000	0,00	0,00	
25	LwK 1.1 (herk.)	94,20	-1,100	-0,41	-1,03	
26	LwK 1.1 (herk.)	95,50	0,200	0,07	0,19	
27	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
28	LwK 1.1 (herk.)	95,80	0,500	0,18	0,47	
30	LwK 1.1 (herk.)	95,20	-0,100	-0,04	-0,09	
32	LwK 1.1 (herk.)	94,90	-0,400	-0,15	-0,38	
33	LwK 1.1 (herk.)	93,81	-1,490	-0,55	-1,40	
34	LwK 1.1 (herk.)	94,50	-0,800	-0,29	-0,75	
35	LwK 1.1 (FTIR)	95,70	0,400	0,15	0,38	
36	LwK 1.1 (herk.)	96,10	0,800	0,29	0,75	
38	LwK 1.1 (herk.)	95,37	0,070	0,03	0,07	
39	LwK 1.1 (herk.)	96,40	1,100	0,41	1,03	
40	LwK 1.1 (herk.)	94,90	-0,400	-0,15	-0,38	
42	k. A.	94,67	-0,630	-0,23	-0,59	
43	LwK 1.1 (herk.)	95,00	-0,300	-0,11	-0,28	
44	LwK 1.1 (herk.)	96,50	1,200	0,44	1,13	
45	LwK 1.1 (herk.)	94,70	-0,600	-0,22	-0,56	
46	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
47	LwK 1.1 (herk.)	95,60	0,300	0,11	0,28	
48	LwK 1.1 (herk.)	95,10	-0,200	-0,07	-0,19	
49	LwK 1.1 (herk.)	94,60	-0,700	-0,26	-0,66	
50	k. A.	95,62	0,320	0,12	0,30	
51	LwK 1.1 (FTIR)	94,00	-1,300	-0,48	-1,22	
53	LwK 1.1 (herk.)	94,20	-1,100	-0,41	-1,03	
55	LwK 1.1 (herk.)	94,90	-0,400	-0,15	-0,38	
56	LwK 1.1 (herk.)	95,70	0,400	0,15	0,38	
57	LwK 1.1 (herk.)	93,90	-1,400	-0,52	-1,32	
58	LwK 1.1 (herk.)	96,10	0,800	0,29	0,75	
59	LwK 1.1 (herk.)	95,40	0,100	0,04	0,09	
60	LwK 1.1 (herk.)	94,69	-0,610	-0,22	-0,57	
63	LwK 1.1 (herk.)	96,13	0,830	0,31	0,78	
84	LwK 1.1 (herk.)	96,30	1,000	0,37	0,94	
86	k. A.	93,72	-1,580	-0,58	-1,49	
87	LwK 1.1 (herk.)	95,38	0,080	0,03	0,08	
92	LwK 1.1 (herk.)	94,50	-0,800	-0,29	-0,75	
111	LwK 1.1 (herk.)	95,20	-0,100	-0,04	-0,09	
112	LwK 1.1 (herk.)	95,60	0,300	0,11	0,28	
113	LwK 1.1 (herk.)	95,10	-0,200	-0,07	-0,19	
114	LwK 1.1 (herk.)	95,20	-0,100	-0,04	-0,09	
115	LwK 1.1 (herk.)	95,70	0,400	0,15	0,38	
116	LwK 1.1 (herk.)	95,90	0,600	0,22	0,56	
117	LwK 1.1 (herk.)	94,90	-0,400	-0,15	-0,38	
118	LwK 1.1 (herk.)	93,60	-1,700	-0,63	-1,60	
119	LwK 1.1 (herk.)	95,33	0,030	0,01	0,03	
120	LwK 1.1 (herk.)	99,10	3,800	1,40	3,57	
121	LwK 1.1 (herk.)	95,00	-0,300	-0,11	-0,28	

Rote Methodenangabe: als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollten keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden. 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
122	LwK 1.1 (herk.)	89,00	-6,300	-2,32	-5,93	(**)
123	LwK 1.1 (herk.)	94,70	-0,600	-0,22	-0,56	
124	LwK 1.1 (herk.)	95,40	0,100	0,04	0,09	
125	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
126	LwK 1.1 (herk.)	94,60	-0,700	-0,26	-0,66	
127	LwK 1.1 (herk.)	95,40	0,100	0,04	0,09	
128	LwK 1.1 (herk.)	96,10	0,800	0,29	0,75	
129	LwK 1.1 (herk.)	94,60	-0,700	-0,26	-0,66	
130	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
131	LwK 1.1 (herk.)	94,60	-0,700	-0,26	-0,66	
132	LwK 1.1 (herk.)	94,46	-0,840	-0,31	-0,79	
133	LwK 1.1 (herk.)	94,20	-1,100	-0,41	-1,03	
134	LwK 1.1 (herk.)	93,50	-1,800	-0,66	-1,69	
135	LwK 1.1 (herk.)	96,29	0,990	0,36	0,93	
136	LwK 1.1 (herk.)	95,20	-0,100	-0,04	-0,09	
137	LwK 1.1 (herk.)	94,50	-0,800	-0,29	-0,75	
138	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
139	LwK 1.1 (herk.)	95,20	-0,100	-0,04	-0,09	
140	LwK 1.1 (herk.)	95,68	0,380	0,14	0,36	
141	LwK 1.1 (herk.)	96,21	0,908	0,33	0,85	
142	LwK 1.1 (herk.)	95,30	0,000	0,00	0,00	
143	LwK 1.1 (herk.)	95,49	0,190	0,07	0,18	
144	LwK 1.1 (FTIR)	94,80	-0,500	-0,18	-0,47	
145	LwK 1.1 (herk.)	95,70	0,400	0,15	0,38	
146	LwK 1.1 (herk.)	95,60	0,300	0,11	0,28	
147	LwK 1.1 (herk.)	93,06	-2,240	-0,83	-2,11	
148	LwK 1.1 (herk.)	95,80	0,500	0,18	0,47	
149	LwK 1.1 (herk.)	94,40	-0,900	-0,33	-0,85	
150	LwK 1.1 (herk.)	94,10	-1,200	-0,44	-1,13	
151	LwK 1.1 (herk.)	94,00	-1,300	-0,48	-1,22	
152	LwK 1.1 (herk.)	95,00	-0,300	-0,11	-0,28	
153	LwK 1.1 (herk.)	95,80	0,500	0,18	0,47	

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

6.4.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 1.1 (FTIR)	94,61	-0,690	-0,25	-0,65	
204	LwK 1.1 (FTIR)	94,39	-0,912	-0,34	-0,86	
205	LwK 1.1 (FTIR)	94,70	-0,600	-0,22	-0,56	
206	LwK 1.1 (FTIR)	96,14	0,840	0,31	0,79	
208	LwK 1.1 (FTIR)	97,02	1,720	0,63	1,62	
210	LwK 1.1 (FTIR)	94,80	-0,500	-0,18	-0,47	
212	LwK 1.1 (FTIR)	94,63	-0,670	-0,25	-0,63	
217	LwK 1.1 (FTIR)	94,90	-0,400	-0,15	-0,38	
218	LwK 1.1 (FTIR)	95,18	-0,120	-0,04	-0,11	
220	LwK 1.1 (FTIR)	96,17	0,870	0,32	0,82	
222	LwK 1.1 (FTIR)	94,70	-0,600	-0,22	-0,56	
224	LwK 1.1 (FTIR)	94,87	-0,430	-0,16	-0,40	
228	LwK 1.1 (FTIR)	95,83	0,530	0,20	0,50	
237	LwK 1.1 (FTIR)	95,00	-0,300	-0,11	-0,28	
254	LwK 1.1 (FTIR)	95,83	0,530	0,20	0,50	
258	LwK 1.1 (FTIR)	95,30	0,000	0,00	0,00	
259	LwK 1.1 (FTIR)	96,61	1,310	0,48	1,23	
260	LwK 1.1 (FTIR)	94,43	-0,870	-0,32	-0,82	
262	LwK 1.1 (FTIR)	96,21	0,910	0,34	0,86	
266	LwK 1.1 (FTIR)	95,80	0,500	0,18	0,47	
267	LwK 1.1 (FTIR)	95,40	0,100	0,04	0,09	
276	LwK 1.1 (FTIR)	94,69	-0,606	-0,22	-0,57	
277	LwK 1.1 (FTIR)	94,30	-1,001	-0,37	-0,94	
278	LwK 1.1 (FTIR)	96,57	1,270	0,47	1,19	
281	LwK 1.1 (FTIR)	94,80	-0,500	-0,18	-0,47	
279	LwK 1.1 (FTIR)	88,54	0,243	0,10	0,23	
280	LwK 1.1 (FTIR)	89,40	1,100	0,43	1,03	
281	LwK 1.1 (FTIR)	87,21	-1,090	-0,43	-1,03	
282	LwK 1.1 (FTIR)	88,30	0,000	0,00	0,00	

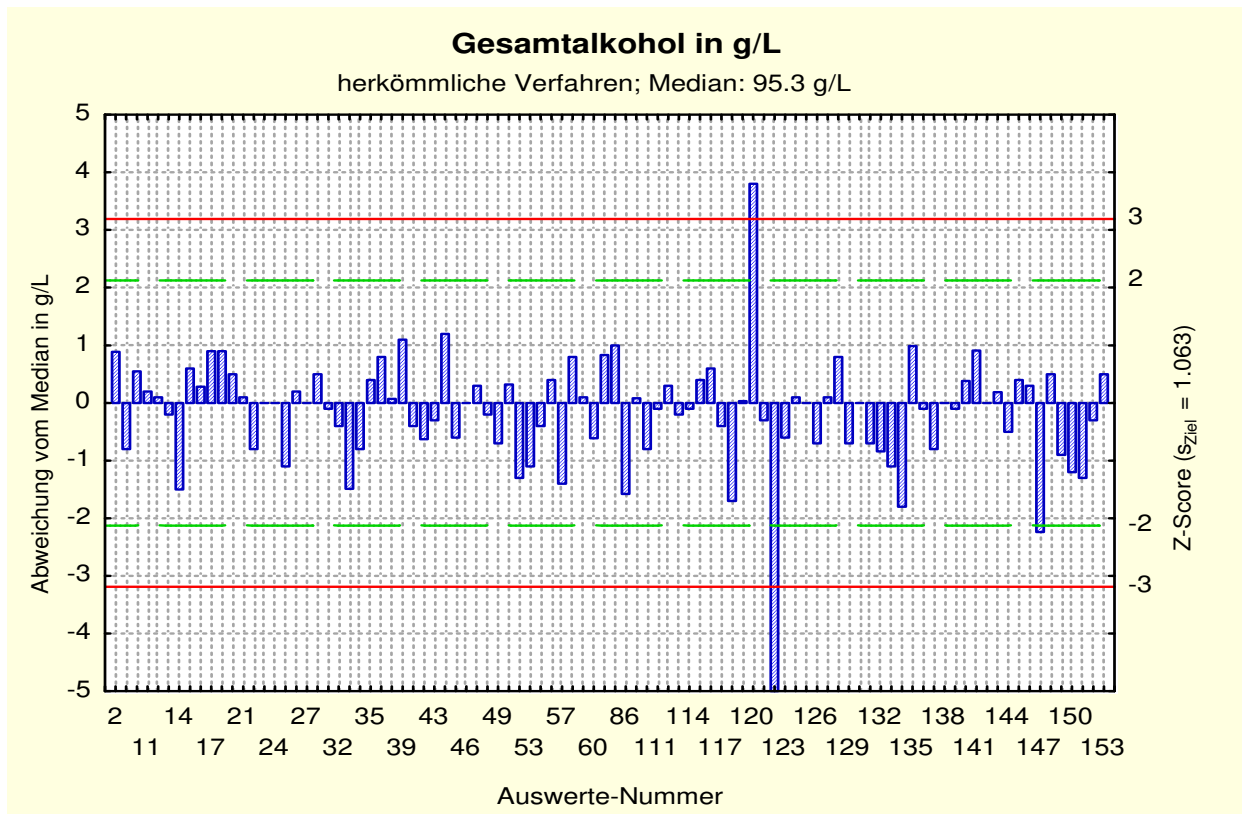
6.4.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

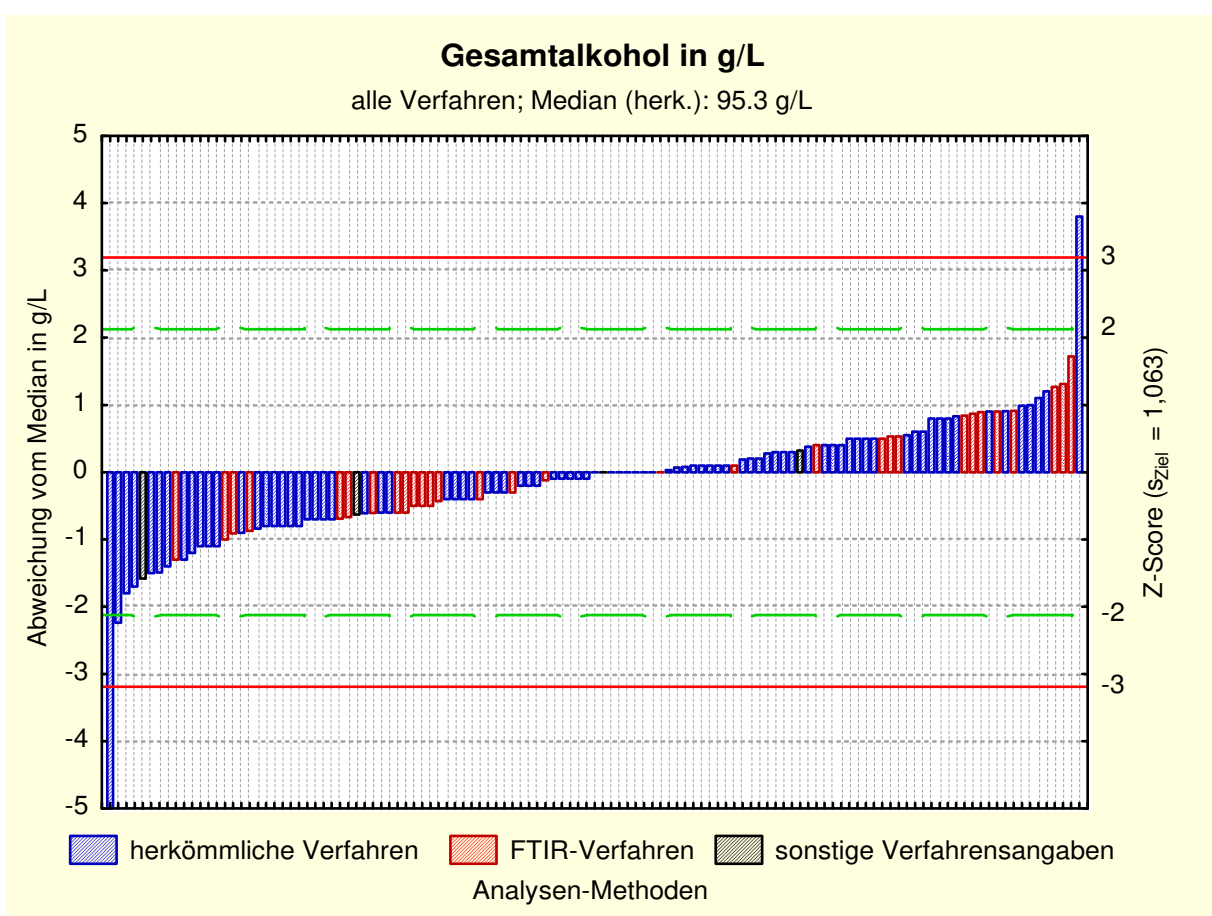
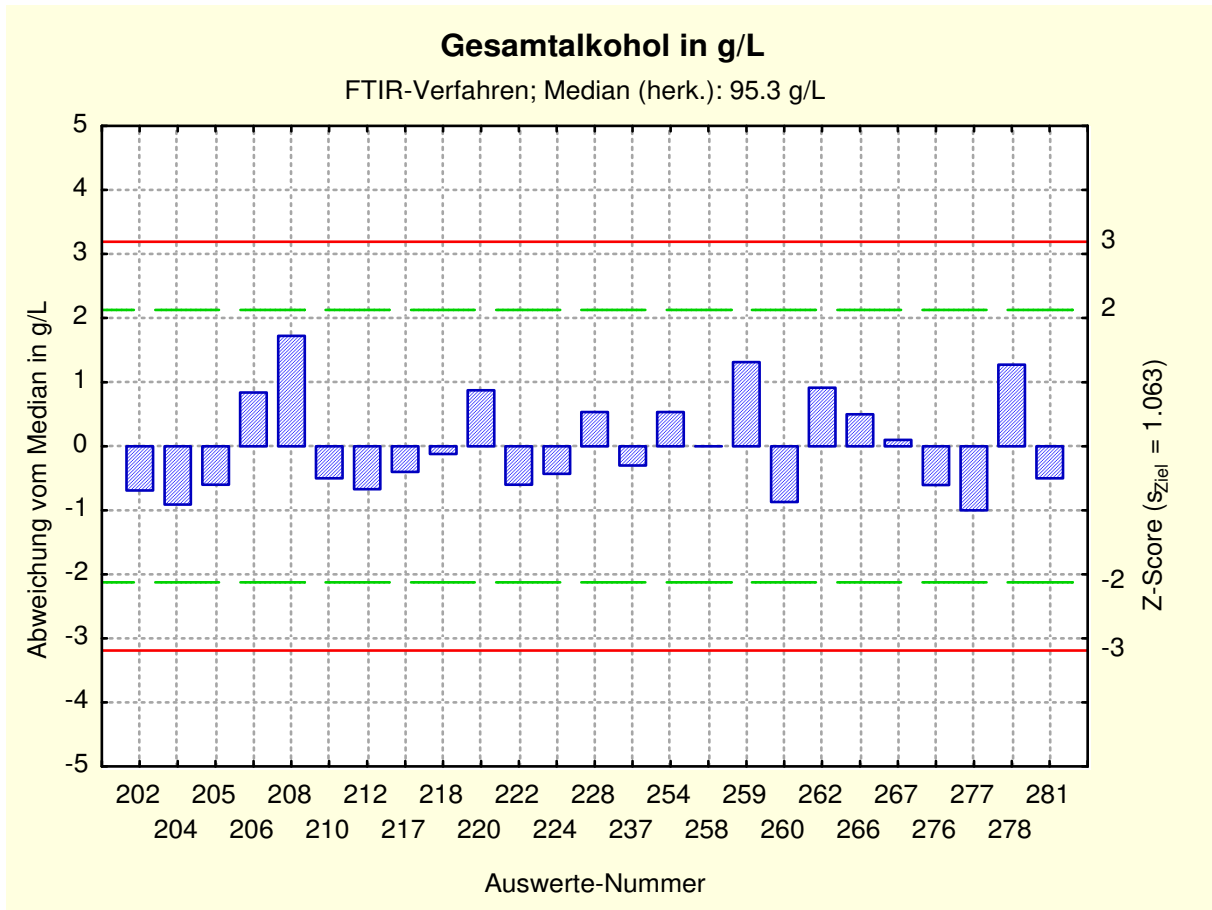
Ergebnisse für Gesamten Alkohol in g/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	85	84
Minimalwert	89,00	93,06
Mittelwert	95,120	95,193
Median	95,300	95,300
Maximalwert	99,10	99,10
Standardabweichung (s _L)	1,072	0,841
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,116	0,092
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,715	2,715
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	1,063	1,063
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	0,40	0,31
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,01	0,79
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})		
Quotient (u _M /s _H)	0,04	0,03
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,11	0,09
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})		

¹⁾ Die Bewertung der FTIR-Messergebnisse erfolgte mit der Zielstandardabweichung für herkömmliche Werte

6.4.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (Zucker enz./HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose, enzymat. oder HPLC] * 0,47)+Vorh. Alkohol [g/L]	53	95,17	0,664
LwK 1.1 (Zucker reduktometrisch)	((Gesamtzucker [reduktometrisch] - 1) * 0,47) + Vorh. Alkohol [g/L]	32	95,18	0,942
	herkömmliche Verfahren	85	95,18	0,759
LwK 1.1 (FTIR-Alkohol +-Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR-Glucose + FTIR-Fructose]*0,47)+Vorh. Alkohol [FTIR] [g/L]	28	95,22	0,806
LwK 1.1 (Alkohol+FTIR-Zucker)	Alkohol pyknometrisch + (Gesamt- oder Summenzucker FTIR)*0,47	2	96,20	0,008
k. A.	keine Methodenangabe	3	94,67	1,077
LwK 1.1 (Zucker NMR)	(Gesamtzucker [NMR]+0,47*Vorh. Alkohol [NIR])	1	95,30	





6.5 Vorhandener Alkohol [g/L]

6.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	88,30	0,000	0,00	0,00	
02	LwK 2.1	89,95	1,650	0,65	3,08	
04	LwK 2.9	89,68	1,380	0,54	2,58	
05	LwK 2.1	87,76	-0,537	-0,21	-1,00	
06	LwK 2.4	87,98	-0,320	-0,13	-0,60	
07	LwK 2.9	89,27	0,970	0,38	1,81	
11	LwK 2.1	89,08	0,780	0,31	1,46	
12	LwK 2.1	89,00	0,700	0,28	1,31	
13	LwK 2.1	88,50	0,200	0,08	0,37	
14	LwK 2.1	87,20	-1,100	-0,43	-2,06	
15	LwK 2.1	89,27	0,970	0,38	1,81	
16	LwK 2.9	89,00	0,700	0,28	1,31	
17	LwK 2.9	89,40	1,100	0,43	2,06	
19	LwK 2.9	89,40	1,100	0,43	2,06	
20	LwK 2.1	89,45	1,150	0,45	2,15	
21	LwK 2.9	88,70	0,400	0,16	0,75	
22	LwK 2.7	88,03	-0,270	-0,11	-0,50	
23	LwK 2.7	88,83	0,530	0,21	0,99	
24	LwK 2.9	88,70	0,400	0,16	0,75	
25	LwK 2.5	87,50	-0,800	-0,31	-1,50	
26	LwK 2.9	88,60	0,300	0,12	0,56	
27	LwK 2.1	88,70	0,400	0,16	0,75	
28	LwK 2.4	88,90	0,600	0,24	1,12	
29	LwK 2.5	87,10	-1,200	-0,47	-2,24	
30	LwK 2.4	88,50	0,200	0,08	0,37	
31	LwK 2.1	88,25	-0,050	-0,02	-0,09	
32	LwK 2.4	88,24	-0,060	-0,02	-0,11	
33	LwK 2.4	87,46	-0,840	-0,33	-1,57	
34	LwK 2.1	88,10	-0,200	-0,08	-0,37	
35	LwK 2.8	88,70	0,400	0,16	0,75	
36	LwK 2.9	89,70	1,400	0,55	2,62	
38	LwK 2.2	89,12	0,820	0,32	1,53	
39	LwK 2.9	89,60	1,300	0,51	2,43	
40	LwK 2.9	88,50	0,200	0,08	0,37	
41	LwK 2.4	88,85	0,550	0,22	1,03	
42	LwK 2.5	88,10	-0,200	-0,08	-0,37	
43	LwK 2.4	88,30	0,000	0,00	0,00	
44	LwK 2.9	89,40	1,100	0,43	2,06	
45	LwK 2.1	88,10	-0,200	-0,08	-0,37	
46	LwK 2.9	88,90	0,600	0,24	1,12	
47	LwK 2.1	89,10	0,800	0,31	1,50	
48	LwK 2.5	88,50	0,200	0,08	0,37	
49	LwK 2.4	88,30	0,000	0,00	0,00	
50	LwK 2.9	89,20	0,900	0,35	1,68	
51	LwK 2.9	87,50	-0,800	-0,31	-1,50	
53	LwK 2.9	87,60	-0,700	-0,28	-1,31	
55	LwK 2.1	88,40	0,100	0,04	0,19	
56	LwK 2.9	89,10	0,800	0,31	1,50	
57	LwK 2.5	87,70	-0,600	-0,24	-1,12	
58	LwK 2.9	89,20	0,900	0,35	1,68	
59	LwK 2.9	89,21	0,910	0,36	1,70	
60	LwK 2.1	87,80	-0,500	-0,20	-0,93	
61	LwK 2.9	83,80	-4,500	-1,77	-8,41	(**)
63	LwK 2.5	88,89	0,590	0,23	1,10	
64	LwK 2.9	88,80	0,500	0,20	0,93	
68	LwK 2.9	89,05	0,750	0,29	1,40	
74	LwK 2.9	88,32	0,020	0,01	0,04	
75	LwK 2.4	87,63	-0,666	-0,26	-1,24	
84	LwK 2.2	89,00	0,700	0,28	1,31	
86	LwK 2.5	87,48	-0,820	-0,32	-1,53	

Der Messwert in **roter** Schrift wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.
Dies gilt auch für den Parameter Gesamtalkohol, Seite 53.

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

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
87	LwK 2.1	88,50	0,200	0,08	0,37	
88	LwK 2.4	88,44	0,140	0,06	0,26	
92	LwK 2.7	88,01	-0,290	-0,11	-0,54	
94	LwK 2.5	87,70	-0,600	-0,24	-1,12	
96	LwK 2.9	89,37	1,070	0,42	2,00	
100	LwK 2.9	87,50	-0,800	-0,31	-1,50	
102	LwK 2.4	87,63	-0,670	-0,26	-1,25	
106	LwK 2.4	88,18	-0,120	-0,05	-0,22	
107	NMR	87,42	-0,885	-0,35	-1,65	
108	NMR	86,13	-2,168	-0,85	-4,05	
109	NMR	87,42	-0,879	-0,35	-1,64	
110	NMR	86,64	-1,662	-0,65	-3,11	
111	LwK 2.9	88,50	0,200	0,08	0,37	
112	LwK 2.9	89,10	0,800	0,31	1,50	
113	LwK 2.7	88,50	0,200	0,08	0,37	
114	LwK 2.4	87,80	-0,500	-0,20	-0,93	
115	LwK 2.9	89,10	0,800	0,31	1,50	
116	LwK 2.3	88,60	0,300	0,12	0,56	
117	LwK 2.1	88,10	-0,200	-0,08	-0,37	
118	LwK 2.9	87,30	-1,000	-0,39	-1,87	
119	LwK 2.7	88,69	0,390	0,15	0,73	
120	LwK 2.3	92,10	3,800	1,49	7,10	(**)
121	LwK 2.5	88,30	0,000	0,00	0,00	
122	LwK 2.1	88,95	0,647	0,25	1,21	
123	LwK 2.5	88,00	-0,300	-0,12	-0,56	
124	LwK 2.9	88,90	0,600	0,24	1,12	
125	LwK 2.5	88,90	0,600	0,24	1,12	
126	LwK 2.5	87,70	-0,600	-0,24	-1,12	
127	LwK 2.9	89,00	0,700	0,28	1,31	
128	LwK 2.1	89,70	1,400	0,55	2,62	
129	LwK 2.4	87,80	-0,500	-0,20	-0,93	
130	LwK 2.3	88,40	0,100	0,04	0,19	
131	LwK 2.5	87,70	-0,600	-0,24	-1,12	
132	LwK 2.5	87,60	-0,700	-0,28	-1,31	
133	LwK 2.4	87,80	-0,500	-0,20	-0,93	
134	LwK 2.5	87,00	-1,300	-0,51	-2,43	
135	LwK 2.2	90,19	1,890	0,74	3,53	
136	LwK 2.5	88,60	0,300	0,12	0,56	
137	LwK 2.4	87,90	-0,400	-0,16	-0,75	
138	LwK 2.9	88,80	0,500	0,20	0,93	
139	LwK 2.5	88,60	0,300	0,12	0,56	
140	LwK 2.9	89,21	0,910	0,36	1,70	
141	LwK 2.3	89,18	0,884	0,35	1,65	
142	LwK 2.7	88,40	0,100	0,04	0,19	
143	LwK 2.9	89,05	0,750	0,29	1,40	
144	LwK 2.5	88,05	-0,250	-0,10	-0,47	
145	LwK 2.9	88,80	0,500	0,20	0,93	
146	LwK 2.5	88,90	0,600	0,24	1,12	
147	LwK 2.3	86,20	-2,100	-0,83	-3,93	
148	LwK 2.4	89,20	0,900	0,35	1,68	
149	LwK 2.9	88,30	0,000	0,00	0,00	
150	LwK 2.4	87,40	-0,900	-0,35	-1,68	
151	LwK 2.2	88,00	-0,300	-0,12	-0,56	
152	LwK 2.7	88,40	0,100	0,04	0,19	
153	LwK 2.1	89,30	1,000	0,39	1,87	

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

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

6.5.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	87,99	-0,310	-0,12	-0,35	
202	LwK 2.8	88,37	0,070	0,03	0,08	
203	LwK 2.8	89,21	0,910	0,36	1,03	
204	LwK 2.8	87,70	-0,600	-0,24	-0,68	
205	LwK 2.8	87,76	-0,537	-0,21	-0,61	
206	LwK 2.8	89,62	1,320	0,52	1,49	
207	LwK 2.8	88,92	0,620	0,24	0,70	
208	LwK 2.8	90,63	2,330	0,92	2,63	
209	LwK 2.8	86,60	-1,700	-0,67	-1,92	
210	LwK 2.8	88,33	0,030	0,01	0,03	
211	LwK 2.8	88,81	0,510	0,20	0,58	
212	LwK 2.8	88,20	-0,100	-0,04	-0,11	
213	LwK 2.8	89,10	0,800	0,31	0,90	
214	LwK 2.8	89,54	1,240	0,49	1,40	
216	LwK 2.8	89,30	1,000	0,39	1,13	
217	LwK 2.8	88,70	0,400	0,16	0,45	
218	LwK 2.8	89,82	1,520	0,60	1,72	
219	LwK 2.8	92,40	4,100	1,61	4,63	
220	LwK 2.8	89,80	1,500	0,59	1,69	
221	LwK 2.8	88,40	0,100	0,04	0,11	
222	LwK 2.8	88,40	0,100	0,04	0,11	
223	LwK 2.8	88,66	0,360	0,14	0,41	
224	LwK 2.8	88,26	-0,040	-0,02	-0,05	
225	LwK 2.8	87,70	-0,600	-0,24	-0,68	
226	LwK 2.8	88,92	0,620	0,24	0,70	
227	LwK 2.8	87,99	-0,310	-0,12	-0,35	
228	LwK 2.8	89,30	1,000	0,39	1,13	
229	LwK 2.8	88,45	0,150	0,06	0,17	
230	LwK 2.8	87,90	-0,400	-0,16	-0,45	
231	LwK 2.8	89,42	1,120	0,44	1,26	
233	LwK 2.8	89,20	0,900	0,35	1,02	
235	LwK 2.8	88,70	0,400	0,16	0,45	
236	LwK 2.8	87,20	-1,100	-0,43	-1,24	
237	LwK 2.8	88,40	0,100	0,04	0,11	
238	LwK 2.8	87,96	-0,340	-0,13	-0,38	
241	LwK 2.8	89,90	1,600	0,63	1,81	
242	LwK 2.8	87,70	-0,600	-0,24	-0,68	
243	LwK 2.8	89,02	0,720	0,28	0,81	
244	LwK 2.8	89,40	1,100	0,43	1,24	
245	LwK 2.8	89,36	1,060	0,42	1,20	
246	LwK 2.8	88,80	0,500	0,20	0,56	
247	LwK 2.8	88,48	0,180	0,07	0,20	
248	LwK 2.8	90,03	1,730	0,68	1,95	
249	LwK 2.8	84,00	-4,300	-1,69	-4,85	
250	LwK 2.8	89,40	1,100	0,43	1,24	
251	LwK 2.8	89,10	0,800	0,31	0,90	
254	LwK 2.8	88,60	0,300	0,12	0,34	
255	LwK 2.8	87,20	-1,100	-0,43	-1,24	
256	LwK 2.8	89,00	0,700	0,28	0,79	
257	LwK 2.8	87,20	-1,100	-0,43	-1,24	
258	LwK 2.8	88,50	0,200	0,08	0,23	
259	LwK 2.8	89,21	0,910	0,36	1,03	
260	LwK 2.8	87,70	-0,600	-0,24	-0,68	
261	LwK 2.8	89,60	1,300	0,51	1,47	
262	LwK 2.8	90,10	1,800	0,71	2,03	
263	LwK 2.8	88,50	0,200	0,08	0,23	
264	LwK 2.8	88,59	0,290	0,11	0,33	
265	LwK 2.8	88,44	0,140	0,06	0,16	
266	LwK 2.8	88,55	0,250	0,10	0,28	
267	LwK 2.8	88,80	0,500	0,20	0,56	
268	LwK 2.8	86,66	-1,640	-0,64	-1,85	
269	LwK 2.8	90,50	2,200	0,86	2,48	
270	LwK 2.8	87,30	-1,000	-0,39	-1,13	
271	LwK 2.8	87,52	-0,780	-0,31	-0,88	
273	LwK 2.8	88,50	0,200	0,08	0,23	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 2.8	89,30	1,000	0,39	1,13	
275	LwK 2.8	88,35	0,045	0,02	0,05	
276	LwK 2.8	87,71	-0,590	-0,23	-0,67	
277	LwK 2.8	87,16	-1,140	-0,45	-1,29	
278	LwK 2.8	89,80	1,500	0,59	1,69	
280	LwK 2.8	91,24	2,936	1,15	3,31	
281	LwK 2.8	87,80	-0,500	-0,20	-0,56	
282	LwK 2.8	88,16	-0,140	-0,06	-0,16	
283	LwK 2.8	87,53	-0,770	-0,30	-0,87	
284	LwK 2.8	88,29	-0,011	-0,00	-0,01	
313	LwK 2.8	88,70	0,400	0,16	0,45	
322	LwK 2.8	87,70	-0,600	-0,24	-0,68	
338	LwK 2.8	87,95	-0,350	-0,14	-0,40	
349	LwK 2.8	90,60	2,300	0,90	2,60	
363	LwK 2.8	88,50	0,200	0,08	0,23	

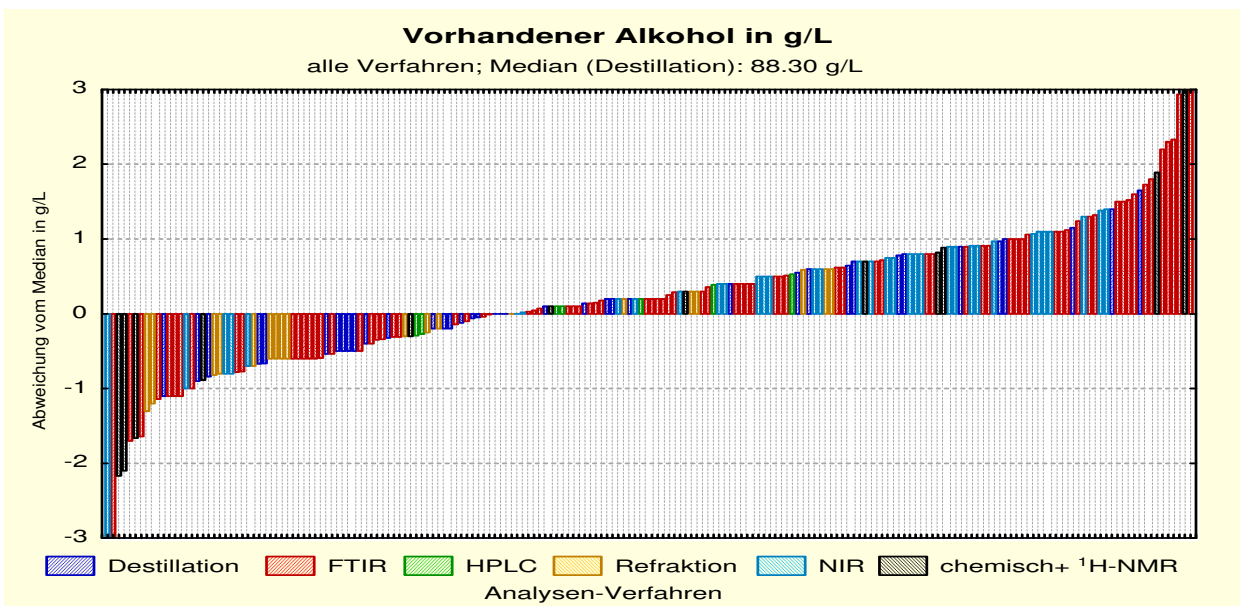
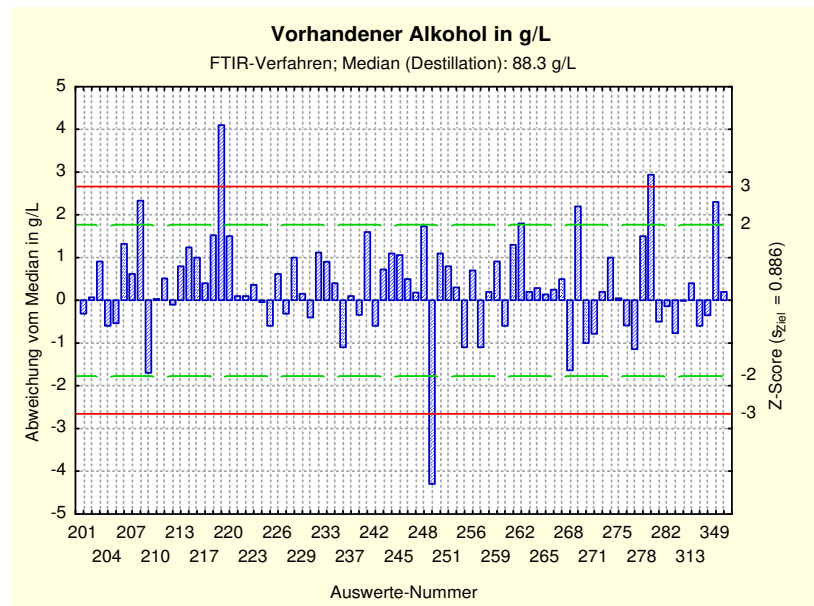
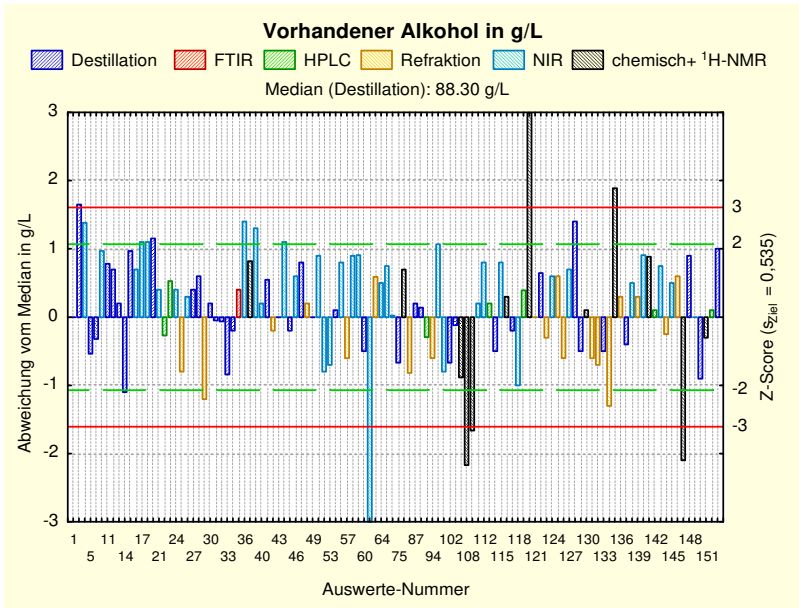
Der Messwert in **roter** Schrift wurde in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter umgerechnet.

6.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	39
Minimalwert	87,20
Mittelwert	88,406
Median	88,300
Maximalwert	89,95
Standardabweichung (s_L)	0,664
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,106
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,545
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,26
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,24
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,75
Quotient (u_M/s_H)	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,20
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,12

6.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	21	88,646	0,723
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	18	88,109	0,538
	Destillationsverfahren	39	88,389	0,700
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	4	89,078	1,016
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	5	88,835	2,253
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	19	88,017	0,671
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	88,409	0,349
	herkömmliche Verfahren	74	88,338	0,692
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	88,617	0,959
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	36	88,900	0,534
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	86,907	0,705



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	33,9	-1,10	-0,95	-1,85	
04	LwK 3.3	35,5	0,50	0,43	0,84	
06	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
07	LwK 3.3	35,4	0,40	0,35	0,67	
11	LwK 3.3	35,7	0,70	0,60	1,18	
12	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
13	LwK 3.2	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
14	LwK 3.3	34,5	-0,50	-0,43	-0,84	
15	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
16	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
17	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
19	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
20	LwK 3.2	35,3	0,30	0,26	0,51	
21	LwK 3.3	36,0	1,00	0,86	1,68	
22	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
23	LwK 3.3	35,4	0,40	0,35	0,67	
24	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
25	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
26	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
28	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
29	LwK 3.3	34,5	-0,50	-0,43	-0,84	
30	LwK 3.1	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
31	LwK 3.2	35,0	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
33	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
34	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
35	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
36	LwK 3.3	36,2	1,20	1,04	2,02	
38	LwK 3.3	34,9	-0,08	-0,07	-0,13	
39	LwK 3.3	35,5	0,50	0,43	0,84	
40	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
41	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
43	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
44	LwK 3.2	35,3	0,30	0,26	0,51	
45	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
46	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
47	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
48	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
49	LwK 3.2	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
50	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
51	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
53	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
55	LwK 3.2	35,2	0,20	0,17	0,34	
56	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
57	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
58	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
59	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
60	LwK 3.2	33,6	-1,40	-1,21	-2,36	
63	FTIR	35,2	0,20	0,17	0,34	
81	LwK 3.3	36,4	1,40	1,21	2,36	
84	LwK 3.3	29,5	-5,50	-4,74	-9,26	(**)
86	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
87	LwK 3.1	35,1	0,15	0,13	0,25	
92	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
111	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
112	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
113	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
114	LwK 3.2	34,4	-0,60	-0,52	-1,01	
115	LwK 3.2	35,4	0,40	0,35	0,67	
116	LwK 3.3	35,4	0,40	0,35	0,67	

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
117	LwK 3.2	34,5	-0,50	-0,43	-0,84	
118	LwK 3.3	33,1	-1,90	-1,64	-3,20	
119	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
120	LwK 3.3	36,8	1,80	1,55	3,03	
121	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
122	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
123	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
124	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
125	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
126	LwK 3.3	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
127	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
128	LwK 3.2	35,6	0,60	0,52	1,01	
129	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
130	LwK 3.3	34,6	-0,40	-0,35	-0,67	
131	LwK 3.3	34,4	-0,60	-0,52	-1,01	
132	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
133	LwK 3.3	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
134	LwK 3.2	34,3	-0,70	-0,60	-1,18	
135	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
136	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
137	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
138	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
139	LwK 3.3	34,4	-0,60	-0,52	-1,01	
140	LwK 3.3	35,3	0,30	0,26	0,51	
141	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
142	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
143	LwK 3.3	35,4	0,40	0,35	0,67	
144	LwK 3.3	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
145	LwK 3.3	35,6	0,60	0,52	1,01	
146	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
147	LwK 3.3	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
148	LwK 3.2	35,1	0,10	0,09	0,17	
149	LwK 3.3	35,0	0,00	0,00	0,00	
150	LwK 3.3	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
151	LwK 3.3	35,2	0,20	0,17	0,34	
152	LwK 3.3	35,1	0,10	0,09	0,17	
153	LwK 3.2	35,0	0,00	0,00	0,00	

6.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	33,8	-1,18	-1,02	-1,99	
202	FTIR (gemessen)	35,0	-0,03	-0,03	-0,05	
203	FTIR (gemessen)	34,8	-0,16	-0,14	-0,27	
204	FTIR (gemessen)	36,6	1,60	1,38	2,69	
206	FTIR (gemessen)	33,8	-1,18	-1,02	-1,99	
208	FTIR (gemessen)	35,1	0,11	0,09	0,19	
210	FTIR (gemessen)	34,4	-0,60	-0,52	-1,01	
212	FTIR (gemessen)	35,2	0,20	0,17	0,34	
217	FTIR (gemessen)	35,3	0,30	0,26	0,51	
218	FTIR (gemessen)	36,2	1,18	1,02	1,99	
219	FTIR (gemessen)	36,3	1,30	1,12	2,19	
220	FTIR (gemessen)	35,3	0,30	0,26	0,51	
221	FTIR (gemessen)	35,6	0,60	0,52	1,01	
222	FTIR (gemessen)	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
223	FTIR (gemessen)	38,0	3,00	2,59	5,05	(**)
224	FTIR-Basis	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
225	FTIR (gemessen)	35,4	0,40	0,35	0,67	
227	FTIR (gemessen)	35,3	0,25	0,22	0,42	
228	FTIR (gemessen)	36,0	1,00	0,86	1,68	
229	FTIR (gemessen)	35,8	0,77	0,66	1,30	
230	FTIR (gemessen)	35,1	0,10	0,09	0,17	
231	FTIR (gemessen)	35,5	0,53	0,46	0,89	
233	FTIR (gemessen)	35,5	0,49	0,42	0,82	
237	FTIR (gemessen)	35,1	0,10	0,09	0,17	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
238	FTIR (gemessen)	36,0	0,95	0,82	1,60	
241	FTIR (gemessen)	35,8	0,80	0,69	1,35	
247	FTIR (gemessen)	35,3	0,30	0,26	0,51	
249	FTIR (gemessen)	34,2	-0,80	-0,69	-1,35	
251	FTIR (gemessen)	36,1	1,10	0,95	1,85	
254	FTIR (gemessen)	35,8	0,80	0,69	1,35	
255	FTIR-Basis	35,9	0,90	0,78	1,52	
258	FTIR-Basis	34,2	-0,80	-0,69	-1,35	
259	FTIR-Basis	35,5	0,50	0,43	0,84	
260	FTIR-Basis	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
261	FTIR (gemessen)	35,4	0,40	0,35	0,67	
262	FTIR (gemessen)	34,9	-0,10	-0,09	-0,17	
263	FTIR (gemessen)	35,2	0,20	0,17	0,34	
265	FTIR (gemessen)	34,5	-0,50	-0,43	-0,84	
266	FTIR (gemessen)	34,8	-0,19	-0,16	-0,32	
267	FTIR (gemessen)	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
268	FTIR (gemessen)	36,6	1,57	1,35	2,64	
269	FTIR (gemessen)	35,5	0,50	0,43	0,84	
270	FTIR (gemessen)	34,7	-0,30	-0,26	-0,51	
271	FTIR (gemessen)	35,3	0,26	0,22	0,44	
273	FTIR (gemessen)	36,2	1,20	1,04	2,02	
274	FTIR (gemessen)	48,8	13,80	11,90	23,23	(**)
276	FTIR (gemessen)	34,4	-0,60	-0,52	-1,01	
277	FTIR (gemessen)	34,6	-0,44	-0,38	-0,74	
278	FTIR (gemessen)	36,0	1,00	0,86	1,68	
281	FTIR (gemessen)	35,1	0,10	0,09	0,17	
284	FTIR (gemessen)	35,9	0,90	0,78	1,52	
322	FTIR (gemessen)	34,8	-0,20	-0,17	-0,34	
338	FTIR (gemessen)	36,0	1,01	0,87	1,70	

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

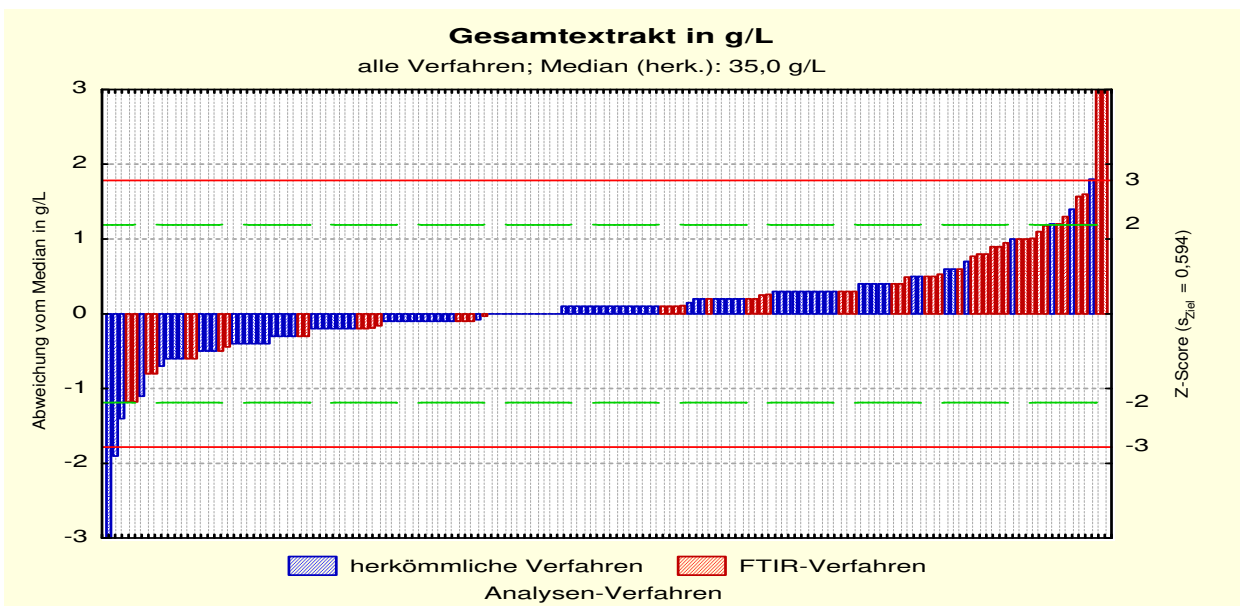
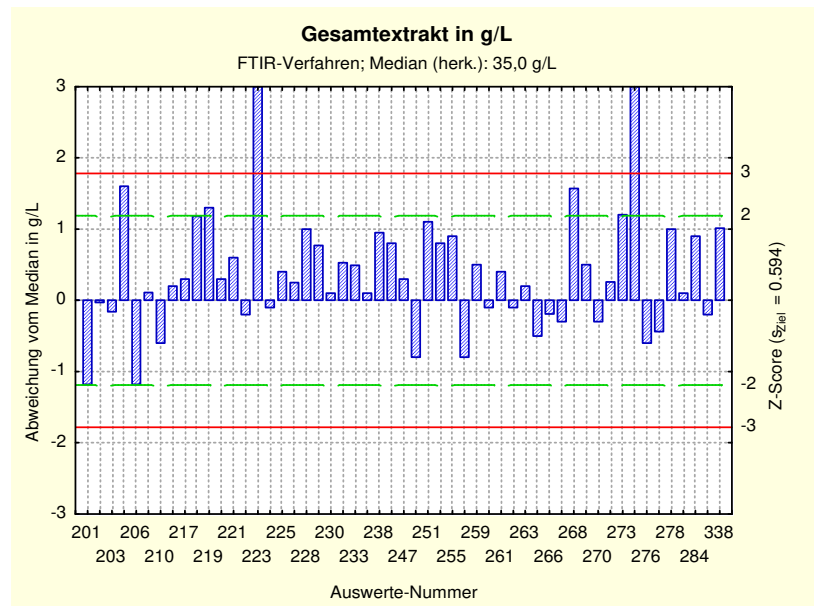
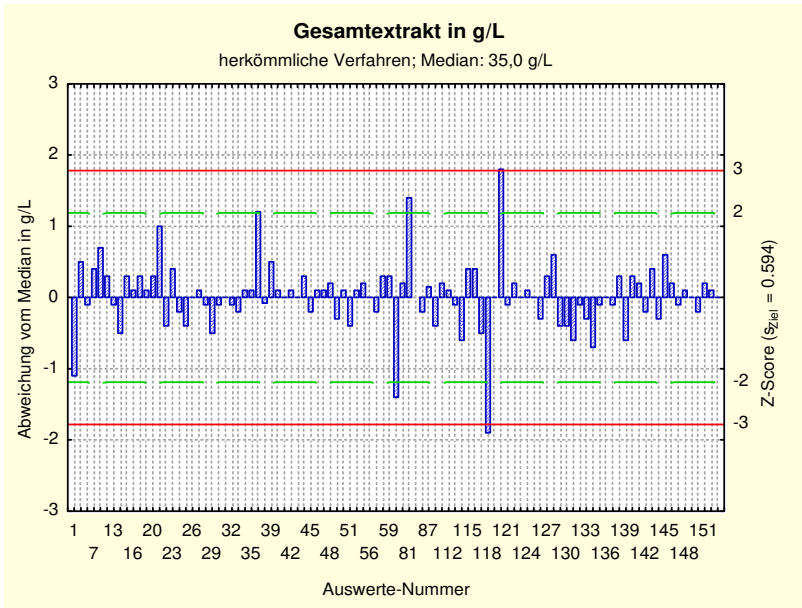
6.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	98	97
Minimalwert	29,5	33,1
Mittelwert	34,96	35,02
Median	35,00	35,00
Maximalwert	36,8	36,8
Standardabweichung (s _L)	0,735	0,482
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,074	0,049
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	1,159	1,159
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,565) *)	(0,565) *)
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,63	0,42
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,24	0,81
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(1,30)	(0,85)
Quotient (u _M /s _H)	0,06	0,04
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,13	0,08
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,13)	(0,09)

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

6.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	35,025	0,200
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n.LwK 2.1	15	34,846	0,577
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	81	35,028	0,327
	herkömmliche Verfahren	98	35,010	0,348
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus dem Spektrum ermittelt	49	35,353	0,727
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	5	35,080	0,737



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 3.3	21,0	0,10	0,13	0,10	
07	LwK 3.3	21,4	0,50	0,67	0,48	
11	LwK 3.3	21,5	0,60	0,80	0,57	
12	LwK 3.3	21,6	0,70	0,94	0,67	
13	LwK 3.2	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
14	LwK 3.3	20,6	-0,30	-0,40	-0,29	
15	LwK 3.2	21,3	0,40	0,53	0,38	
16	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
17	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
19	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
20	LwK 3.2	22,0	1,10	1,47	1,05	
21	LwK 3.3	21,7	0,80	1,07	0,76	
22	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.3	21,5	0,60	0,80	0,57	
24	LwK 3.3	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
25	LwK 3.3	20,6	-0,30	-0,40	-0,29	
26	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
27	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
28	LwK 3.3	20,2	-0,70	-0,94	-0,67	
30	LwK 3.1	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
31	LwK 3.2	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
32	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
33	LwK 3.3	21,3	0,40	0,53	0,38	
34	LwK 3.3	21,5	0,60	0,80	0,57	
35	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
36	LwK 3.3	22,4	1,50	2,00	1,43	
38	LwK 3.3	21,6	0,75	1,00	0,72	
39	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
40	LwK 3.3	21,4	0,50	0,67	0,48	
41	LwK 3.3	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
42	LwK 3.2	21,1	0,20	0,27	0,19	
43	LwK 3.3	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
44	LwK 3.2	20,2	-0,70	-0,94	-0,67	
45	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
46	LwK 3.3	21,5	0,60	0,80	0,57	
47	LwK 3.3	21,1	0,22	0,29	0,21	
48	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
49	LwK 3.3	21,4	0,50	0,67	0,48	
50	LwK 3.3	21,4	0,50	0,67	0,48	
51	LwK 3.3	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
53	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
55	LwK 3.2	21,2	0,30	0,40	0,29	
56	LwK 3.3	21,0	0,10	0,13	0,10	
57	LwK 3.3	21,8	0,90	1,20	0,86	
58	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
59	LwK 3.3	21,8	0,90	1,20	0,86	
60	LwK 3.2	18,9	-1,95	-2,61	-1,86	
81	spezial	22,9	1,95	2,61	1,86	
84	LwK 3.3	14,0	-6,90	-9,22	-6,58	(**)
86	nur FTIR	20,5	-0,38	-0,51	-0,36	
87	LwK 3.3	20,6	-0,34	-0,45	-0,32	
92	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
111	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
112	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
113	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
114	LwK 3.2	18,7	-2,20	-2,94	-2,10	
115	LwK 3.2	21,5	0,60	0,80	0,57	
116	LwK 3.3	19,8	-1,10	-1,47	-1,05	
117	LwK 3.2	20,0	-0,90	-1,20	-0,86	
118	LwK 3.3	19,6	-1,30	-1,74	-1,24	
119	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
120	LwK 3.3	22,2	1,30	1,74	1,24	

Rote Methodenangabe: als Ergebnisse herkömmlicher Methoden sollten keine FTIR-basierten Werte mitgeteilt werden. 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
121	LwK 3.3	20,6	-0,30	-0,40	-0,29	
122	LwK 3.3	21,3	0,40	0,53	0,38	
123	LwK 3.3	20,7	-0,20	-0,27	-0,19	
124	LwK 3.3	21,3	0,40	0,53	0,38	
125	LwK 3.3	21,3	0,40	0,53	0,38	
126	LwK 3.3	20,0	-0,90	-1,20	-0,86	
127	LwK 3.3	21,0	0,10	0,13	0,10	
128	LwK 3.2	20,0	-0,90	-1,20	-0,86	
129	LwK 3.3	20,1	-0,80	-1,07	-0,76	
130	LwK 3.3	20,0	-0,90	-1,20	-0,86	
131	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
132	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
133	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
134	LwK 3.2	20,4	-0,50	-0,67	-0,48	
135	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
136	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
137	LwK 3.3	20,9	0,00	0,00	0,00	
138	LwK 3.3	21,6	0,70	0,94	0,67	
139	LwK 3.3	20,4	-0,50	-0,67	-0,48	
140	LwK 3.3	21,5	0,60	0,80	0,57	
141	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
142	LwK 3.3	20,2	-0,70	-0,94	-0,67	
143	LwK 3.3	21,7	0,80	1,07	0,76	
144	LwK 3.3	20,2	-0,70	-0,94	-0,67	
145	LwK 3.3	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
146	LwK 3.3	21,9	1,00	1,34	0,95	
147	LwK 3.3	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	
148	LwK 3.2	21,1	0,20	0,27	0,19	
149	LwK 3.3	21,9	1,00	1,34	0,95	
150	LwK 3.3	20,5	-0,40	-0,53	-0,38	
151	LwK 3.3	22,3	1,40	1,87	1,34	
152	LwK 3.3	21,1	0,20	0,27	0,19	
153	LwK 3.2	21,0	0,10	0,13	0,10	

6.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	nur FTIR-Basis	20,7	-0,21	-0,28	-0,20	
204	FTIR Mix Basis	22,4	1,47	1,96	1,40	
206	FTIR (gemessen)	19,9	-0,95	-1,27	-0,91	
208	FTIR Mix Basis	21,5	0,61	0,82	0,58	
210	FTIR (gemessen)	20,5	-0,42	-0,56	-0,40	
217	FTIR (gemessen)	22,1	1,20	1,60	1,14	
218	FTIR (gemessen)	23,4	2,52	3,37	2,40	
220	FTIR (gemessen)	22,0	1,10	1,47	1,05	
224	nur FTIR-Basis	21,4	0,53	0,71	0,51	
228	dens/FTIR	21,5	0,60	0,80	0,57	
237	nur FTIR-Basis	21,2	0,30	0,40	0,29	
254	FTIR (gemessen)	20,1	-0,80	-1,07	-0,76	
258	nur FTIR-Basis	19,8	-1,10	-1,47	-1,05	
259	nur FTIR-Basis	19,4	-1,50	-2,00	-1,43	
260	nur FTIR-Basis	20,8	-0,10	-0,13	-0,10	
262	nur FTIR-Basis	21,9	1,00	1,34	0,95	
266	FTIR Mix Basis	20,6	-0,32	-0,43	-0,31	
267	FTIR Mix Basis	20,5	-0,40	-0,53	-0,38	
276	FTIR Mix Basis	21,9	1,04	1,39	0,99	
277	FTIR Mix Basis	22,3	1,36	1,82	1,30	
278	FTIR Mix Basis	21,6	0,70	0,94	0,67	
281	FTIR Mix Basis	20,3	-0,60	-0,80	-0,57	

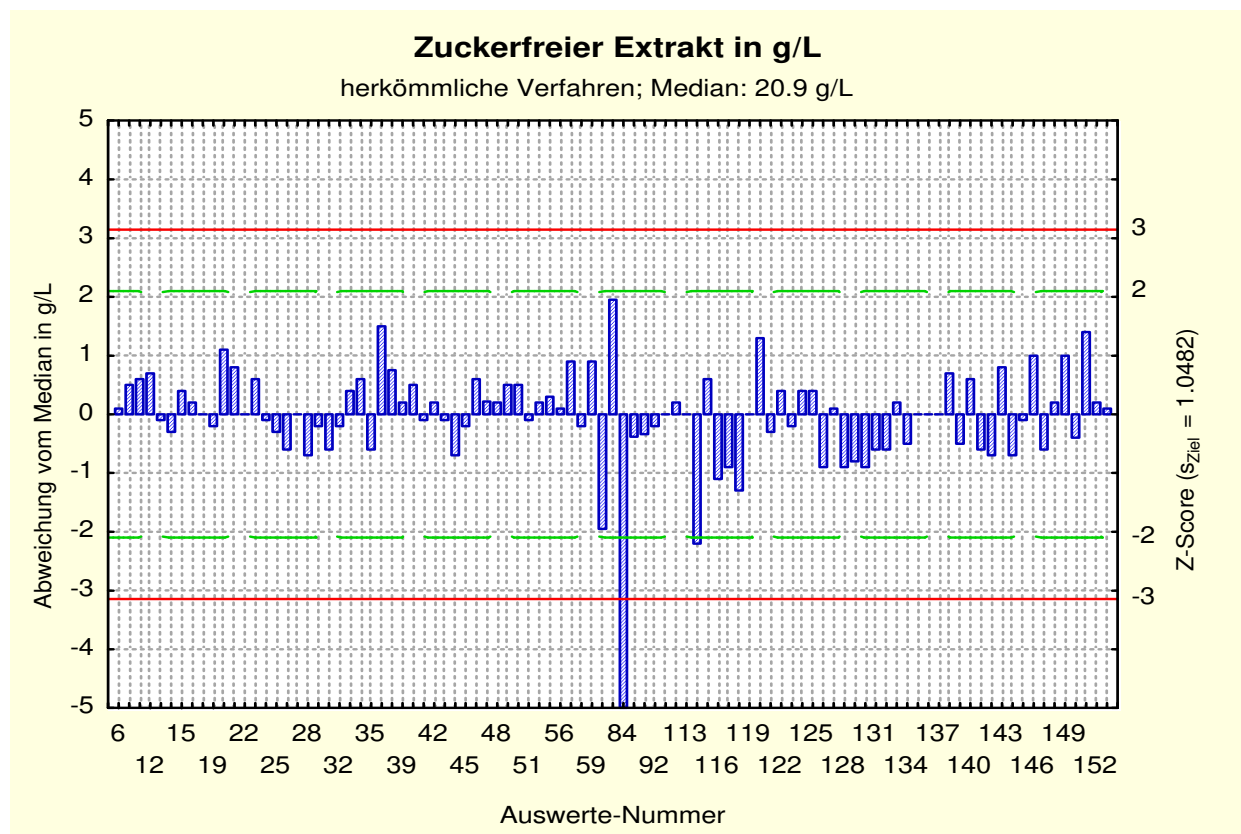
6.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

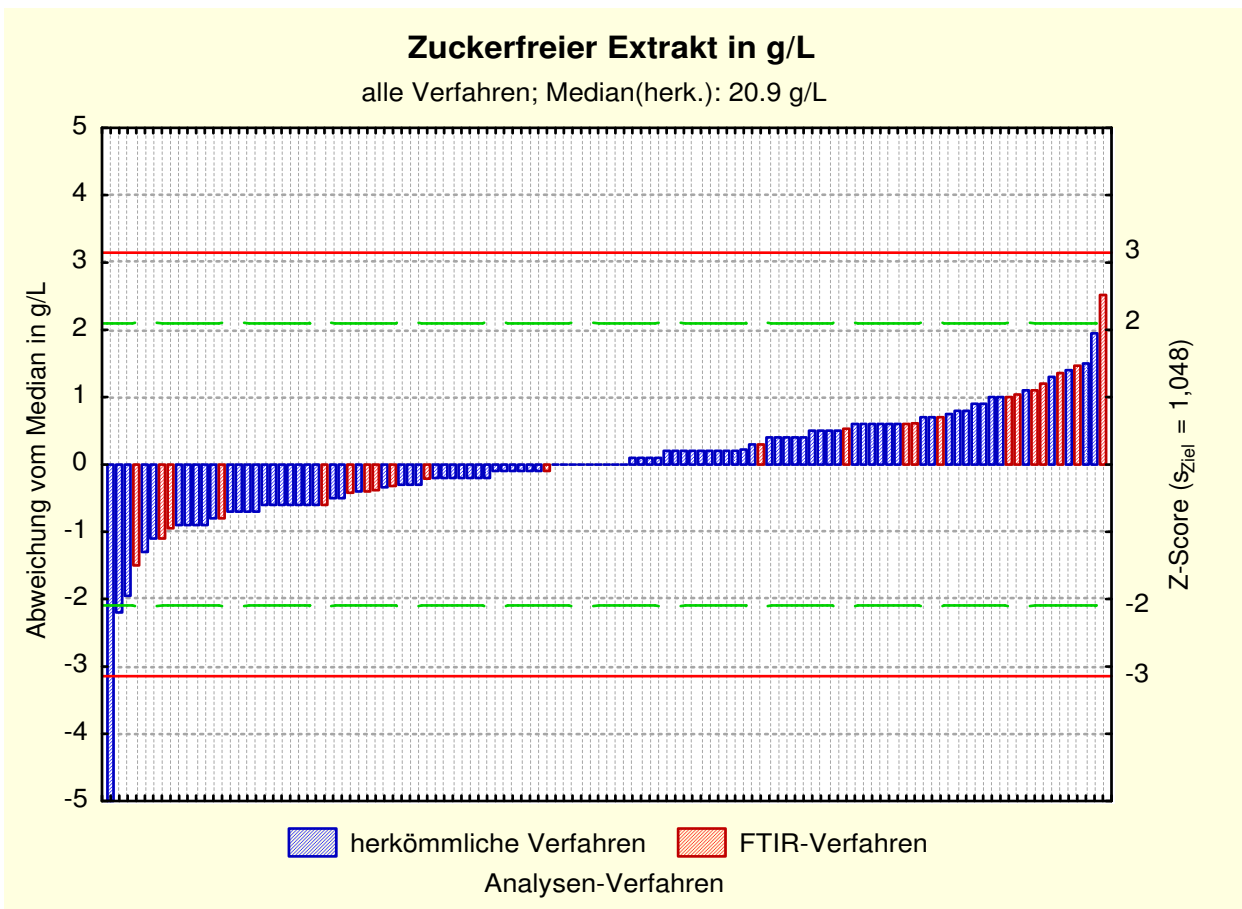
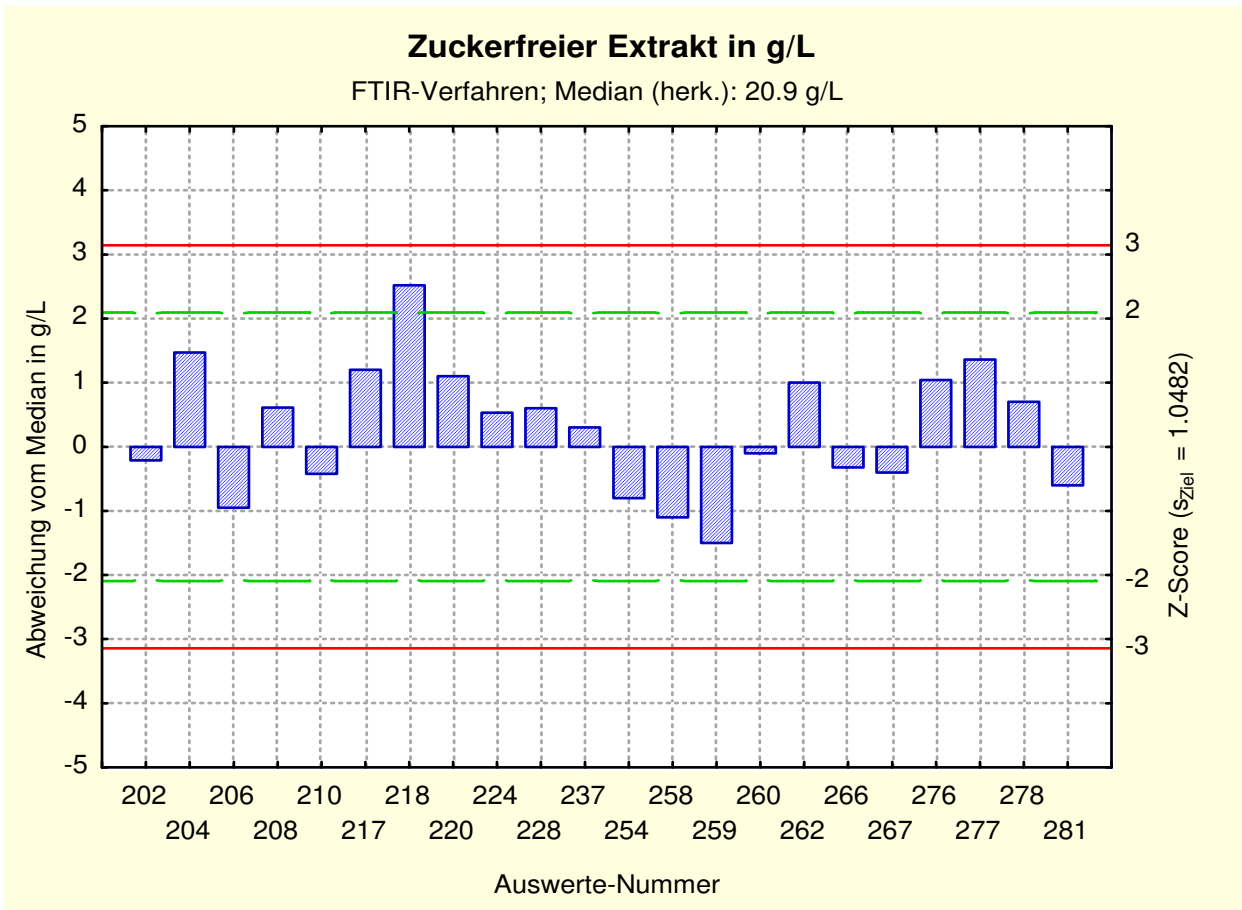
Ergebnisse für Zuckerfreier Extrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	93	92
Minimalwert	14,0	18,7
Mittelwert	20,83	20,91
Median	20,90	20,90
Maximalwert	22,4	22,4
Standardabweichung (s_L)	0,970	0,657
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,101	0,069
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,748	0,748
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,048	1,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,30	0,88
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,93	0,63
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)		
Quotient (u_M/s_H)	0,13	0,09
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,10	0,07
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)		

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

6.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	1	20,700	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol n. LwK 2.1	15	20,631	0,889
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis sonst. Alkohol	77	20,955	0,604
	herkömmliche Verfahren	93	20,910	0,630
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	21,342	1,567
dens/FTIR	Berechnung. n. Tabarie (Basis: densitometr. Dichte; FTIR-Alkohol und FTIR-Zucker)	1	21,500	
FTIR Mix Basis	FTIR gemessener Gesamtextrakt - FTIR-Zucker	8	21,383	0,931
nur FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf Basis: FTIR-Dichte; FTIR-Alkohol; FTIR-Zucker	8	20,727	0,916
spezial	Gesamtextrakt (wie ermittelt ?) - Zucker, enz.	1	22,850	





6.8 Vergärbare Zucker [g/L]

6.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	LwK 4.7	13,98	-0,020	-0,04	-0,05	
06	LwK 4.5	13,90	-0,100	-0,19	-0,24	
07	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
11	LwK 4.7	14,20	0,200	0,38	0,48	
12	LwK 4.1	13,68	-0,320	-0,60	-0,76	
13	LwK 4.7	14,10	0,100	0,19	0,24	
14	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
15	LwK 4.7	13,98	-0,020	-0,04	-0,05	
16	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
17	LwK 4.5	14,40	0,400	0,75	0,95	
20	LwK 4.5	13,46	-0,540	-1,01	-1,28	
21	LwK 4.4	14,30	0,300	0,56	0,71	
22	LwK 4.7	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
23	LwK 4.7	13,85	-0,150	-0,28	-0,36	
24	NMR	14,00	0,000	0,00	0,00	
25	LwK 4.4	14,00	0,000	0,00	0,00	
26	LwK 4.4	14,70	0,700	1,31	1,66	
27	LwK 4.5	14,14	0,140	0,26	0,33	
28	LwK 4.7	14,70	0,700	1,31	1,66	
29	LwK 4.4	14,90	0,900	1,69	2,14	
30	LwK 4.4	14,00	0,000	0,00	0,00	
31	LwK 4.5	14,70	0,700	1,31	1,66	
32	LwK 4.5	14,20	0,200	0,38	0,48	
33	LwK 4.4	13,50	-0,500	-0,94	-1,19	
34	LwK 4.4	13,60	-0,400	-0,75	-0,95	
35	LwK 4.8	14,80	0,800	1,50	1,90	
36	LwK 4.5	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
38	LwK 4.3	13,10	-0,900	-1,69	-2,14	
39	LwK 4.5	14,39	0,390	0,73	0,93	
40	LwK 4.7	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
41	LwK 4.5	14,20	0,200	0,38	0,48	
42	LwK 4.5	568,00	554,000	1040,68	1316,23	(*)
43	LwK 4.5	14,15	0,154	0,29	0,37	
44	LwK 4.4	14,75	0,750	1,41	1,78	
45	LwK 4.5	14,07	0,070	0,13	0,17	
46	LwK 4.5	13,60	-0,400	-0,75	-0,95	
47	LwK 4.5	13,98	-0,020	-0,04	-0,05	
48	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
49	LwK 4.4	13,35	-0,650	-1,22	-1,54	
50	LwK 4.7	24,07	10,070	18,92	23,92	(*)
51	LwK 4.4	13,80	-0,200	-0,38	-0,48	
53	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 4.5	13,90	-0,100	-0,19	-0,24	
56	LwK 4.5	13,95	-0,050	-0,09	-0,12	
57	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
58	LwK 4.4	14,60	0,600	1,13	1,43	
59	LwK 4.7	13,45	-0,550	-1,03	-1,31	
60	LwK 4.4	14,65	0,650	1,22	1,54	
61	LwK 4.5	14,50	0,500	0,94	1,19	
63	LwK 4.4	14,15	0,150	0,28	0,36	
68	LwK 4.5	14,18	0,180	0,34	0,43	
74	LwK 4.5	14,20	0,200	0,38	0,48	
75	LwK 4.4	12,55	-1,450	-2,72	-3,44	
81	LwK 4.5	13,55	-0,450	-0,85	-1,07	
84	LwK 4.3	16,73	2,730	5,13	6,49	(**)
92	LwK 4.7	13,88	-0,120	-0,23	-0,29	
107	NMR	13,19	-0,814	-1,53	-1,93	
108	NMR	12,98	-1,020	-1,92	-2,42	
109	NMR	13,32	-0,678	-1,27	-1,61	
110	NMR	14,73	0,725	1,36	1,72	

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

(**) Der Messwert weicht 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
111	LwK 4.5	14,30	0,300	0,56	0,71	
112	LwK 4.7	14,00	0,000	0,00	0,00	
113	LwK 4.7	14,00	0,000	0,00	0,00	
114	LwK 4.4	15,20	1,200	2,25	2,85	
115	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
116	LwK 4.4	15,60	1,600	3,01	3,80	
117	LwK 4.4	14,50	0,500	0,94	1,19	
118	LwK 4.4	13,50	-0,500	-0,94	-1,19	
119	LwK 4.7	14,12	0,120	0,23	0,29	
120	LwK 4.4	14,60	0,600	1,13	1,43	
121	LwK 4.7	14,30	0,300	0,56	0,71	
122	LwK 4.5	13,90	-0,100	-0,19	-0,24	
123	LwK 4.5	14,27	0,270	0,51	0,64	
124	LwK 4.5	13,80	-0,200	-0,38	-0,48	
125	LwK 4.4	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
126	LwK 4.4	14,70	0,700	1,31	1,66	
127	LwK 4.7	14,10	0,100	0,19	0,24	
128	LwK 4.5	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
129	LwK 4.4	14,50	0,500	0,94	1,19	
130	LwK 4.4	14,60	0,600	1,13	1,43	
131	LwK 4.4	14,10	0,100	0,19	0,24	
132	LwK 4.4	14,58	0,580	1,09	1,38	
133	LwK 4.5	13,60	-0,400	-0,75	-0,95	
134	LwK 4.7	13,90	-0,100	-0,19	-0,24	
135	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
136	LwK 4.5	14,10	0,100	0,19	0,24	
137	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
138	LwK 4.5	13,73	-0,270	-0,51	-0,64	
139	LwK 4.4	14,00	0,000	0,00	0,00	
140	LwK 4.7	13,80	-0,200	-0,38	-0,48	
141	LwK 4.4	14,90	0,900	1,69	2,14	
142	LwK 4.7	14,60	0,600	1,13	1,43	
143	LwK 4.5	13,70	-0,300	-0,56	-0,71	
144	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	1,19	
145	LwK 4.4	14,80	0,800	1,50	1,90	
146	LwK 4.4	14,40	0,400	0,75	0,95	
147	LwK 4.4	14,60	0,600	1,13	1,43	
148	LwK 4.5	14,00	0,000	0,00	0,00	
149	LwK 4.5	13,10	-0,900	-1,69	-2,14	
150	LwK 4.5	14,30	0,300	0,56	0,71	
151	LwK 4.3	12,90	-1,100	-2,07	-2,61	
152	LwK 4.7	14,05	0,050	0,09	0,12	
153	LwK 4.4	14,00	0,000	0,00	0,00	

6.8.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	14,28	0,280	0,53	0,48	
203	LwK 4.8	13,92	-0,080	-0,15	-0,14	
204	LwK 4.8	14,65	0,650	1,22	1,11	
206	LwK 4.8	13,87	-0,130	-0,24	-0,22	
207	LwK 4.8	13,57	-0,430	-0,81	-0,74	
209	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	0,86	
210	LwK 4.8	13,92	-0,080	-0,15	-0,14	
211	LwK 4.8	13,00	-1,000	-1,88	-1,71	
212	LwK 4.8	13,78	-0,220	-0,41	-0,38	
213	LwK 4.8	14,31	0,310	0,58	0,53	
214	LwK 4.8	14,79	0,790	1,48	1,35	
216	LwK 4.8	14,00	0,000	0,00	0,00	
217	LwK 4.8	13,20	-0,800	-1,50	-1,37	
218	LwK 4.8	12,75	-1,250	-2,35	-2,14	
219	LwK 4.8	14,43	0,430	0,81	0,74	
220	LwK 4.8	14,73	0,730	1,37	1,25	

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	LwK 4.8	15,70	1,700	3,19	2,91	
222	LwK 4.8	13,26	-0,740	-1,39	-1,27	
224	LwK 4.8	13,47	-0,530	-1,00	-0,91	
225	LwK 4.8	13,90	-0,100	-0,19	-0,17	
226	LwK 4.8	15,00	1,000	1,88	1,71	
227	LwK 4.8	14,43	0,430	0,81	0,74	
228	LwK 4.8	13,40	-0,600	-1,13	-1,03	
229	LwK 4.8	15,18	1,180	2,22	2,02	
230	LwK 4.8	14,41	0,410	0,77	0,70	
231	LwK 4.8	14,10	0,100	0,19	0,17	
233	LwK 4.8	12,96	-1,040	-1,95	-1,78	
235	LwK 4.8	14,79	0,790	1,48	1,35	
236	LwK 4.8	11,50	-2,500	-4,70	-4,28	
237	LwK 4.8	13,90	-0,100	-0,19	-0,17	
238	LwK 4.8	14,94	0,940	1,77	1,61	
241	LwK 4.8	15,34	1,340	2,52	2,29	
242	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	0,86	
243	LwK 4.8	13,70	-0,300	-0,56	-0,51	
244	LwK 4.8	15,20	1,200	2,25	2,05	
245	LwK 4.8	13,79	-0,210	-0,39	-0,36	
246	LwK 4.8	14,55	0,550	1,03	0,94	
247	LwK 4.8	13,99	-0,010	-0,02	-0,02	
248	LwK 4.8	14,47	0,470	0,88	0,80	
249	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
250	LwK 4.8	14,31	0,310	0,58	0,53	
251	LwK 4.8	13,39	-0,610	-1,15	-1,04	
254	LwK 4.8	15,40	1,400	2,63	2,40	
255	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
256	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	0,86	
257	LwK 4.8	14,49	0,490	0,92	0,84	
258	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
259	LwK 4.8	16,10	2,100	3,94	3,60	
260	LwK 4.8	14,10	0,100	0,19	0,17	
261	LwK 4.8	13,90	-0,100	-0,19	-0,17	
262	LwK 4.8	13,00	-1,000	-1,88	-1,71	
263	LwK 4.8	14,20	0,200	0,38	0,34	
264	LwK 4.8	14,38	0,380	0,71	0,65	
265	LwK 4.8	13,60	-0,400	-0,75	-0,68	
266	LwK 4.8	14,22	0,220	0,41	0,38	
267	LwK 4.8	14,17	0,170	0,32	0,29	
268	LwK 4.8	14,29	0,290	0,54	0,50	
269	LwK 4.8	14,30	0,300	0,56	0,51	
270	LwK 4.8	14,77	0,770	1,45	1,32	
271	LwK 4.8	14,33	0,330	0,62	0,57	
273	LwK 4.8	15,05	1,050	1,97	1,80	
274	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	0,86	
275	LwK 4.8	13,02	-0,980	-1,84	-1,68	
276	LwK 4.8	12,46	-1,540	-2,89	-2,64	
277	LwK 4.8	12,30	-1,700	-3,19	-2,91	
278	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
281	LwK 4.8	14,85	0,850	1,60	1,46	
282	LwK 4.8	13,52	-0,480	-0,90	-0,82	
284	LwK 4.8	16,40	2,400	4,51	4,11	
322	LwK 4.8	13,26	-0,740	-1,39	-1,27	
338	LwK 4.8	14,88	0,880	1,65	1,51	
349	LwK 4.8	13,60	-0,400	-0,75	-0,68	
363	LwK 4.8	14,60	0,600	1,13	1,03	

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
12	LwK 4.1	13,68	-0,670	-1,23	-1,56	
21	LwK 4.4	14,30	-0,050	-0,09	-0,12	
25	LwK 4.4	14,00	-0,350	-0,64	-0,81	
26	LwK 4.4	14,70	0,350	0,64	0,81	
29	LwK 4.4	14,90	0,550	1,01	1,28	
30	LwK 4.4	14,00	-0,350	-0,64	-0,81	
33	LwK 4.4	13,50	-0,850	-1,56	-1,98	
34	LwK 4.4	13,60	-0,750	-1,38	-1,74	
38	LwK 4.3	13,10	-1,250	-2,30	-2,90	
44	LwK 4.4	14,75	0,400	0,74	0,93	
49	LwK 4.4	13,35	-1,000	-1,84	-2,32	
51	LwK 4.4	13,80	-0,550	-1,01	-1,28	
58	LwK 4.4	14,60	0,250	0,46	0,58	
60	LwK 4.4	14,65	0,300	0,55	0,70	
63	LwK 4.4	14,15	-0,200	-0,37	-0,46	
75	LwK 4.4	12,55	-1,800	-3,31	-4,18	
84	LwK 4.3	16,73	2,380	4,38	5,53	(**)
114	LwK 4.4	15,20	0,850	1,56	1,98	
116	LwK 4.4	15,60	1,250	2,30	2,90	
117	LwK 4.4	14,50	0,150	0,28	0,35	
118	LwK 4.4	13,50	-0,850	-1,56	-1,98	
120	LwK 4.4	14,60	0,250	0,46	0,58	
125	LwK 4.4	13,70	-0,650	-1,20	-1,51	
126	LwK 4.4	14,70	0,350	0,64	0,81	
129	LwK 4.4	14,50	0,150	0,28	0,35	
130	LwK 4.4	14,60	0,250	0,46	0,58	
131	LwK 4.4	14,10	-0,250	-0,46	-0,58	
132	LwK 4.4	14,58	0,230	0,42	0,53	
139	LwK 4.4	14,00	-0,350	-0,64	-0,81	
141	LwK 4.4	14,90	0,550	1,01	1,28	
145	LwK 4.4	14,80	0,450	0,83	1,05	
146	LwK 4.4	14,40	0,050	0,09	0,12	
147	LwK 4.4	14,60	0,250	0,46	0,58	
151	LwK 4.3	12,90	-1,450	-2,67	-3,37	
153	LwK 4.4	14,00	-0,350	-0,64	-0,81	

Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde 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	14,28	-0,120	-0,22	-0,21	
203	LwK 4.8	13,92	-0,480	-0,88	-0,82	
204	LwK 4.8	14,65	0,250	0,46	0,43	
206	LwK 4.8	13,87	-0,530	-0,97	-0,91	
207	LwK 4.8	13,57	-0,830	-1,52	-1,42	
209	LwK 4.8	14,50	0,100	0,18	0,17	
210	LwK 4.8	13,92	-0,480	-0,88	-0,82	
211	LwK 4.8	13,00	-1,400	-2,57	-2,40	
212	LwK 4.8	13,78	-0,620	-1,14	-1,06	
213	LwK 4.8	14,31	-0,090	-0,17	-0,15	
214	LwK 4.8	14,79	0,390	0,72	0,67	
216	LwK 4.8	14,00	-0,400	-0,73	-0,68	
217	LwK 4.8	13,20	-1,200	-2,20	-2,05	
218	LwK 4.8	12,75	-1,650	-3,03	-2,83	
219	LwK 4.8	14,43	0,030	0,06	0,05	
220	LwK 4.8	14,73	0,330	0,61	0,57	
221	LwK 4.8	15,70	1,300	2,38	2,23	
222	LwK 4.8	13,26	-1,140	-2,09	-1,95	
224	LwK 4.8	13,47	-0,930	-1,71	-1,59	

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

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
225	LwK 4.8	13,90	-0,500	-0,92	-0,86	
226	LwK 4.8	15,00	0,600	1,10	1,03	
227	LwK 4.8	14,43	0,030	0,06	0,05	
228	LwK 4.8	13,40	-1,000	-1,83	-1,71	
229	LwK 4.8	15,18	0,780	1,43	1,34	
230	LwK 4.8	14,41	0,010	0,02	0,02	
231	LwK 4.8	14,10	-0,300	-0,55	-0,51	
233	LwK 4.8	12,96	-1,440	-2,64	-2,47	
235	LwK 4.8	14,79	0,390	0,72	0,67	
236	LwK 4.8	11,50	-2,900	-5,32	-4,97	
237	LwK 4.8	13,90	-0,500	-0,92	-0,86	
238	LwK 4.8	14,94	0,540	0,99	0,92	
241	LwK 4.8	15,34	0,940	1,72	1,61	
242	LwK 4.8	14,50	0,100	0,18	0,17	
243	LwK 4.8	13,70	-0,700	-1,28	-1,20	
244	LwK 4.8	15,20	0,800	1,47	1,37	
245	LwK 4.8	13,79	-0,610	-1,12	-1,04	
246	LwK 4.8	14,55	0,150	0,28	0,26	
247	LwK 4.8	13,99	-0,410	-0,75	-0,70	
248	LwK 4.8	14,47	0,070	0,13	0,12	
249	LwK 4.8	14,40	0,000	0,00	0,00	
250	LwK 4.8	14,31	-0,090	-0,17	-0,15	
251	LwK 4.8	13,39	-1,010	-1,85	-1,73	
254	LwK 4.8	15,40	1,000	1,83	1,71	
255	LwK 4.8	14,40	0,000	0,00	0,00	
256	LwK 4.8	14,50	0,100	0,18	0,17	
257	LwK 4.8	14,49	0,090	0,17	0,15	
258	LwK 4.8	14,40	0,000	0,00	0,00	
259	LwK 4.8	16,10	1,700	3,12	2,91	
260	LwK 4.8	14,10	-0,300	-0,55	-0,51	
261	LwK 4.8	13,90	-0,500	-0,92	-0,86	
262	LwK 4.8	13,00	-1,400	-2,57	-2,40	
263	LwK 4.8	14,20	-0,200	-0,37	-0,34	
264	LwK 4.8	14,38	-0,020	-0,04	-0,03	
265	LwK 4.8	13,60	-0,800	-1,47	-1,37	
266	LwK 4.8	14,22	-0,180	-0,33	-0,31	
267	LwK 4.8	14,17	-0,230	-0,42	-0,39	
268	LwK 4.8	14,29	-0,110	-0,20	-0,19	
269	LwK 4.8	14,30	-0,100	-0,18	-0,17	
270	LwK 4.8	14,77	0,370	0,68	0,63	
271	LwK 4.8	14,33	-0,070	-0,13	-0,12	
273	LwK 4.8	15,05	0,650	1,19	1,11	
274	LwK 4.8	14,50	0,100	0,18	0,17	
275	LwK 4.8	13,02	-1,380	-2,53	-2,36	
276	LwK 4.8	12,46	-1,940	-3,56	-3,32	
277	LwK 4.8	12,30	-2,100	-3,85	-3,60	
278	LwK 4.8	14,40	0,000	0,00	0,00	
281	LwK 4.8	14,85	0,450	0,83	0,77	
282	LwK 4.8	13,52	-0,880	-1,61	-1,51	
284	LwK 4.8	16,40	2,000	3,67	3,42	
322	LwK 4.8	13,26	-1,140	-2,09	-1,95	
338	LwK 4.8	14,88	0,480	0,88	0,82	
349	LwK 4.8	13,60	-0,800	-1,47	-1,37	
363	LwK 4.8	14,60	0,200	0,37	0,34	

6.8.5 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker(S)

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	13,52	-0,480	-0,90	-0,82	
202	LwK 4.8	14,28	0,280	0,53	0,48	
203	LwK 4.8	13,92	-0,080	-0,15	-0,14	
204	LwK 4.8	14,23	0,230	0,43	0,39	
205	LwK 4.8	13,40	-0,600	-1,13	-1,03	
206	LwK 4.8	13,88	-0,120	-0,23	-0,21	
207	LwK 4.8	14,00	0,000	0,00	0,00	
208	LwK 4.8	13,60	-0,400	-0,75	-0,68	
209	LwK 4.8	14,50	0,500	0,94	0,86	
210	LwK 4.8	13,92	-0,080	-0,15	-0,14	
211	LwK 4.8	13,00	-1,000	-1,88	-1,71	
212	LwK 4.8	13,68	-0,320	-0,60	-0,55	
213	LwK 4.8	13,94	-0,060	-0,11	-0,10	
214	LwK 4.8	15,51	1,510	2,84	2,59	
216	LwK 4.8	13,80	-0,200	-0,38	-0,34	
217	LwK 4.8	13,19	-0,810	-1,52	-1,39	
218	LwK 4.8	11,41	-2,590	-4,87	-4,43	
219	LwK 4.8	13,34	-0,660	-1,24	-1,13	
220	LwK 4.8	13,56	-0,440	-0,83	-0,75	
221	LwK 4.8	15,70	1,700	3,19	2,91	
222	LwK 4.8	14,00	0,000	0,00	0,00	
223	LwK 4.8	14,14	0,140	0,26	0,24	
224	LwK 4.8	14,18	0,180	0,34	0,31	
225	LwK 4.8	14,60	0,600	1,13	1,03	
226	LwK 4.8	13,89	-0,110	-0,21	-0,19	
227	LwK 4.8	14,63	0,630	1,18	1,08	
228	LwK 4.8	13,90	-0,100	-0,19	-0,17	
229	LwK 4.8	14,43	0,430	0,81	0,74	
230	LwK 4.8	14,09	0,090	0,17	0,15	
231	LwK 4.8	14,23	0,230	0,43	0,39	
233	LwK 4.8	12,96	-1,040	-1,95	-1,78	
235	LwK 4.8	14,06	0,060	0,11	0,10	
236	LwK 4.8	11,50	-2,500	-4,70	-4,28	
237	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
238	LwK 4.8	15,35	1,350	2,54	2,31	
241	LwK 4.8	13,68	-0,320	-0,60	-0,55	
242	LwK 4.8	12,70	-1,300	-2,44	-2,23	
243	LwK 4.8	13,50	-0,500	-0,94	-0,86	
244	LwK 4.8	14,42	0,420	0,79	0,72	
245	LwK 4.8	13,85	-0,150	-0,28	-0,26	
246	LwK 4.8	13,15	-0,850	-1,60	-1,46	
247	LwK 4.8	14,02	0,020	0,04	0,03	
248	LwK 4.8	14,29	0,290	0,54	0,50	
249	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
250	LwK 4.8	14,08	0,080	0,15	0,14	
251	LwK 4.8	13,39	-0,610	-1,15	-1,04	
254	LwK 4.8	14,00	0,000	0,00	0,00	
256	LwK 4.8	14,20	0,200	0,38	0,34	
257	LwK 4.8	14,21	0,210	0,39	0,36	
258	LwK 4.8	14,40	0,400	0,75	0,68	
259	LwK 4.8	16,04	2,040	3,83	3,49	
260	LwK 4.8	13,50	-0,500	-0,94	-0,86	
261	LwK 4.8	14,00	0,000	0,00	0,00	
262	LwK 4.8	13,00	-1,000	-1,88	-1,71	
263	LwK 4.8	14,30	0,300	0,56	0,51	
264	LwK 4.8	14,38	0,380	0,71	0,65	
265	LwK 4.8	13,01	-0,990	-1,86	-1,70	
266	LwK 4.8	13,08	-0,920	-1,73	-1,58	
267	LwK 4.8	14,53	0,530	1,00	0,91	
269	LwK 4.8	13,40	-0,600	-1,13	-1,03	
270	LwK 4.8	14,54	0,540	1,01	0,92	
271	LwK 4.8	14,74	0,740	1,39	1,27	
273	LwK 4.8	14,29	0,290	0,54	0,50	
274	LwK 4.8	13,00	-1,000	-1,88	-1,71	
275	LwK 4.8	13,02	-0,980	-1,84	-1,68	

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

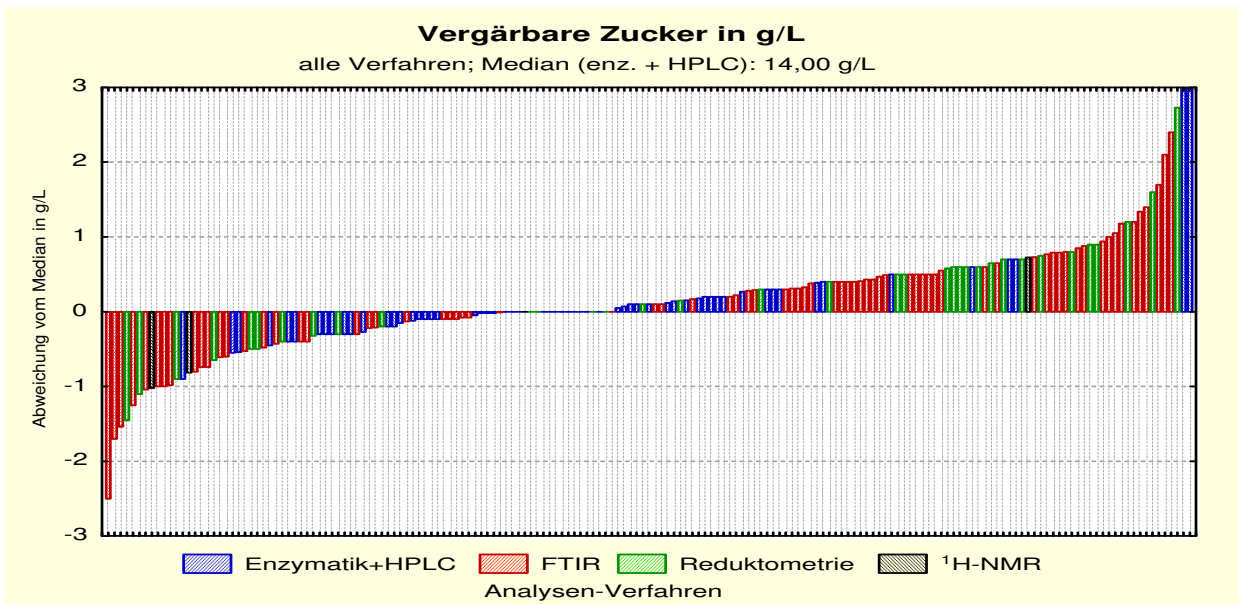
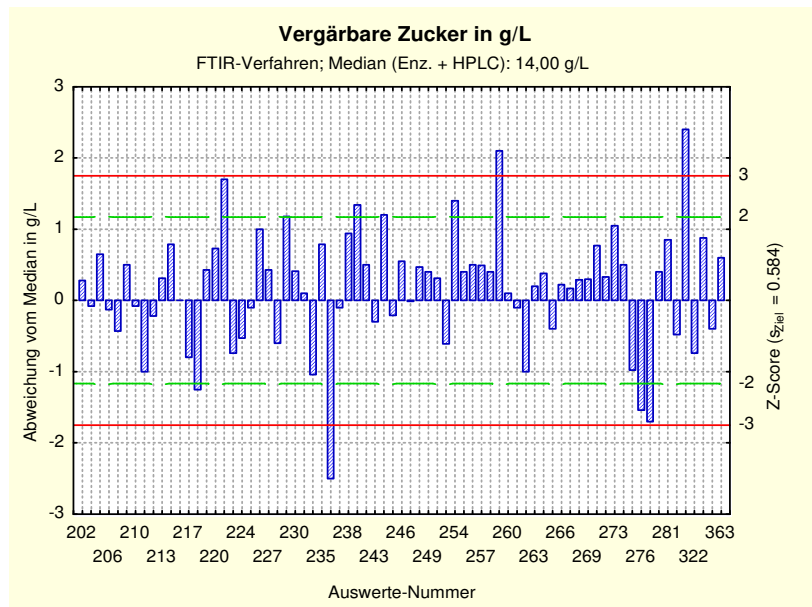
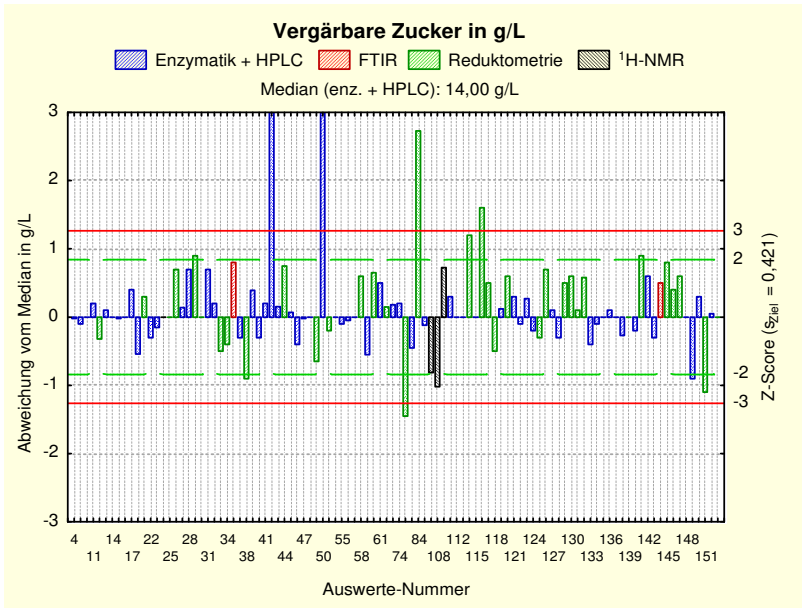
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	LwK 4.8	14,86	0,860	1,62	1,47	
277	LwK 4.8	15,19	1,190	2,24	2,04	
278	LwK 4.8	13,20	-0,800	-1,50	-1,37	
280	LwK 4.8	13,60	-0,400	-0,75	-0,68	
281	LwK 4.8	14,95	0,950	1,78	1,63	
282	LwK 4.8	13,70	-0,300	-0,56	-0,51	
283	LwK 4.8	12,50	-1,500	-2,82	-2,57	
313	LwK 4.8	12,59	-1,410	-2,65	-2,41	
322	LwK 4.8	13,82	-0,180	-0,34	-0,31	
338	LwK 4.8	15,08	1,080	2,03	1,85	
349	LwK 4.8	15,20	1,200	2,25	2,05	
363	LwK 4.8	14,20	0,200	0,38	0,34	

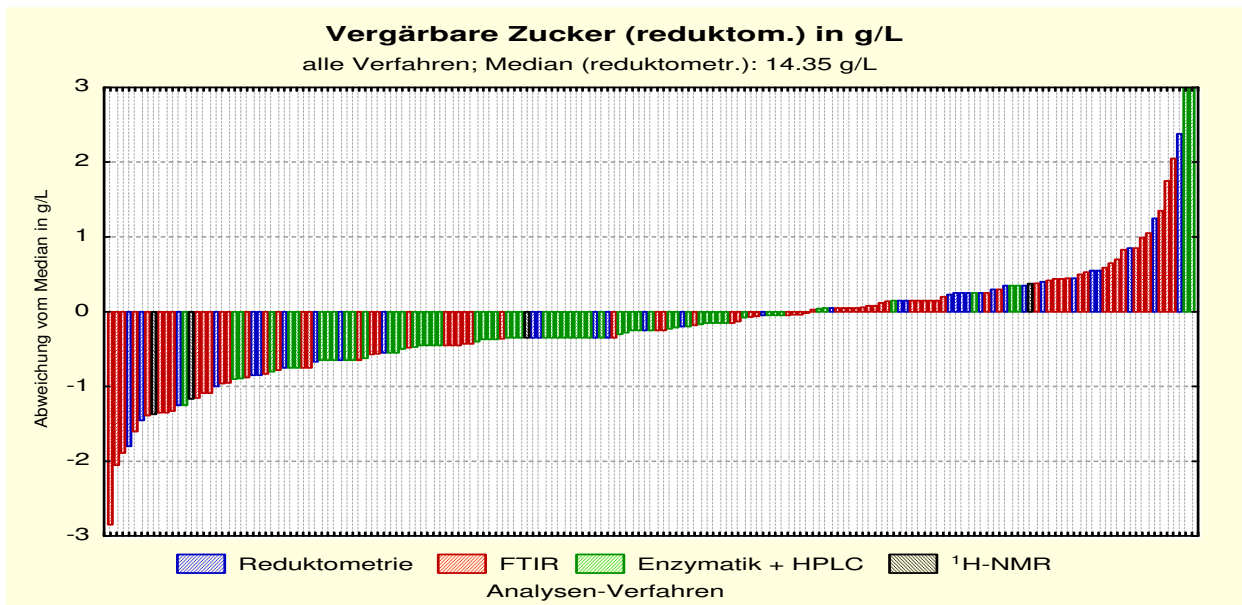
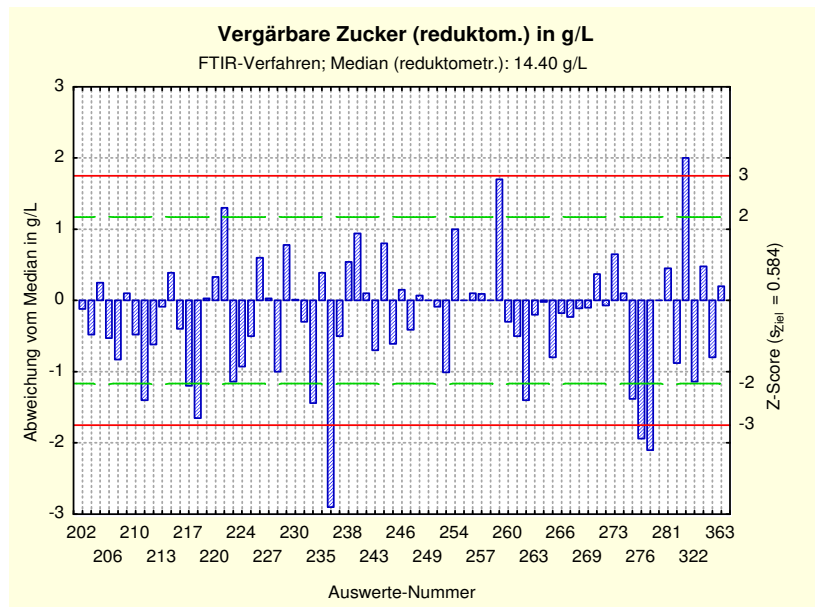
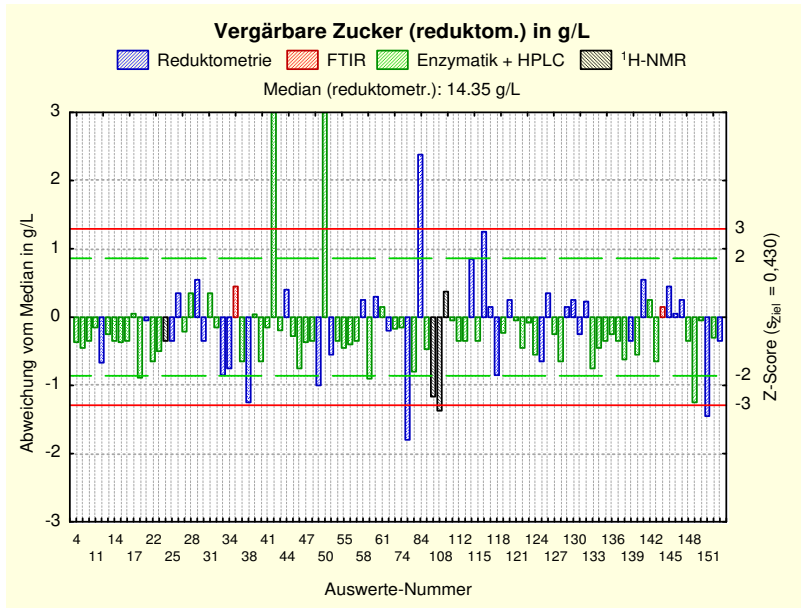
6.8.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

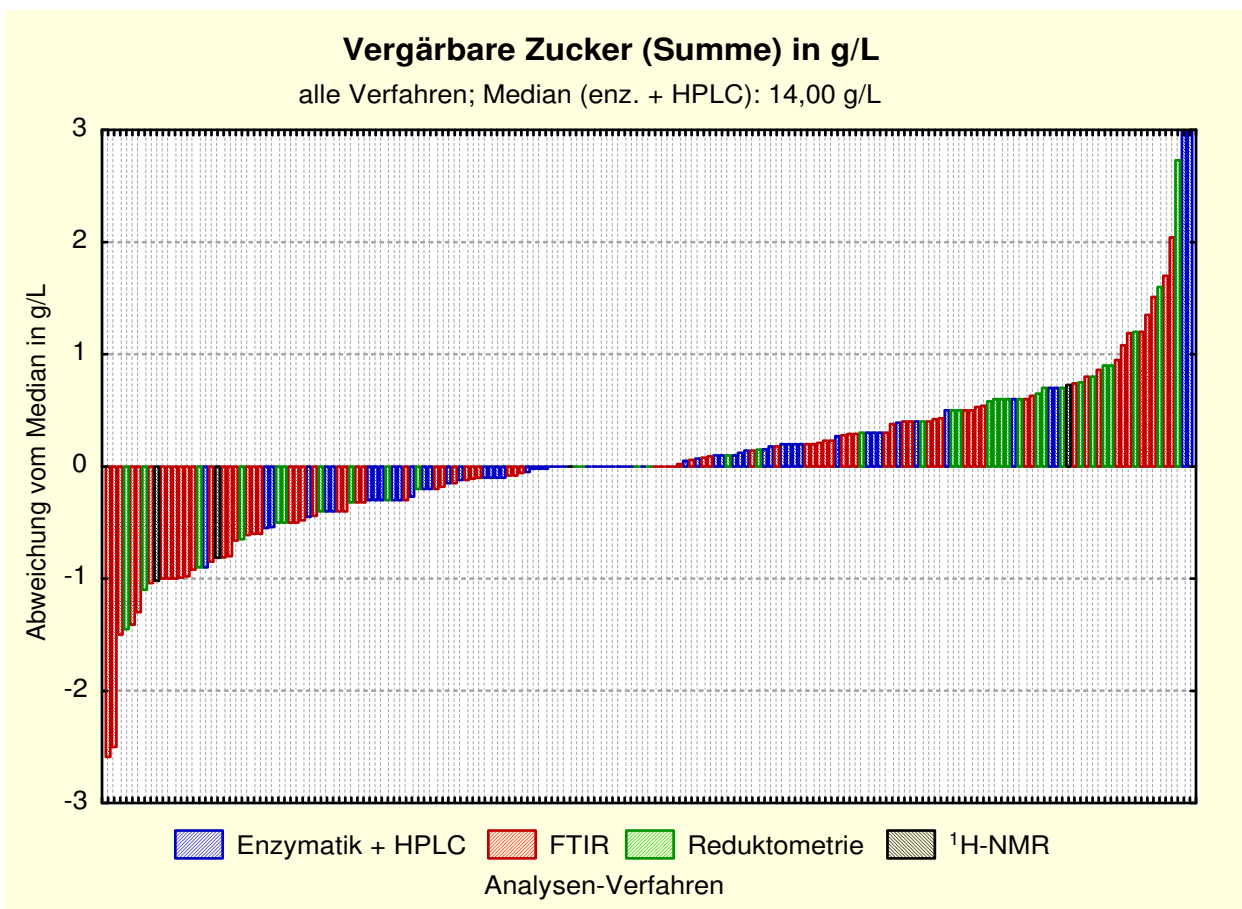
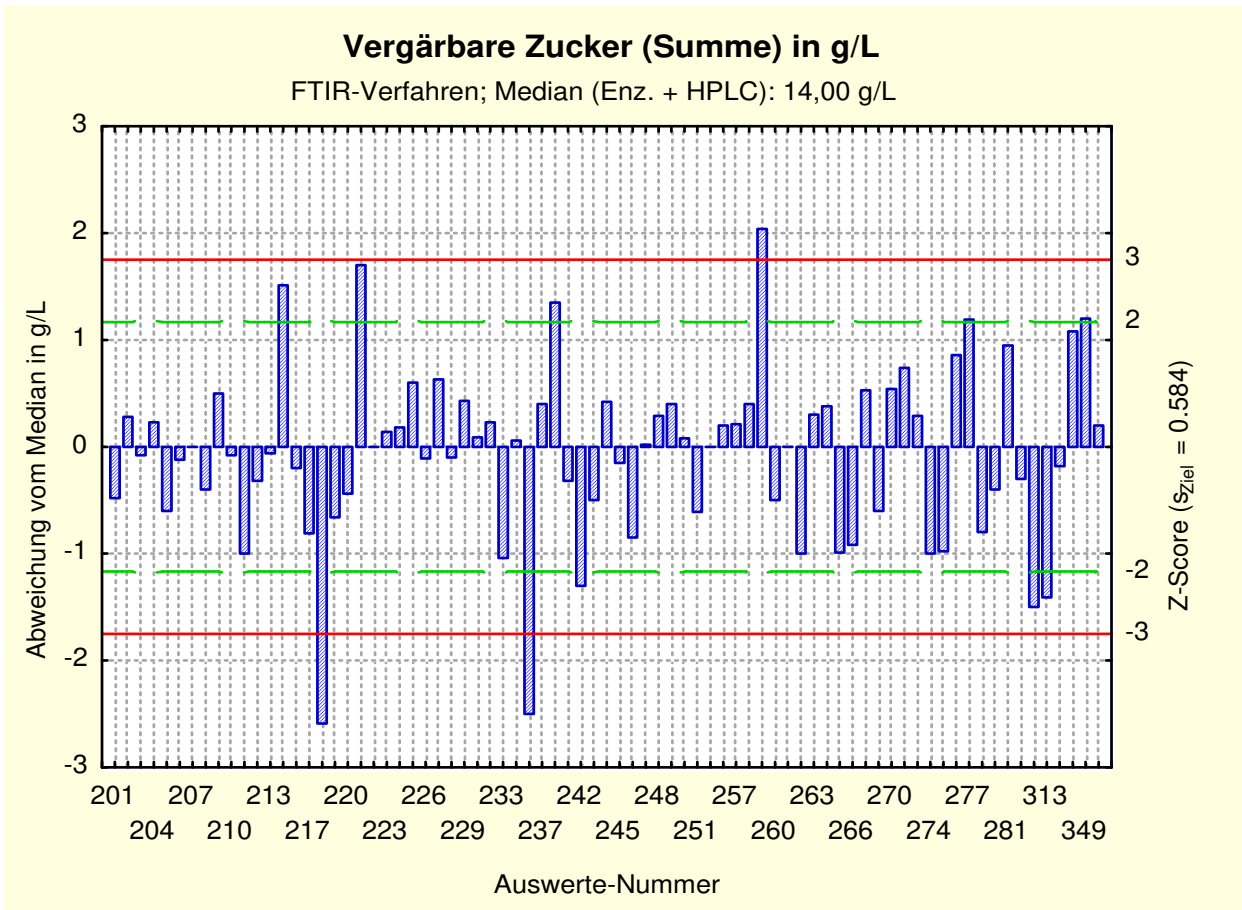
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch		reduktometrisch	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	59	35	34	
Minimalwert	13,10	12,55	12,55	
Mittelwert	14,001	14,273	14,200	
Median	14,000	14,400	14,350	
Maximalwert	14,70	16,73	15,60	
Standardabweichung (s_L)	0,298	0,787	0,671	
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,039	0,133	0,115	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,532	0,545	0,544	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,421	0,432	0,430	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,584	0,584	0,584	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,56	1,44	1,23	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,71	1,82	1,56	
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,51	1,35	1,15	
Quotient (u_M/s_H)	0,07	0,24	0,21	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,09	0,31	0,27	
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,07	0,23	0,20	

6.8.7 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	13,680	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	3	14,018	2,003
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	31	14,321	0,566
	reduktometrische Verfahren	35	14,261	0,667
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	41	14,010	0,293
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	20	14,032	0,286
	Enzymatik und HPLC	60	14,008	0,274
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis "wie mitgeteilt")	75	14,194	0,724
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Basis Summe FTIR-Glucose + FTIR-Fructose)	79	13,964	0,728
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	13,610	0,744







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	4,54	0,130	0,65	0,80	
04	HPLC	4,18	-0,230	-1,15	-1,42	
05	enzymat., autom.	4,88	0,470	2,36	2,90	
06	enzymat., autom.	4,42	0,010	0,05	0,06	
07	enzymat. Hand	4,57	0,160	0,80	0,99	
11	HPLC	4,74	0,330	1,65	2,04	
12	enzymat., autom.	4,52	0,110	0,55	0,68	
13	HPLC	4,40	-0,010	-0,05	-0,06	
14	enzymat., autom.	4,44	0,030	0,15	0,19	
15	HPLC	4,33	-0,080	-0,40	-0,49	
16	enzymat., autom.	4,46	0,050	0,25	0,31	
17	enzymat., autom.	4,59	0,183	0,92	1,13	
20	enzymat., autom.	4,19	-0,220	-1,10	-1,36	
22	HPLC	4,16	-0,250	-1,25	-1,54	
23	HPLC	4,26	-0,150	-0,75	-0,93	
24	NMR	4,53	0,120	0,60	0,74	
27	enzymat., autom.	4,55	0,140	0,70	0,86	
28	HPLC	4,49	0,080	0,40	0,49	
31	enzymat., autom.	4,44	0,033	0,17	0,20	
32	HPLC	4,41	0,000	0,00	0,00	
36	enzymat., autom.	3,80	-0,610	-3,06	-3,77	
39	enzymat., autom.	4,51	0,100	0,50	0,62	
40	HPLC	4,20	-0,210	-1,05	-1,30	
41	enzymat., autom.	4,53	0,119	0,60	0,73	
42	enzymat., autom.	4,40	-0,010	-0,05	-0,06	
43	enzymat., autom.	4,52	0,109	0,55	0,67	
45	enzymat., autom.	4,55	0,140	0,70	0,86	
46	enzymat., autom.	4,30	-0,110	-0,55	-0,68	
47	enzymat., autom.	4,33	-0,080	-0,40	-0,49	
48	enzymat., autom.	9,40	4,990	25,01	30,81	(*)
50	HPLC	4,25	-0,160	-0,80	-0,99	
53	enzymat., autom.	4,53	0,120	0,60	0,74	
56	enzymat., autom.	4,55	0,140	0,70	0,86	
57	enzymat., autom.	4,60	0,192	0,96	1,19	
59	HPLC	4,10	-0,310	-1,55	-1,91	
68	enzymat., autom.	4,54	0,130	0,65	0,80	
81	enzymat. Hand	4,30	-0,105	-0,53	-0,65	
85	HPLC	3,62	-0,790	-3,96	-4,88	
92	HPLC	4,20	-0,210	-1,05	-1,30	
107	NMR	4,09	-0,322	-1,62	-1,99	
108	NMR	4,10	-0,313	-1,57	-1,93	
109	NMR	4,25	-0,158	-0,79	-0,97	
110	NMR	4,64	0,228	1,14	1,41	
112	HPLC	4,30	-0,110	-0,55	-0,68	
119	HPLC	4,33	-0,080	-0,40	-0,49	
121	HPLC	4,50	0,090	0,45	0,56	
122	enzymat., autom.	4,49	0,080	0,40	0,49	
123	enzymat., autom.	4,49	0,080	0,40	0,49	
124	enzymat., autom.	4,38	-0,030	-0,15	-0,19	
127	HPLC	4,40	-0,010	-0,05	-0,06	
130	enzymat. Hand	4,20	-0,210	-1,05	-1,30	
134	HPLC	4,20	-0,210	-1,05	-1,30	
135	enzymat., autom.	4,31	-0,100	-0,50	-0,62	
136	enzymat., autom.	4,50	0,090	0,45	0,56	
137	enzymat., autom.	4,48	0,070	0,35	0,43	
138	enzymat., autom.	4,40	-0,010	-0,05	-0,06	
140	HPLC	4,29	-0,120	-0,60	-0,74	
142	HPLC	4,50	0,090	0,45	0,56	
143	enzymat., autom.	4,41	0,000	0,00	0,00	
148	enzymat., autom.	4,40	-0,010	-0,05	-0,06	
152	HPLC	4,27	-0,140	-0,70	-0,86	

6.9.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,35	-0,060	-0,30	-0,15	
202	FTIR	4,58	0,170	0,85	0,42	
203	FTIR	4,76	0,350	1,75	0,86	
204	FTIR	4,73	0,320	1,60	0,78	
205	FTIR	4,26	-0,150	-0,75	-0,37	
206	FTIR	4,73	0,320	1,60	0,78	
207	FTIR	4,90	0,490	2,46	1,20	
208	FTIR	4,50	0,090	0,45	0,22	
209	FTIR	5,20	0,790	3,96	1,94	
210	FTIR	4,35	-0,060	-0,30	-0,15	
211	FTIR	4,00	-0,410	-2,05	-1,00	
212	FTIR	4,37	-0,040	-0,20	-0,10	
213	FTIR	4,58	0,170	0,85	0,42	
214	FTIR	5,22	0,810	4,06	1,99	
216	FTIR	4,80	0,390	1,95	0,96	
217	FTIR	4,40	-0,010	-0,05	-0,02	
218	FTIR	3,38	-1,030	-5,16	-2,52	
219	FTIR	4,41	0,000	0,00	0,00	
220	FTIR	4,05	-0,360	-1,80	-0,88	
221	FTIR	6,60	2,190	10,98	5,37	(**)
222	FTIR	4,32	-0,090	-0,45	-0,22	
223	FTIR	4,83	0,420	2,10	1,03	
224	FTIR	4,61	0,200	1,00	0,49	
225	FTIR	4,90	0,490	2,46	1,20	
226	FTIR	4,46	0,050	0,25	0,12	
227	FTIR	4,71	0,300	1,50	0,74	
228	FTIR	4,70	0,290	1,45	0,71	
229	FTIR	5,27	0,860	4,31	2,11	
230	FTIR	4,93	0,520	2,61	1,27	
231	FTIR	4,71	0,300	1,50	0,74	
233	FTIR	3,85	-0,560	-2,81	-1,37	
235	FTIR	4,50	0,090	0,45	0,22	
236	FTIR	4,40	-0,010	-0,05	-0,02	
237	FTIR	5,10	0,690	3,46	1,69	
238	FTIR	6,46	2,050	10,27	5,02	(**)
241	FTIR	4,20	-0,210	-1,05	-0,51	
242	FTIR	4,10	-0,310	-1,55	-0,76	
243	FTIR	3,90	-0,510	-2,56	-1,25	
244	FTIR	4,99	0,580	2,91	1,42	
245	FTIR	4,54	0,130	0,65	0,32	
246	FTIR	4,21	-0,200	-1,00	-0,49	
247	FTIR	4,76	0,350	1,75	0,86	
248	FTIR	5,00	0,590	2,96	1,45	
249	FTIR	4,80	0,390	1,95	0,96	
250	FTIR	4,62	0,210	1,05	0,51	
251	FTIR	4,17	-0,240	-1,20	-0,59	
254	FTIR	4,70	0,290	1,45	0,71	
256	FTIR	4,50	0,090	0,45	0,22	
257	FTIR	4,73	0,320	1,60	0,78	
258	FTIR	4,70	0,290	1,45	0,71	
259	FTIR	6,20	1,790	8,97	4,39	
260	FTIR	4,90	0,490	2,46	1,20	
261	FTIR	4,20	-0,210	-1,05	-0,51	
262	FTIR	4,40	-0,010	-0,05	-0,02	
263	FTIR	4,40	-0,010	-0,05	-0,02	
264	FTIR	4,67	0,260	1,30	0,64	
265	FTIR	3,97	-0,440	-2,21	-1,08	
266	FTIR	3,50	-0,910	-4,56	-2,23	
267	FTIR	4,57	0,160	0,80	0,39	
269	FTIR	4,70	0,290	1,45	0,71	
270	FTIR	4,25	-0,160	-0,80	-0,39	
271	FTIR	4,90	0,490	2,46	1,20	
273	FTIR	4,02	-0,390	-1,95	-0,96	
274	FTIR	4,60	0,190	0,95	0,47	
275	FTIR	4,57	0,160	0,80	0,39	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

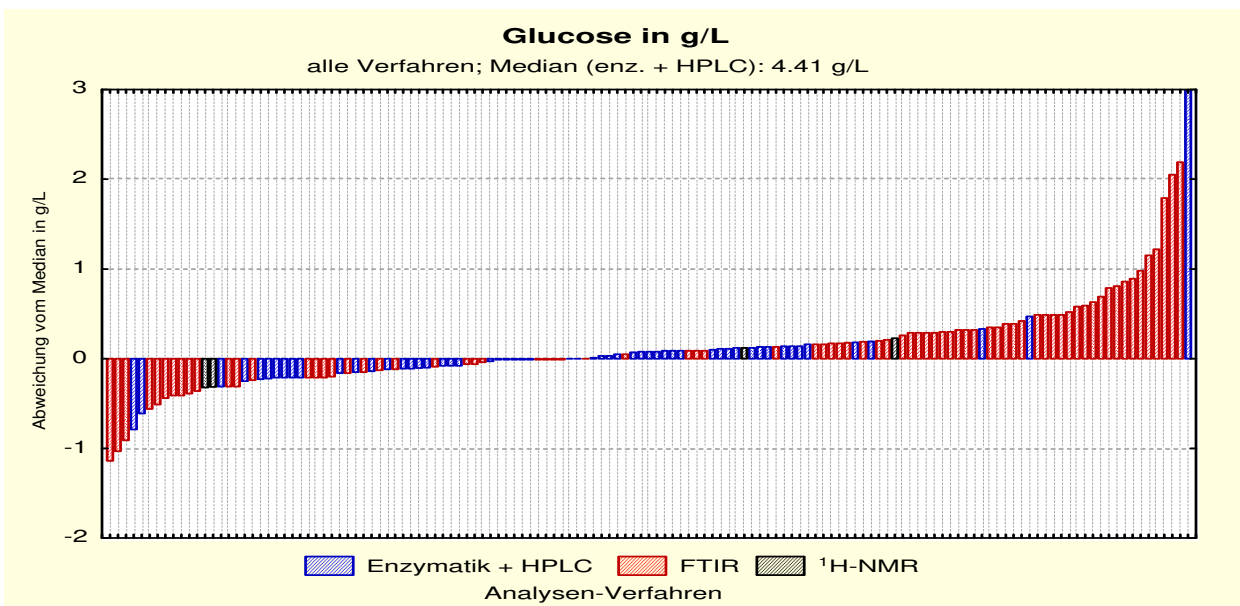
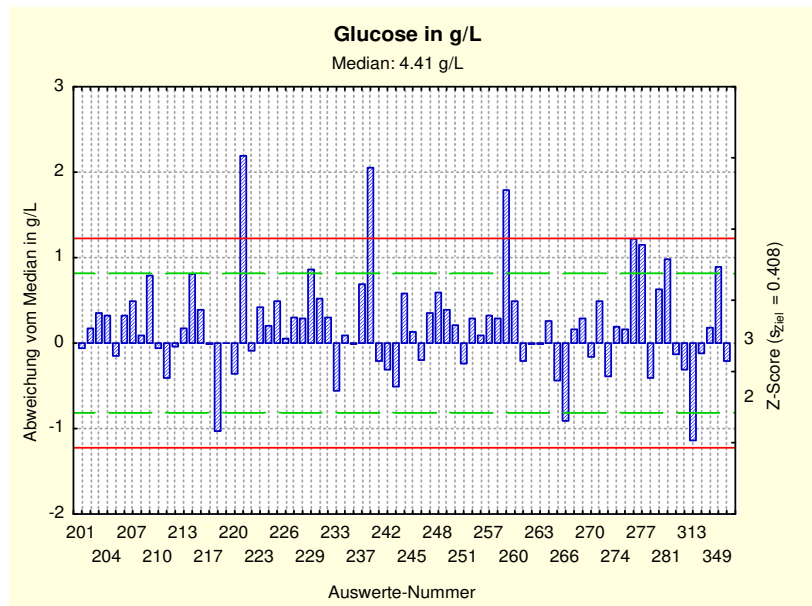
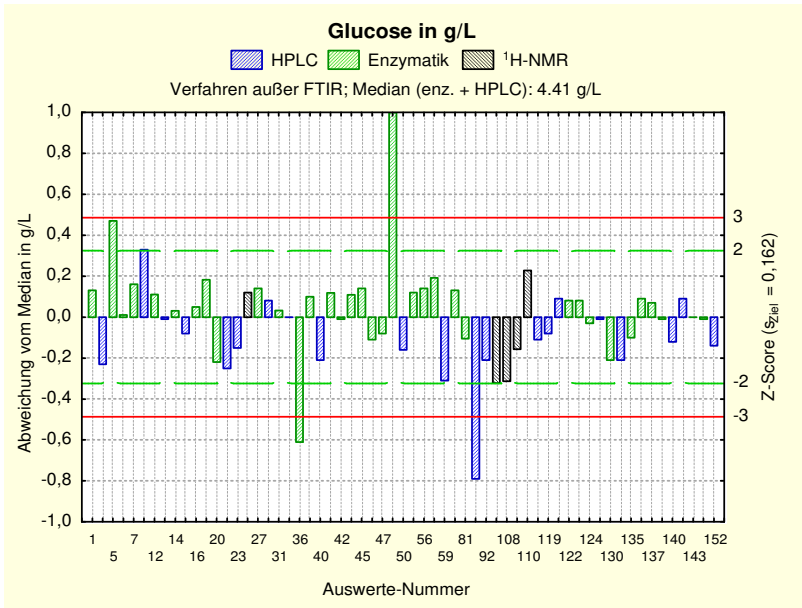
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	5,63	1,220	6,11	2,99	
277	FTIR	5,56	1,150	5,76	2,82	
278	FTIR	4,00	-0,410	-2,05	-1,00	
280	FTIR	5,04	0,630	3,16	1,54	
281	FTIR	5,39	0,980	4,91	2,40	
282	FTIR	4,28	-0,130	-0,65	-0,32	
283	FTIR	4,10	-0,310	-1,55	-0,76	
313	FTIR	3,27	-1,140	-5,71	-2,79	
322	FTIR	4,29	-0,120	-0,60	-0,29	
338	FTIR	4,59	0,180	0,90	0,44	
349	FTIR	5,30	0,890	4,46	2,18	
363	FTIR	4,20	-0,210	-1,05	-0,51	

6.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	55
Minimalwert	3,62
Mittelwert	4,387
Median	4,410
Maximalwert	4,88
Standardabweichung (s_L)	0,201
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,200
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,162
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,408
Horvat-Wert (s_L/s_H)	1,01
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,24
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,49
Quotient (u_M/s_H)	0,14
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,07

6.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie OIV-MA-AS311-03	21	4,304	0,153
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiertes Verfahren OIV-MA-AS311-02	31	4,469	0,110
enzymat. Hand	enzymatisch manuell OIV-MA-AS311-02	4	4,404	0,204
	herkömmliche Verfahren	56	4,403	0,164
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	4,579	0,455
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	5	4,318	0,279



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	9,38	-0,220	-0,57	-0,73	
04	HPLC	9,80	0,200	0,52	0,66	
05	enzymat., autom.	9,70	0,100	0,26	0,33	
06	enzymat., autom.	9,50	-0,100	-0,26	-0,33	
07	enzymat. Hand	9,56	-0,040	-0,10	-0,13	
11	HPLC	9,50	-0,100	-0,26	-0,33	
12	enzymat., autom.	9,67	0,070	0,18	0,23	
13	HPLC	9,70	0,100	0,26	0,33	
14	enzymat., autom.	9,51	-0,090	-0,23	-0,30	
15	HPLC	9,65	0,050	0,13	0,17	
16	enzymat., autom.	9,53	-0,070	-0,18	-0,23	
17	enzymat., autom.	9,83	0,232	0,60	0,77	
20	enzymat., autom.	9,27	-0,330	-0,85	-1,09	
22	HPLC	9,54	-0,060	-0,16	-0,20	
23	HPLC	9,59	-0,010	-0,03	-0,03	
24	NMR	9,46	-0,140	-0,36	-0,46	
27	enzymat., autom.	9,59	-0,010	-0,03	-0,03	
28	HPLC	10,18	0,580	1,50	1,92	
31	enzymat., autom.	10,13	0,534	1,38	1,77	
32	HPLC	10,00	0,400	1,04	1,32	
36	enzymat., autom.	9,90	0,300	0,78	0,99	
39	enzymat., autom.	9,88	0,280	0,72	0,93	
40	HPLC	9,50	-0,100	-0,26	-0,33	
41	enzymat., autom.	9,70	0,104	0,27	0,34	
42	enzymat., autom.	9,57	-0,030	-0,08	-0,10	
43	enzymat., autom.	9,63	0,035	0,09	0,12	
45	enzymat., autom.	9,52	-0,080	-0,21	-0,26	
46	enzymat., autom.	9,30	-0,300	-0,78	-0,99	
47	enzymat., autom.	9,65	0,050	0,13	0,17	
48	enzymat., autom.	4,30	-5,300	-13,72	-17,54	(*)
50	HPLC	9,82	0,220	0,57	0,73	
53	enzymat., autom.	9,41	-0,190	-0,49	-0,63	
56	enzymat., autom.	9,40	-0,200	-0,52	-0,66	
57	enzymat., autom.	9,32	-0,283	-0,73	-0,94	
59	HPLC	9,35	-0,250	-0,65	-0,83	
68	enzymat., autom.	9,64	0,040	0,10	0,13	
81	enzymat. Hand	9,24	-0,360	-0,93	-1,19	
85	HPLC	9,10	-0,500	-1,29	-1,66	
92	HPLC	9,68	0,080	0,21	0,26	
107	NMR	9,10	-0,502	-1,30	-1,66	
108	NMR	8,88	-0,717	-1,86	-2,37	
109	NMR	9,07	-0,531	-1,37	-1,76	
110	NMR	10,09	0,488	1,26	1,61	
112	HPLC	9,70	0,100	0,26	0,33	
119	HPLC	9,79	0,190	0,49	0,63	
121	HPLC	9,80	0,200	0,52	0,66	
122	enzymat., autom.	9,37	-0,230	-0,60	-0,76	
123	enzymat., autom.	9,78	0,180	0,47	0,60	
124	enzymat., autom.	9,38	-0,220	-0,57	-0,73	
127	HPLC	9,70	0,100	0,26	0,33	
130	enzymat. Hand	10,20	0,600	1,55	1,99	
134	HPLC	9,70	0,100	0,26	0,33	
135	enzymat., autom.	9,69	0,090	0,23	0,30	
136	enzymat., autom.	9,60	0,000	0,00	0,00	
137	enzymat., autom.	9,52	-0,080	-0,21	-0,26	
138	enzymat., autom.	9,33	-0,270	-0,70	-0,89	
140	HPLC	9,51	-0,090	-0,23	-0,30	
142	HPLC	10,10	0,500	1,29	1,66	
143	enzymat., autom.	9,29	-0,310	-0,80	-1,03	
148	enzymat., autom.	9,60	0,000	0,00	0,00	
152	HPLC	9,78	0,180	0,47	0,60	

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

6.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	9,17	-0,430	-1,11	-1,30	
202	FTIR	9,70	0,100	0,26	0,30	
203	FTIR	9,16	-0,440	-1,14	-1,33	
204	FTIR	9,50	-0,100	-0,26	-0,30	
205	FTIR	9,14	-0,460	-1,19	-1,39	
206	FTIR	9,15	-0,450	-1,16	-1,36	
207	FTIR	9,10	-0,500	-1,29	-1,52	
208	FTIR	9,10	-0,500	-1,29	-1,52	
209	FTIR	9,30	-0,300	-0,78	-0,91	
210	FTIR	9,57	-0,030	-0,08	-0,09	
211	FTIR	9,00	-0,600	-1,55	-1,82	
212	FTIR	9,31	-0,290	-0,75	-0,88	
213	FTIR	9,36	-0,240	-0,62	-0,73	
214	FTIR	10,29	0,690	1,79	2,09	
216	FTIR	9,00	-0,600	-1,55	-1,82	
217	FTIR	8,79	-0,810	-2,10	-2,45	
218	FTIR	8,03	-1,570	-4,06	-4,76	
219	FTIR	8,93	-0,670	-1,73	-2,03	
220	FTIR	9,51	-0,090	-0,23	-0,27	
221	FTIR	9,10	-0,500	-1,29	-1,52	
222	FTIR	9,68	0,080	0,21	0,24	
223	FTIR	9,31	-0,290	-0,75	-0,88	
224	FTIR	9,57	-0,030	-0,08	-0,09	
225	FTIR	9,70	0,100	0,26	0,30	
226	FTIR	9,43	-0,170	-0,44	-0,52	
227	FTIR	9,92	0,320	0,83	0,97	
228	FTIR	9,20	-0,400	-1,04	-1,21	
229	FTIR	9,16	-0,440	-1,14	-1,33	
230	FTIR	9,16	-0,440	-1,14	-1,33	
231	FTIR	9,52	-0,080	-0,21	-0,24	
233	FTIR	9,11	-0,490	-1,27	-1,48	
235	FTIR	9,56	-0,040	-0,10	-0,12	
236	FTIR	7,10	-2,500	-6,47	-7,58	(**)
237	FTIR	9,30	-0,300	-0,78	-0,91	
238	FTIR	8,89	-0,710	-1,84	-2,15	
241	FTIR	9,48	-0,120	-0,31	-0,36	
242	FTIR	8,60	-1,000	-2,59	-3,03	
243	FTIR	9,60	0,000	0,00	0,00	
244	FTIR	9,43	-0,170	-0,44	-0,52	
245	FTIR	9,31	-0,290	-0,75	-0,88	
246	FTIR	8,94	-0,660	-1,71	-2,00	
247	FTIR	9,26	-0,340	-0,88	-1,03	
248	FTIR	9,29	-0,310	-0,80	-0,94	
249	FTIR	9,60	0,000	0,00	0,00	
250	FTIR	9,46	-0,140	-0,36	-0,42	
251	FTIR	9,22	-0,380	-0,98	-1,15	
254	FTIR	9,30	-0,300	-0,78	-0,91	
256	FTIR	9,70	0,100	0,26	0,30	
257	FTIR	9,48	-0,120	-0,31	-0,36	
258	FTIR	9,70	0,100	0,26	0,30	
259	FTIR	9,84	0,240	0,62	0,73	
260	FTIR	8,60	-1,000	-2,59	-3,03	
261	FTIR	9,80	0,200	0,52	0,61	
262	FTIR	8,60	-1,000	-2,59	-3,03	
263	FTIR	9,90	0,300	0,78	0,91	
264	FTIR	9,71	0,110	0,28	0,33	
265	FTIR	9,04	-0,560	-1,45	-1,70	
266	FTIR	9,58	-0,020	-0,05	-0,06	
267	FTIR	9,96	0,360	0,93	1,09	
269	FTIR	8,70	-0,900	-2,33	-2,73	
270	FTIR	10,29	0,690	1,79	2,09	
271	FTIR	9,84	0,240	0,62	0,73	
273	FTIR	10,27	0,670	1,73	2,03	
274	FTIR	8,40	-1,200	-3,11	-3,64	
275	FTIR	8,45	-1,150	-2,98	-3,48	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

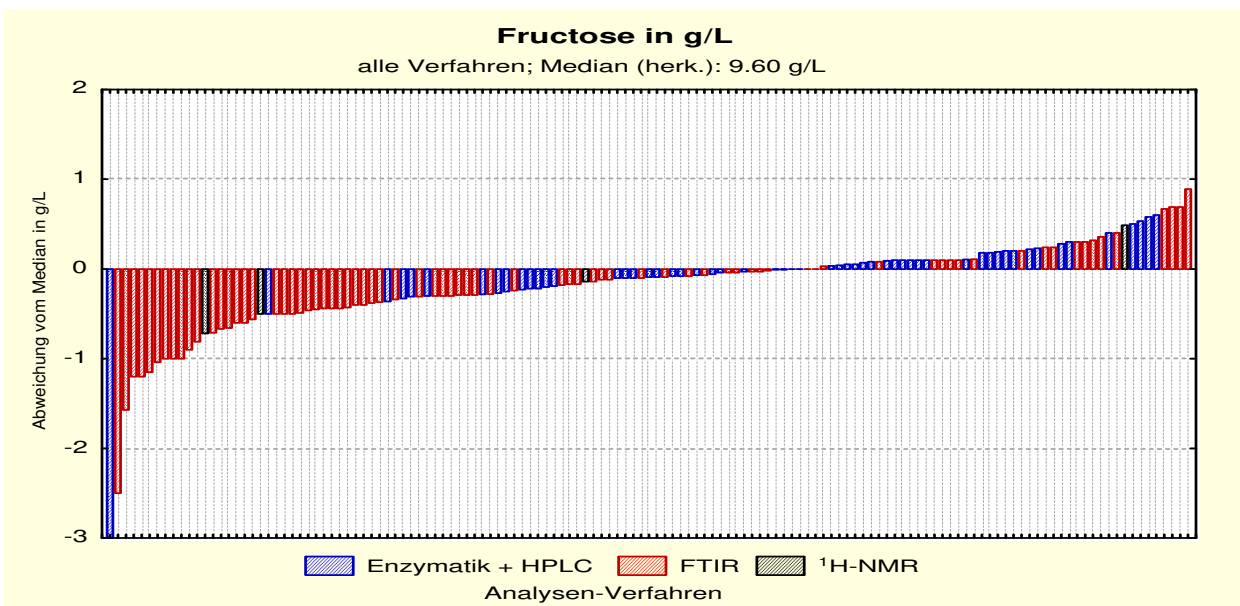
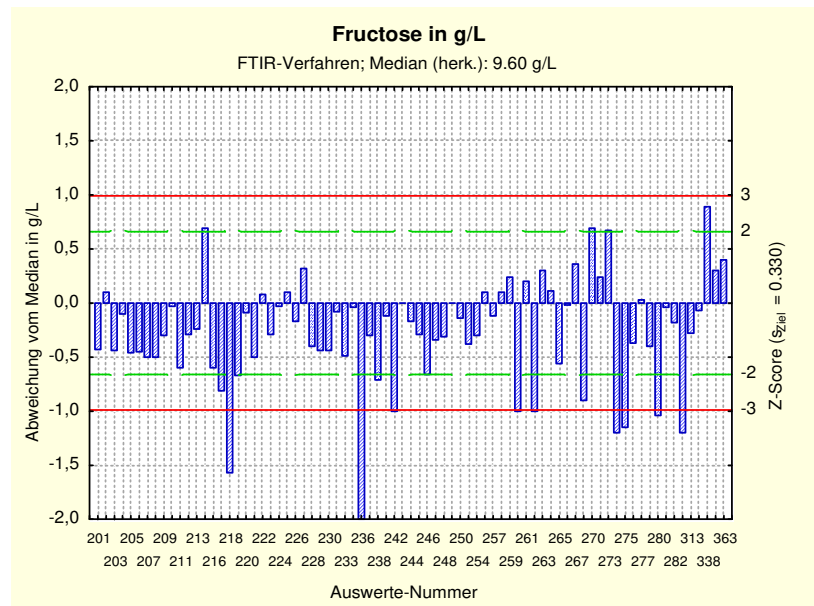
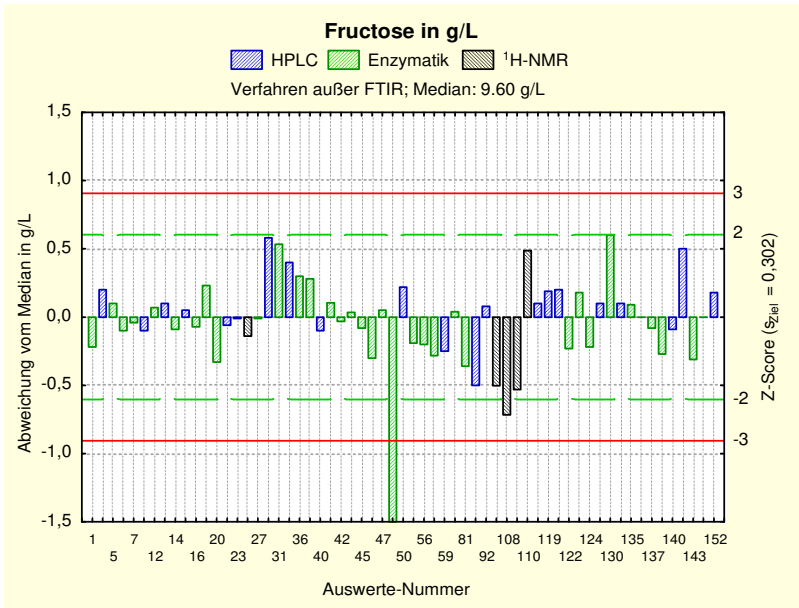
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	9,23	-0,370	-0,96	-1,12	
277	FTIR	9,63	0,030	0,08	0,09	
278	FTIR	9,20	-0,400	-1,04	-1,21	
280	FTIR	8,56	-1,040	-2,69	-3,15	
281	FTIR	9,56	-0,040	-0,10	-0,12	
282	FTIR	9,42	-0,180	-0,47	-0,55	
283	FTIR	8,40	-1,200	-3,11	-3,64	
313	FTIR	9,32	-0,280	-0,72	-0,85	
322	FTIR	9,53	-0,070	-0,18	-0,21	
338	FTIR	10,49	0,890	2,30	2,70	
349	FTIR	9,90	0,300	0,78	0,91	
363	FTIR	10,00	0,400	1,04	1,21	

6.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	55
Minimalwert	9,10
Mittelwert	9,620
Median	9,600
Maximalwert	10,20
Standardabweichung (s_L)	0,239
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,032
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,386
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,302
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,330
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,62
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,79
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,73
Quotient (u_M/s_H)	0,08
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,11
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$)	0,10

6.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie, OIV-MA-AS311-03	21	9,691	0,211
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert, OIV-MA-AS311-02	31	9,554	0,216
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell, OIV-MA-AS311-02	4	9,581	0,452
	alle herkömmlichen Verfahren	56	9,601	0,232
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	9,343	0,445
NMR	^1H -Kernresonanzspektroskopie	5	9,317	0,536



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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,79	-0,11	-0,43	
04	HPLC	5,81	-0,09	-0,35	
05	enzymat. autom.	6,04	0,14	0,55	
06	enzymat. autom.	5,92	0,02	0,08	
07	enzymat. Hand	5,77	-0,13	-0,51	
11	enzymat. autom.	6,11	0,21	0,82	
12	enzymat. Hand	5,84	-0,06	-0,23	
13	HPLC	6,00	0,10	0,39	
15	HPLC	6,04	0,14	0,55	
16	enzymat. autom.	7,55	1,65	6,46	(**)
22	HPLC	5,82	-0,08	-0,31	
23	HPLC	5,98	0,08	0,31	
24	NMR	6,13	0,23	0,90	
28	HPLC	5,83	-0,07	-0,27	
40	HPLC	6,15	0,25	0,98	
56	enzymat. autom.	5,98	0,08	0,31	
58	enzymat. autom.	5,88	-0,02	-0,08	
59	enzymat. autom.	5,80	-0,10	-0,39	
81	enzymat. Hand	5,81	-0,09	-0,35	
85	HPLC	6,23	0,33	1,29	
90	enzymat. autom.	6,40	0,50	1,96	
92	HPLC	5,73	-0,17	-0,67	
107	NMR	6,26	0,36	1,41	
108	NMR	5,57	-0,33	-1,30	
109	NMR	6,16	0,26	1,01	
110	NMR	6,18	0,28	1,09	

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

6.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,97	0,05	0,20	0,14	
202	FTIR	5,47	-0,45	-1,76	-1,29	
203	FTIR	5,50	-0,42	-1,64	-1,21	
204	FTIR	5,96	0,04	0,16	0,11	
206	FTIR	5,83	-0,09	-0,35	-0,26	
207	FTIR	5,85	-0,07	-0,27	-0,20	
208	FTIR	5,92	0,00	0,00	0,00	
209	FTIR	5,70	-0,22	-0,86	-0,63	
210	FTIR	6,45	0,53	2,07	1,52	
212	FTIR	6,21	0,29	1,13	0,83	
213	FTIR	6,26	0,34	1,33	0,98	
214	FTIR	5,73	-0,19	-0,74	-0,55	
216	FTIR	5,50	-0,42	-1,64	-1,21	
217	FTIR	6,12	0,20	0,78	0,57	
218	FTIR	6,36	0,44	1,72	1,26	
219	FTIR	4,68	-1,24	-4,84	-3,56	
220	FTIR	5,54	-0,38	-1,48	-1,09	
221	FTIR	6,30	0,38	1,48	1,09	
222	FTIR	6,15	0,23	0,90	0,66	
223	FTIR	6,14	0,22	0,86	0,63	
224	FTIR	6,13	0,21	0,82	0,60	
225	FTIR	4,90	-1,02	-3,98	-2,93	
226	FTIR	5,66	-0,26	-1,01	-0,75	
227	FTIR	5,70	-0,22	-0,86	-0,63	
228	FTIR	6,10	0,18	0,70	0,52	
229	FTIR	5,70	-0,22	-0,86	-0,63	
230	FTIR	5,50	-0,42	-1,64	-1,21	
231	FTIR	5,51	-0,41	-1,60	-1,18	
233	FTIR	5,52	-0,40	-1,56	-1,15	
235	FTIR	6,10	0,18	0,70	0,52	
236	FTIR	5,40	-0,52	-2,03	-1,49	
237	FTIR	5,30	-0,62	-2,42	-1,78	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

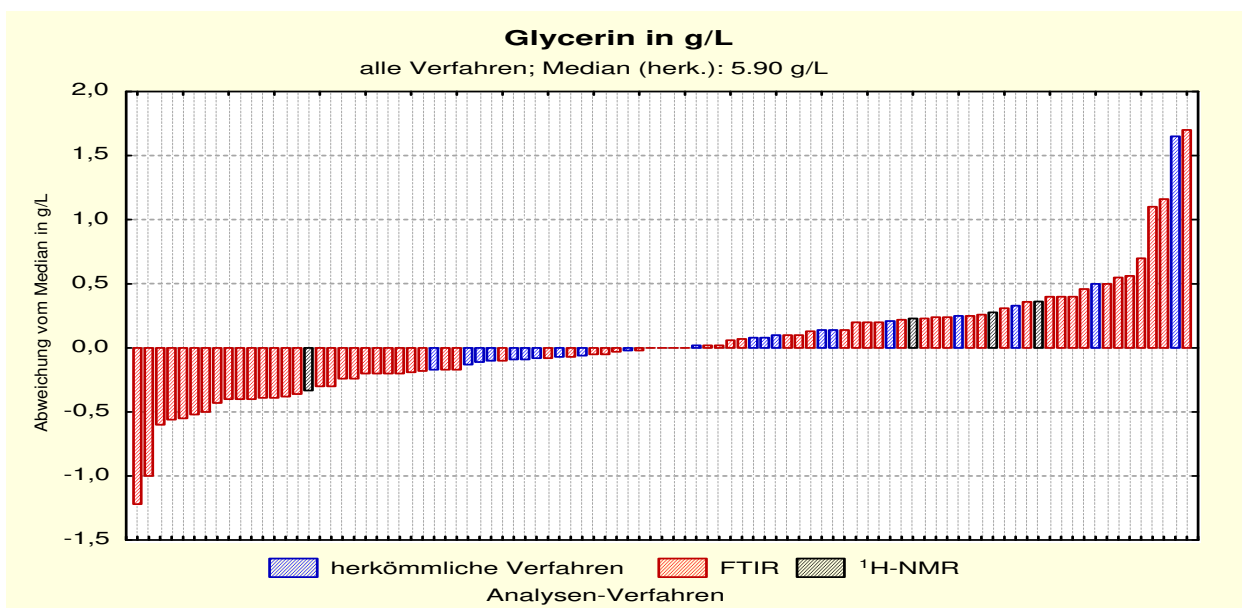
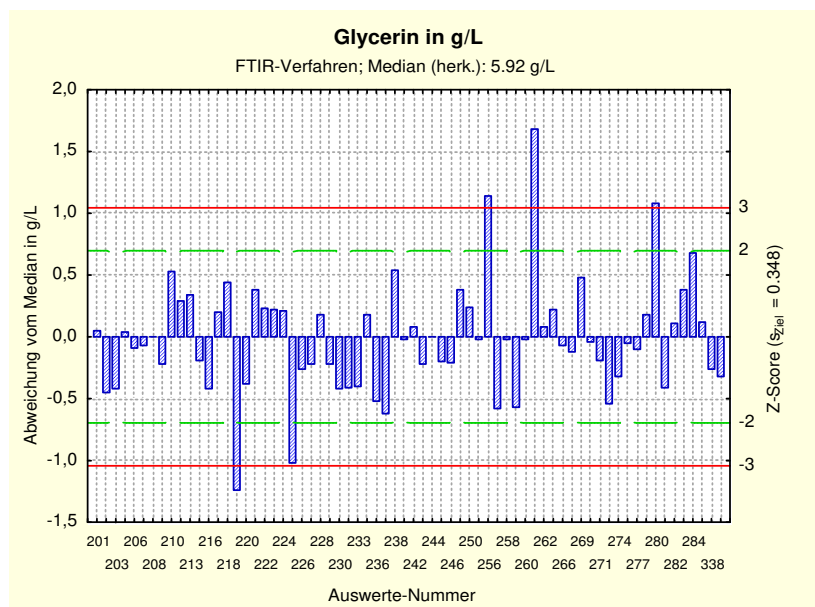
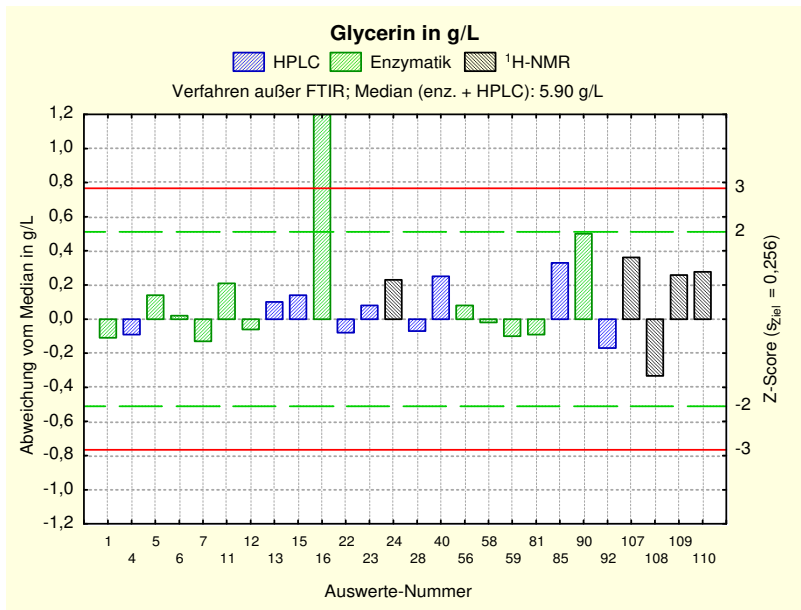
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
238	FTIR	6,46	0,54	2,11	1,55	
241	FTIR	5,90	-0,02	-0,08	-0,06	
242	FTIR	6,00	0,08	0,31	0,23	
243	FTIR	5,70	-0,22	-0,86	-0,63	
244	FTIR	5,92	0,00	0,00	0,00	
245	FTIR	5,72	-0,20	-0,78	-0,57	
246	FTIR	5,71	-0,21	-0,82	-0,60	
249	FTIR	6,30	0,38	1,48	1,09	
250	FTIR	6,16	0,24	0,94	0,69	
254	FTIR	5,90	-0,02	-0,08	-0,06	
256	FTIR	7,06	1,14	4,45	3,28	
257	FTIR	5,34	-0,58	-2,26	-1,67	
258	FTIR	5,90	-0,02	-0,08	-0,06	
259	FTIR	5,35	-0,57	-2,22	-1,64	
260	FTIR	5,90	-0,02	-0,08	-0,06	
261	FTIR	7,60	1,68	6,56	4,83	
262	FTIR	6,00	0,08	0,31	0,23	
265	FTIR	6,14	0,22	0,86	0,63	
266	FTIR	5,85	-0,07	-0,27	-0,20	
267	FTIR	5,80	-0,12	-0,47	-0,34	
269	FTIR	6,40	0,48	1,87	1,38	
270	FTIR	5,88	-0,04	-0,16	-0,11	
271	FTIR	5,73	-0,19	-0,74	-0,55	
273	FTIR	5,38	-0,54	-2,11	-1,55	
274	FTIR	5,60	-0,32	-1,25	-0,92	
276	FTIR	5,87	-0,05	-0,20	-0,14	
277	FTIR	5,82	-0,10	-0,39	-0,29	
278	FTIR	6,10	0,18	0,70	0,52	
280	FTIR	7,00	1,08	4,21	3,10	
281	FTIR	5,51	-0,41	-1,60	-1,18	
282	FTIR	6,03	0,11	0,43	0,32	
283	FTIR	6,30	0,38	1,48	1,09	
284	FTIR	6,60	0,68	2,65	1,95	
322	FTIR	6,04	0,12	0,47	0,34	
338	FTIR	5,66	-0,26	-1,01	-0,75	
349	FTIR	5,60	-0,32	-1,25	-0,92	

6.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	21	20
Minimalwert	5,7	5,7
Mittelwert	6,02	5,95
Median	5,92	5,90
Maximalwert	7,5	6,4
Standardabweichung (s_L)	0,389	0,175
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,085	0,039
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,256	0,256
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,348	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,52	0,69
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,12	0,50
Quotient (u_M/s_H)	0,33	0,15
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,24	0,11

6.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	9	5,954	0,192
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	6,075	0,276
enzymat. Hand	enzymatisch manuell	4	5,803	0,034
	alle herkömmlichen Verfahren	21	5,952	0,186
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	68	5,882	0,380
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	6,117	0,167



6.12 pH-Wert

6.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,26	0,000	0,00	
04	potentiometr.	3,22	-0,040	-0,84	
05	potentiometr.	3,31	0,050	1,05	
06	potentiometr.	3,28	0,020	0,42	
07	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
11	potentiometr.	3,30	0,040	0,84	
12	potentiometr.	3,31	0,050	1,05	
13	potentiometr.	3,23	-0,030	-0,63	
14	potentiometr.	3,20	-0,060	-1,26	
15	potentiometr.	3,24	-0,020	-0,42	
16	potentiometr.	3,29	0,030	0,63	
17	potentiometr.	3,20	-0,060	-1,26	
20	potentiometr.	3,22	-0,044	-0,92	
22	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
23	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
24	potentiometr.	3,29	0,030	0,63	
26	potentiometr.	3,18	-0,080	-1,68	
27	potentiometr.	3,15	-0,108	-2,27	
28	potentiometr.	3,32	0,060	1,26	
29	potentiometr.	3,29	0,030	0,63	
30	potentiometr.	3,30	0,040	0,84	
31	potentiometr.	3,28	0,020	0,42	
32	potentiometr.	3,26	0,000	0,00	
33	potentiometr.	3,20	-0,060	-1,26	
34	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
38	potentiometr.	3,23	-0,030	-0,63	
39	potentiometr.	3,23	-0,030	-0,63	
40	potentiometr.	3,21	-0,050	-1,05	
41	potentiometr.	3,25	-0,015	-0,32	
42	potentiometr.	3,32	0,060	1,26	
43	potentiometr.	3,32	0,060	1,26	
44	potentiometr.	3,32	0,060	1,26	
45	potentiometr.	3,26	0,000	0,00	
46	potentiometr.	3,24	-0,020	-0,42	
47	k. A.	3,25	-0,010	-0,21	
50	potentiometr.	3,30	0,038	0,80	
53	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
55	potentiometr.	3,15	-0,110	-2,31	
56	potentiometr.	3,31	0,050	1,05	
57	potentiometr.	3,32	0,060	1,26	
58	potentiometr.	3,29	0,030	0,63	
59	potentiometr.	3,25	-0,010	-0,21	
60	potentiometr.	3,31	0,050	1,05	
63	potentiometr.	3,24	-0,020	-0,42	
68	potentiometr.	3,28	0,020	0,42	
75	potentiometr.	3,26	0,000	0,00	
81	potentiometr.	3,36	0,100	2,10	
84	potentiometr.	3,29	0,030	0,63	
92	potentiometr.	3,20	-0,060	-1,26	

6.12.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	48	3,262	0,0477
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	3,266	0,0673
k.A.	keine Verfahrensangabe	1	3,250	
	alle Verfahren	127	3,264	0,0581

6.12.3 FTIR-Laborergebnisse

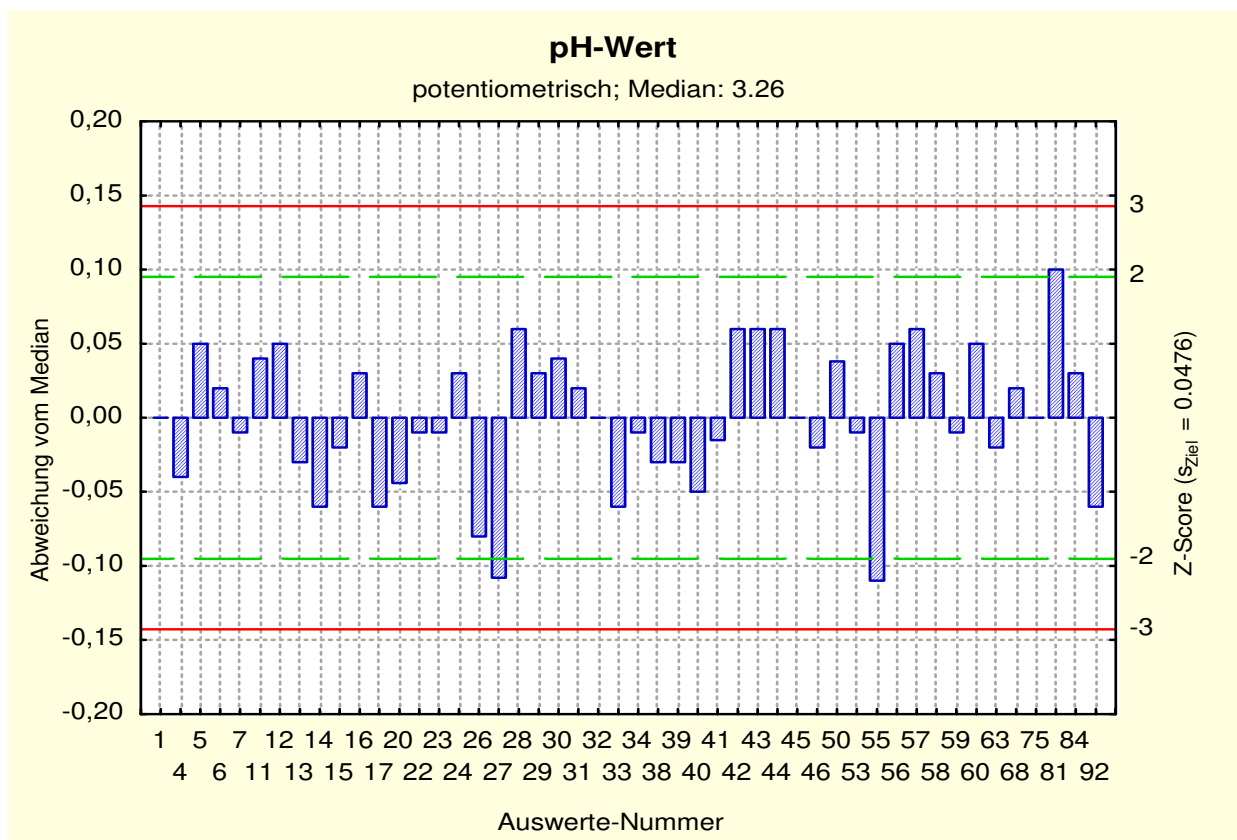
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,24	-0,020	-0,41	
202	FTIR	3,34	0,080	1,62	
203	FTIR	3,26	0,000	0,00	
204	FTIR	3,22	-0,040	-0,81	
205	FTIR	3,27	0,010	0,20	
206	FTIR	3,35	0,090	1,83	
207	FTIR	3,28	0,020	0,41	
208	FTIR	3,27	0,010	0,20	
209	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
210	FTIR	3,32	0,060	1,22	
211	FTIR	3,29	0,030	0,61	
212	FTIR	3,16	-0,100	-2,03	
213	FTIR	3,29	0,030	0,61	
214	FTIR	3,21	-0,050	-1,01	
216	FTIR	3,29	0,030	0,61	
217	FTIR	3,24	-0,020	-0,41	
218	FTIR	3,42	0,160	3,25	
219	FTIR	3,20	-0,060	-1,22	
220	FTIR	3,27	0,010	0,20	
221	FTIR	3,40	0,140	2,84	
222	FTIR	3,26	0,000	0,00	
223	FTIR	3,22	-0,040	-0,81	
224	FTIR	3,30	0,040	0,81	
225	FTIR	3,21	-0,050	-1,01	
226	FTIR	3,24	-0,020	-0,41	
227	FTIR	3,20	-0,060	-1,22	
228	FTIR	3,41	0,150	3,04	
229	FTIR	3,33	0,070	1,42	
230	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
231	FTIR	3,20	-0,060	-1,22	
233	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
235	FTIR	3,33	0,070	1,42	
236	FTIR	3,22	-0,040	-0,81	
237	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
238	FTIR	3,38	0,120	2,43	
241	FTIR	3,33	0,070	1,42	
242	FTIR	3,36	0,100	2,03	
243	FTIR	3,19	-0,070	-1,42	
244	FTIR	3,29	0,030	0,61	
245	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
246	FTIR	3,29	0,030	0,61	
247	FTIR	3,24	-0,020	-0,41	
249	FTIR	3,32	0,060	1,22	
250	FTIR	3,26	0,000	0,00	
251	FTIR	3,34	0,080	1,62	
254	FTIR	3,32	0,060	1,22	
255	FTIR	3,24	-0,020	-0,41	
256	FTIR	3,39	0,130	2,64	
257	FTIR	3,13	-0,130	-2,64	
258	FTIR	3,21	-0,050	-1,01	
259	FTIR	3,26	0,000	0,00	
260	FTIR	3,37	0,110	2,23	
261	FTIR	3,20	-0,060	-1,22	
262	FTIR	3,33	0,070	1,42	
263	FTIR	3,26	0,000	0,00	
264	FTIR	3,29	0,030	0,61	
265	FTIR	3,13	-0,130	-2,64	
266	FTIR	3,28	0,020	0,41	
267	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
268	FTIR	3,33	0,070	1,42	
269	FTIR	3,30	0,040	0,81	
270	FTIR	3,06	-0,200	-4,06	
271	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
273	FTIR	3,23	-0,030	-0,61	
274	FTIR	3,45	0,190	3,85	
275	FTIR	3,35	0,090	1,83	

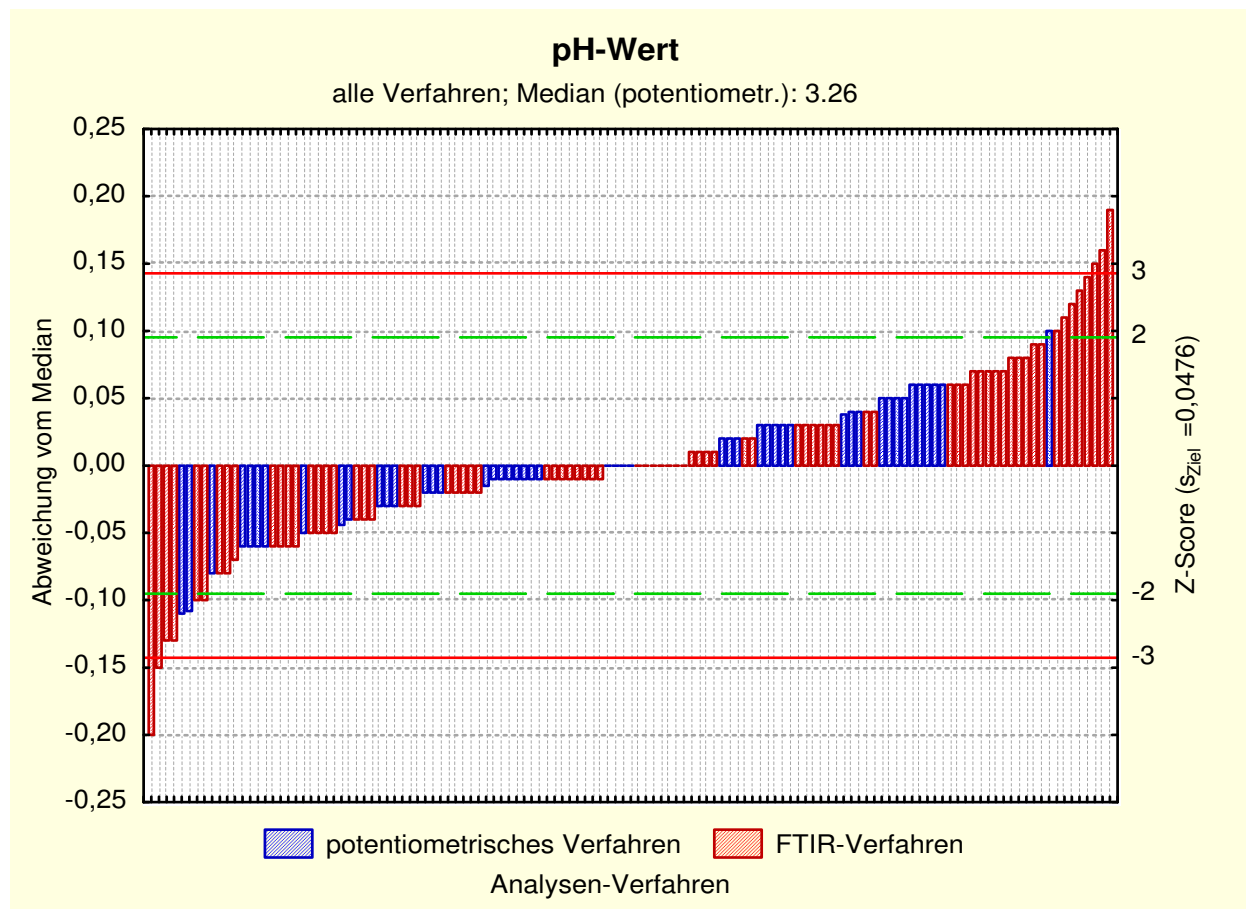
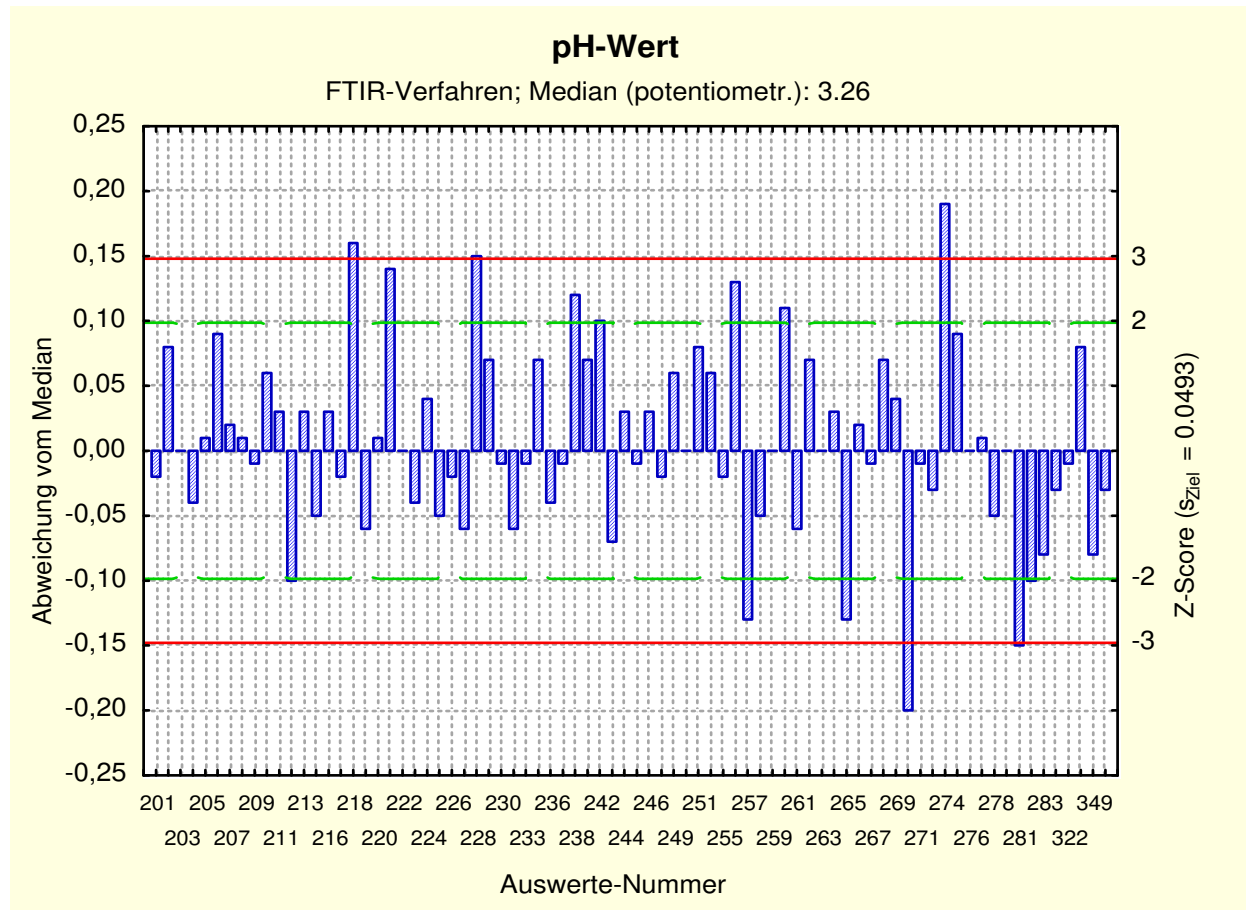
Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	3,26	0,000	0,00	
277	FTIR	3,27	0,010	0,20	
278	FTIR	3,21	-0,050	-1,01	
280	FTIR	3,26	0,000	0,00	
281	FTIR	3,11	-0,150	-3,04	
282	FTIR	3,16	-0,100	-2,03	
283	FTIR	3,18	-0,080	-1,62	
284	FTIR	3,23	-0,030	-0,61	
322	FTIR	3,25	-0,010	-0,20	
338	FTIR	3,34	0,080	1,62	
349	FTIR	3,18	-0,080	-1,62	
363	FTIR	3,23	-0,030	-0,61	

6.12.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	48
Minimalwert	3,15
Mittelwert	3,261
Median	3,260
Maximalwert	3,36
Standardabweichung (s _L)	0,0470
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0068
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,0493
Horvat-Wert (s _L /s _H)	
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	0,99
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,95
Quotient (u _M /s _H)	
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,14
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,14





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	6,99	-0,110	-0,37	-1,03	
05	LwK 5.2.1	6,91	-0,190	-0,64	-1,77	
06	LwK 5.1	7,01	-0,090	-0,30	-0,84	
07	LwK 5.2.1	7,05	-0,050	-0,17	-0,47	
11	LwK 5.2.1	7,16	0,060	0,20	0,56	
12	LwK 5.1	6,95	-0,150	-0,50	-1,40	
13	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
14	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
15	LwK 5.2.1	7,18	0,080	0,27	0,75	
16	LwK 5.1	7,24	0,140	0,47	1,31	
17	LwK 5.2.1	6,99	-0,110	-0,37	-1,03	
20	LwK 5.2.1	7,24	0,140	0,47	1,31	
21	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
22	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
23	LwK 5.1	6,92	-0,180	-0,60	-1,68	
24	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
25	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
26	LwK 5.1	7,25	0,150	0,50	1,40	
27	LwK 5.2.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
28	LwK 5.1	7,16	0,055	0,18	0,51	
29	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
30	LwK 5.1	7,06	-0,040	-0,13	-0,37	
31	LwK 5.2.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
32	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
33	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
34	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
35	LwK 5.2.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
36	k. A.	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
38	LwK 5.1	7,14	0,040	0,13	0,37	
39	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
40	LwK 5.2.1	7,14	0,040	0,13	0,37	
41	LwK 5.1	7,07	-0,030	-0,10	-0,28	
42	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
43	LwK 5.1	6,99	-0,110	-0,37	-1,03	
44	LwK 5.1	7,40	0,300	1,00	2,80	
45	LwK 5.1	7,25	0,150	0,50	1,40	
46	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
47	LwK 5.1	7,13	0,030	0,10	0,28	
48	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
49	LwK 5.1	7,14	0,040	0,13	0,37	
50	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
51	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
53	LwK 5.2.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
55	LwK 5.2.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
56	LwK 5.2.1	7,11	0,010	0,03	0,09	
57	LwK 5.1	7,16	0,060	0,20	0,56	
58	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
59	LwK 5.1	7,03	-0,070	-0,23	-0,65	
60	LwK 5.2.1	6,95	-0,150	-0,50	-1,40	
61	k. A.	7,60	0,500	1,67	4,67	
63	LwK 5.1	7,32	0,220	0,74	2,05	
68	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
74	phot.aut.	7,20	0,100	0,33	0,93	
75	LwK 5.2.2	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
81	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
84	LwK 5.2.2	7,10	0,000	0,00	0,00	
87	LwK 5.2.1	7,25	0,150	0,50	1,40	
92	LwK 5.1	7,15	0,050	0,17	0,47	
111	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
112	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
113	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
114	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
115	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,93	

Fortsetzung: Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
116	LwK 5.1	7,80	0,700	2,34	6,53	(**)
117	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
118	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
119	LwK 5.2.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
120	LwK 5.1	6,90	-0,200	-0,67	-1,87	
121	LwK 5.1	6,80	-0,300	-1,00	-2,80	
122	LwK 5.2.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
123	LwK 5.1	6,95	-0,150	-0,50	-1,40	
124	LwK 5.1	7,23	0,130	0,43	1,21	
125	LwK 5.1	6,60	-0,500	-1,67	-4,67	
126	LwK 5.1	7,25	0,150	0,50	1,40	
127	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
128	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
129	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
130	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
131	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
132	LwK 5.1	7,04	-0,060	-0,20	-0,56	
133	LwK 5.2.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
134	LwK 5.1	7,15	0,050	0,17	0,47	
135	LwK 5.1	6,97	-0,130	-0,43	-1,21	
136	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
137	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
138	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
139	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
140	LwK 5.2.1	7,13	0,030	0,10	0,28	
141	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
142	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
143	LwK 5.1	7,08	-0,020	-0,07	-0,19	
144	LwK 5.3	7,25	0,150	0,50	1,40	
145	LwK 5.1	7,10	0,000	0,00	0,00	
146	LwK 5.2.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
147	LwK 5.1	7,30	0,200	0,67	1,87	
148	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
149	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	
150	LwK 5.1	7,07	-0,030	-0,10	-0,28	
151	LwK 5.1	7,20	0,100	0,33	0,93	
152	LwK 5.1	7,18	0,080	0,27	0,75	
153	LwK 5.1	7,00	-0,100	-0,33	-0,93	

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

6.13.1 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	7,09	-0,010	-0,03	-0,07	
202	LwK 5.3	7,04	-0,060	-0,20	-0,41	
203	LwK 5.3	7,16	0,060	0,20	0,41	
204	LwK 5.3	7,39	0,290	0,97	2,00	
205	LwK 5.3	7,05	-0,050	-0,17	-0,34	
206	LwK 5.3	6,93	-0,170	-0,57	-1,17	
207	LwK 5.3	7,22	0,120	0,40	0,83	
208	LwK 5.3	6,86	-0,240	-0,80	-1,66	
209	LwK 5.3	7,10	0,000	0,00	0,00	
210	LwK 5.3	7,12	0,020	0,07	0,14	
211	LwK 5.3	7,15	0,050	0,17	0,34	
212	LwK 5.3	6,79	-0,310	-1,04	-2,14	
213	LwK 5.3	7,11	0,010	0,03	0,07	
214	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
216	LwK 5.3	7,40	0,300	1,00	2,07	
217	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
218	LwK 5.3	7,07	-0,030	-0,10	-0,21	
219	LwK 5.3	7,34	0,240	0,80	1,66	
220	LwK 5.3	7,16	0,060	0,20	0,41	
221	LwK 5.3	7,30	0,200	0,67	1,38	
222	LwK 5.3	6,98	-0,120	-0,40	-0,83	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	LwK 5.3	7,05	-0,050	-0,17	-0,34	
224	LwK 5.3	7,31	0,210	0,70	1,45	
225	LwK 5.3	7,00	-0,100	-0,33	-0,69	
226	LwK 5.3	7,33	0,230	0,77	1,59	
227	LwK 5.3	7,02	-0,080	-0,27	-0,55	
228	LwK 5.3	7,05	-0,050	-0,17	-0,34	
229	LwK 5.3	7,19	0,090	0,30	0,62	
230	LwK 5.3	7,12	0,020	0,07	0,14	
231	LwK 5.3	7,34	0,240	0,80	1,66	
233	LwK 5.3	7,16	0,060	0,20	0,41	
235	LwK 5.3	7,07	-0,030	-0,10	-0,21	
236	LwK 5.3	6,90	-0,200	-0,67	-1,38	
237	LwK 5.3	7,10	0,000	0,00	0,00	
238	LwK 5.3	7,22	0,120	0,40	0,83	
241	LwK 5.3	7,27	0,170	0,57	1,17	
242	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
243	LwK 5.3	7,02	-0,080	-0,27	-0,55	
244	LwK 5.3	7,00	-0,100	-0,33	-0,69	
245	LwK 5.3	7,28	0,180	0,60	1,24	
246	LwK 5.3	7,17	0,070	0,23	0,48	
247	LwK 5.3	7,16	0,060	0,20	0,41	
248	LwK 5.3	7,53	0,430	1,44	2,97	
249	LwK 5.3	6,70	-0,400	-1,34	-2,76	
250	LwK 5.3	7,01	-0,090	-0,30	-0,62	
251	LwK 5.3	7,26	0,160	0,54	1,10	
254	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
255	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
256	LwK 5.3	7,09	-0,010	-0,03	-0,07	
257	LwK 5.3	7,22	0,120	0,40	0,83	
258	LwK 5.3	4,70	-2,400	-8,03	-16,55	(**)
259	LwK 5.3	6,99	-0,110	-0,37	-0,76	
260	LwK 5.3	6,80	-0,300	-1,00	-2,07	
261	LwK 5.3	7,10	0,000	0,00	0,00	
262	LwK 5.3	7,40	0,300	1,00	2,07	
263	LwK 5.3	7,30	0,200	0,67	1,38	
264	LwK 5.3	7,11	0,010	0,03	0,07	
265	LwK 5.3	7,04	-0,060	-0,20	-0,41	
266	LwK 5.3	7,11	0,010	0,03	0,07	
267	LwK 5.3	6,68	-0,420	-1,40	-2,90	
268	LwK 5.3	7,21	0,110	0,37	0,76	
269	LwK 5.3	6,80	-0,300	-1,00	-2,07	
270	LwK 5.3	7,22	0,120	0,40	0,83	
271	LwK 5.3	6,94	-0,160	-0,54	-1,10	
273	LwK 5.3	7,19	0,090	0,30	0,62	
274	LwK 5.3	6,90	-0,200	-0,67	-1,38	
275	LwK 5.3	7,02	-0,080	-0,27	-0,55	
276	LwK 5.3	7,06	-0,040	-0,13	-0,28	
277	LwK 5.3	7,06	-0,040	-0,13	-0,28	
278	LwK 5.3	6,60	-0,500	-1,67	-3,45	
280	LwK 5.3	7,40	0,300	1,00	2,07	
281	LwK 5.3	6,86	-0,240	-0,80	-1,66	
282	LwK 5.3	6,95	-0,150	-0,50	-1,03	
283	LwK 5.3	6,72	-0,380	-1,27	-2,62	
284	LwK 5.3	7,30	0,200	0,67	1,38	
313	LwK 5.3	6,93	-0,170	-0,57	-1,17	
322	LwK 5.3	6,97	-0,130	-0,43	-0,90	
338	LwK 5.3	7,26	0,160	0,54	1,10	
349	LwK 5.3	7,20	0,100	0,33	0,69	
363	LwK 5.3	7,30	0,200	0,67	1,38	

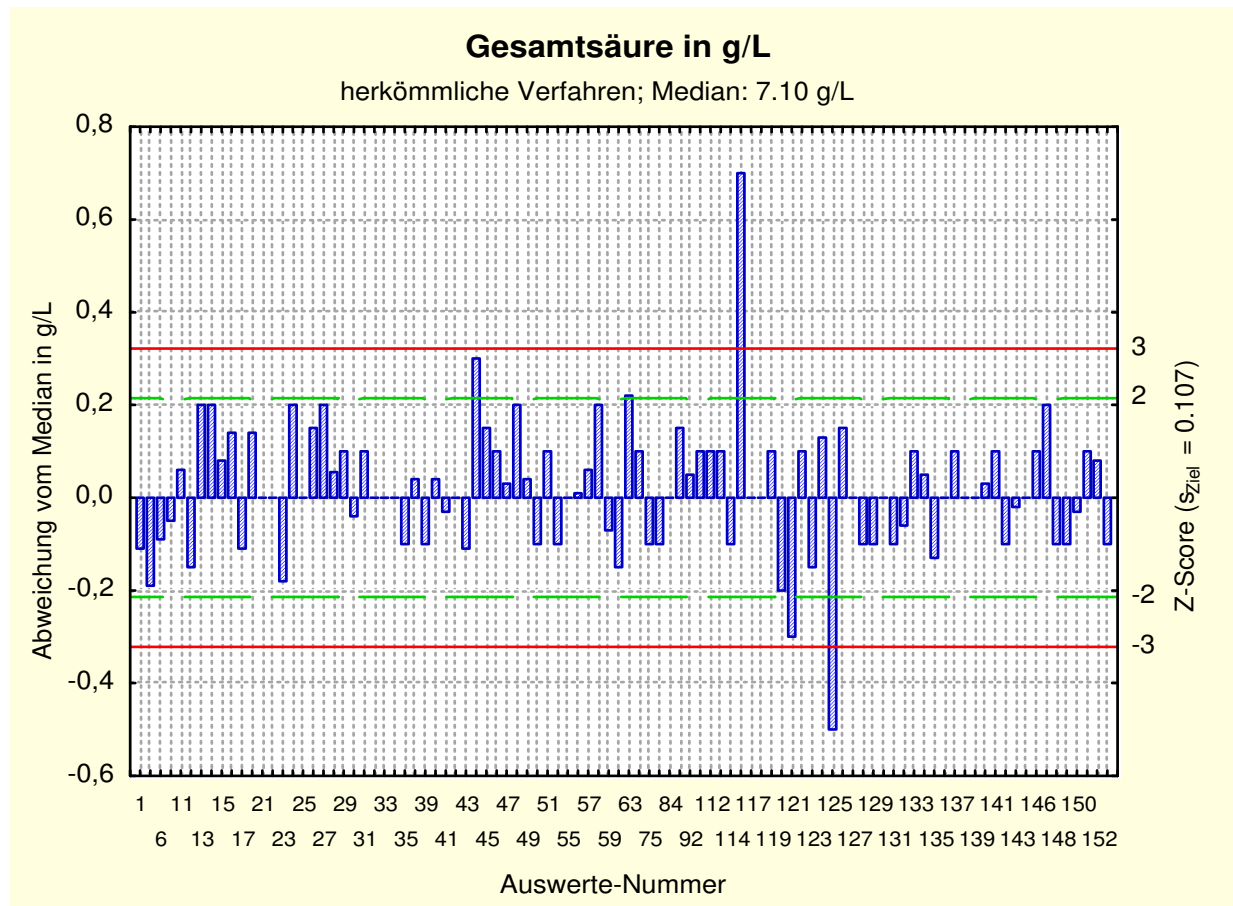
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

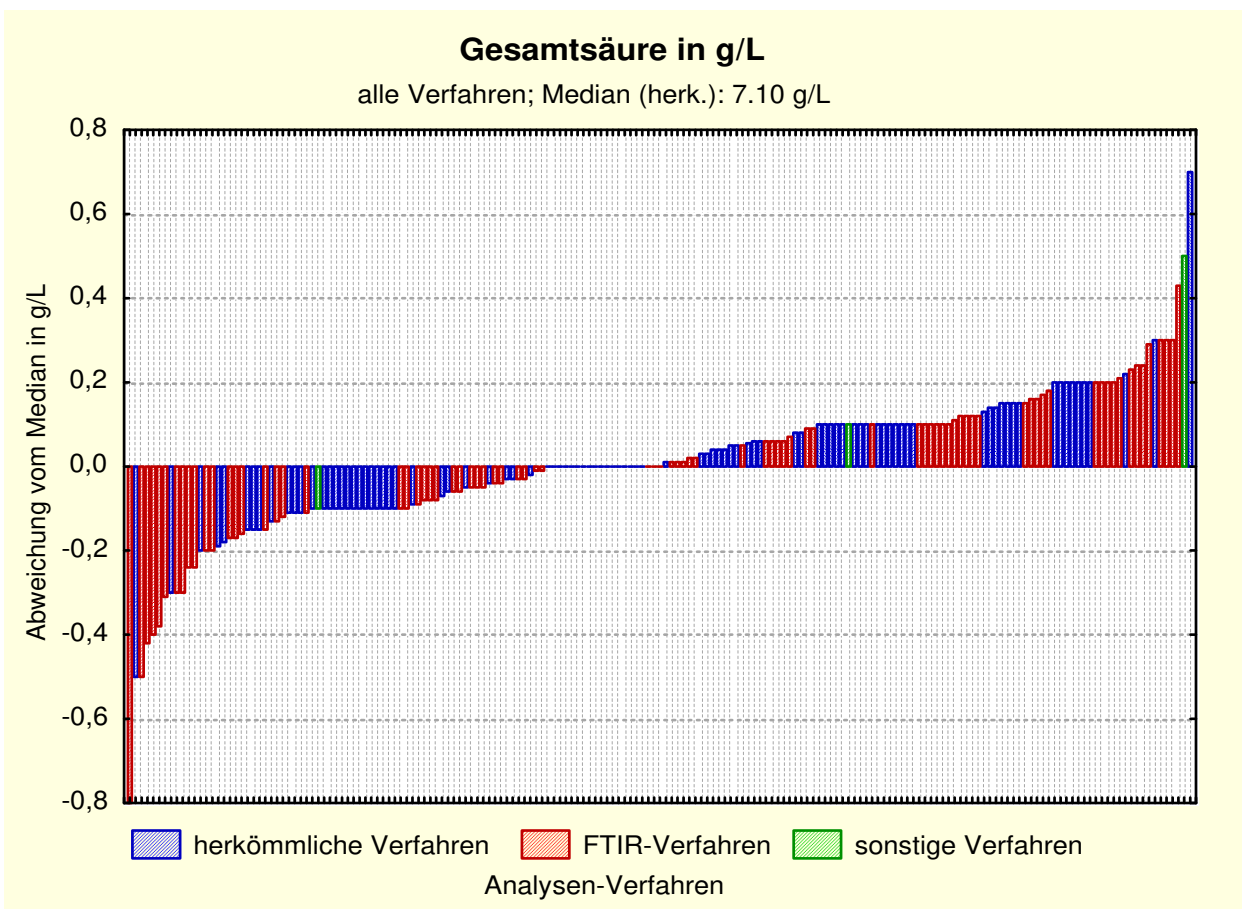
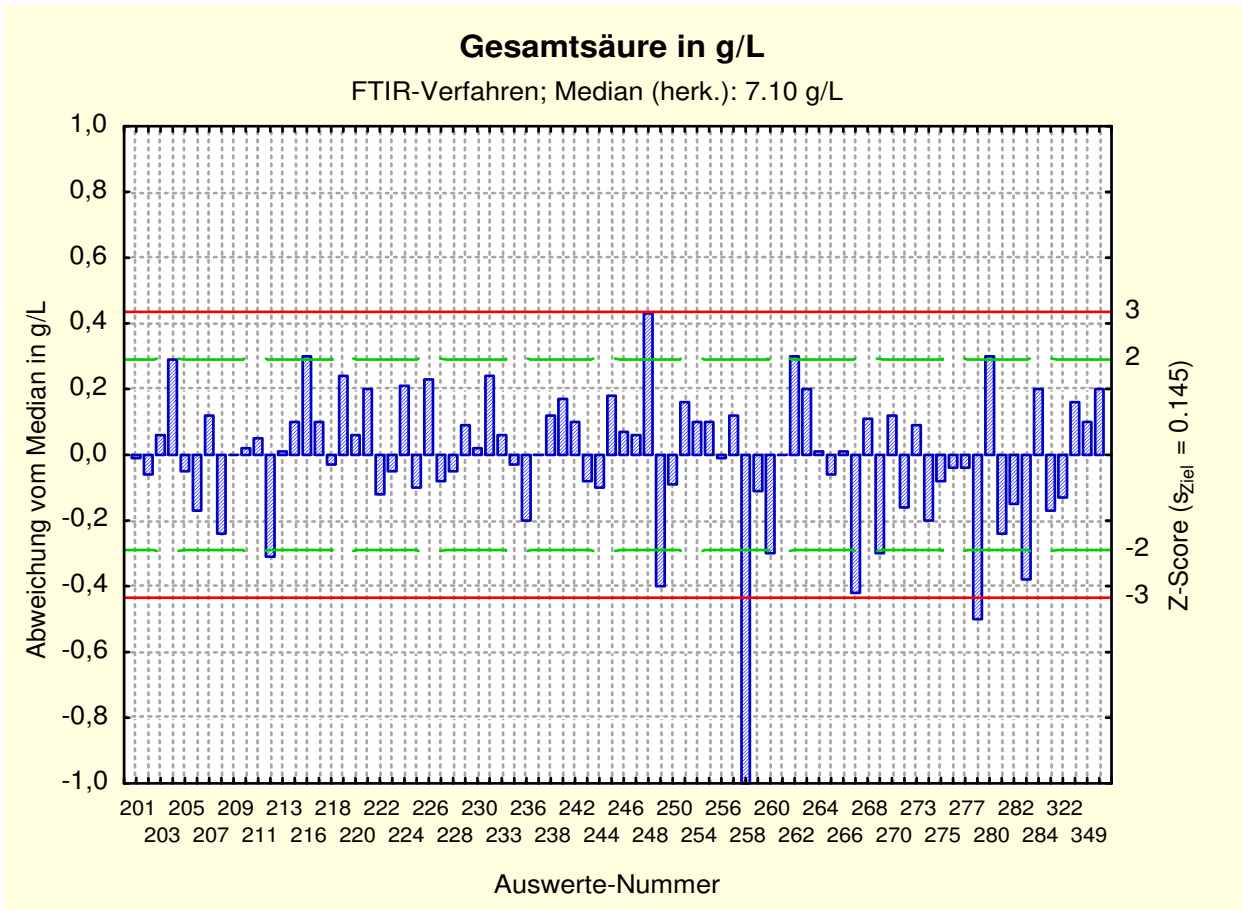
6.13.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	96	95
Minimalwert	6,60	6,60
Mittelwert	7,118	7,110
Median	7,100	7,100
Maximalwert	7,80	7,40
Standardabweichung (s_L)	0,143	0,125
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,015	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,299	0,299
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,48	0,42
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,33	1,17
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,99	0,85
Quotient (u_M/s_H)	0,05	0,04
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,14	0,12
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,10	0,09

6.13.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	73	7,118	0,127
LwK 5.2.1	Potentiometrische Bestimmung; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	21	7,123	0,118
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	2	7,050	0,080
	alle herkömmlichen Verfahren	96	7,117	0,124
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	7,112	0,177
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	7,200	
k.A.	keine Verfahrensangabe	2	7,300	0,481





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,02	-0,150	-1,37	
03	HPLC	2,05	-0,121	-1,11	
05	photometr.	2,01	-0,160	-1,46	
06	HPLC	1,96	-0,210	-1,92	
07	HPLC	1,99	-0,180	-1,65	
08	IC	2,18	0,012	0,11	
11	photometr., autom.	1,91	-0,260	-2,38	
12	photometr.	2,33	0,160	1,46	
14	photometr., autom.	2,02	-0,150	-1,37	
17	photometr., autom.	2,26	0,090	0,82	
20	photometr., autom.	2,19	0,020	0,18	
23	HPLC	1,97	-0,200	-1,83	
24	NMR	2,30	0,130	1,19	
26	HPLC	2,23	0,060	0,55	
27	photometr., autom.	2,06	-0,107	-0,98	
28	HPLC	2,16	-0,010	-0,09	
31	photometr., autom.	1,92	-0,250	-2,29	
32	photometr.	2,40	0,230	2,11	
39	photometr., autom.	2,37	0,200	1,83	
40	HPLC	2,07	-0,100	-0,92	
41	photometr., autom.	2,30	0,130	1,19	
42	photometr., autom.	2,03	-0,140	-1,28	
43	photometr., autom.	2,09	-0,080	-0,73	
45	photometr., autom.	2,28	0,110	1,01	
46	photometr., autom.	2,30	0,130	1,19	
47	photometr., autom.	2,29	0,120	1,10	
48	photometr., autom.	2,17	0,000	0,00	
50	photometr., autom.	2,34	0,170	1,56	
53	photometr., autom.	2,30	0,130	1,19	
56	photometr., autom.	2,31	0,140	1,28	
57	photometr., autom.	2,29	0,120	1,10	
58	photometr., autom.	2,01	-0,160	-1,46	
59	HPLC	2,03	-0,140	-1,28	
61	photometr., autom.	2,21	0,040	0,37	
68	photometr., autom.	2,29	0,120	1,10	
81	photometr.	2,42	0,250	2,29	
87	HPLC	2,08	-0,090	-0,82	
91	HPLC	2,12	-0,050	-0,46	
107	NMR	1,96	-0,206	-1,89	
108	NMR	2,07	-0,097	-0,89	
109	NMR	1,59	-0,578	-5,29	
110	NMR	2,18	0,007	0,07	

6.14.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,95	-0,220	-2,01	-0,97	
202	FTIR	1,77	-0,400	-3,66	-1,76	
203	FTIR	1,97	-0,200	-1,83	-0,88	
204	FTIR	1,77	-0,400	-3,66	-1,76	
205	FTIR	2,00	-0,170	-1,56	-0,75	
206	FTIR	2,08	-0,090	-0,82	-0,40	
208	FTIR	1,92	-0,250	-2,29	-1,10	
209	FTIR	2,10	-0,070	-0,64	-0,31	
210	FTIR	2,05	-0,120	-1,10	-0,53	
211	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
212	FTIR	1,86	-0,310	-2,84	-1,37	
213	FTIR	2,02	-0,150	-1,37	-0,66	
214	FTIR	2,09	-0,080	-0,73	-0,35	
216	FTIR	1,50	-0,670	-6,13	-2,95	
217	FTIR	1,94	-0,230	-2,11	-1,01	
218	FTIR	2,02	-0,150	-1,37	-0,66	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

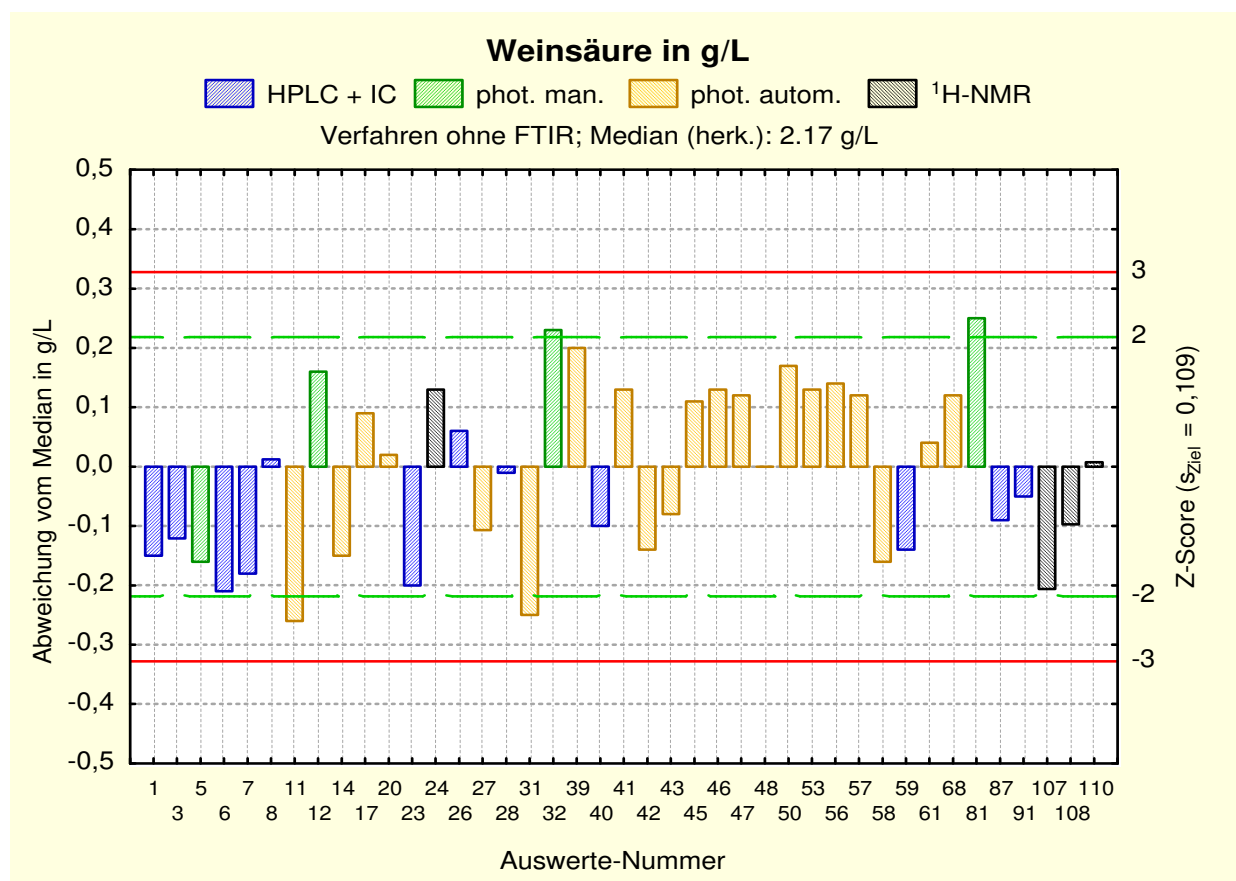
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	2,13	-0,040	-0,37	-0,18	
220	FTIR	2,00	-0,170	-1,56	-0,75	
221	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
222	FTIR	1,91	-0,260	-2,38	-1,15	
223	FTIR	1,65	-0,520	-4,76	-2,29	
224	FTIR	2,12	-0,050	-0,46	-0,22	
225	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
226	FTIR	2,21	0,040	0,37	0,18	
227	FTIR	1,97	-0,200	-1,83	-0,88	
228	FTIR	2,10	-0,070	-0,64	-0,31	
229	FTIR	2,17	0,000	0,00	0,00	
230	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
231	FTIR	2,17	0,000	0,00	0,00	
233	FTIR	1,98	-0,190	-1,74	-0,84	
235	FTIR	2,25	0,080	0,73	0,35	
236	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
237	FTIR	1,80	-0,370	-3,39	-1,63	
238	FTIR	2,15	-0,020	-0,18	-0,09	
241	FTIR	2,00	-0,170	-1,56	-0,75	
242	FTIR	1,70	-0,470	-4,30	-2,07	
243	FTIR	2,55	0,380	3,48	1,67	
244	FTIR	1,23	-0,940	-8,60	-4,14	
245	FTIR	2,15	-0,020	-0,18	-0,09	
246	FTIR	2,19	0,020	0,18	0,09	
247	FTIR	1,76	-0,410	-3,75	-1,81	
249	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
250	FTIR	2,12	-0,050	-0,46	-0,22	
254	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
256	FTIR	1,66	-0,510	-4,67	-2,25	
257	FTIR	2,06	-0,110	-1,01	-0,48	
258	FTIR	2,31	0,140	1,28	0,62	
259	FTIR	2,10	-0,070	-0,64	-0,31	
260	FTIR	2,00	-0,170	-1,56	-0,75	
261	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
263	FTIR	1,40	-0,770	-7,05	-3,39	
264	FTIR	1,96	-0,210	-1,92	-0,93	
265	FTIR	2,00	-0,170	-1,56	-0,75	
266	FTIR	1,76	-0,410	-3,75	-1,81	
267	FTIR	2,17	0,000	0,00	0,00	
268	FTIR	2,32	0,150	1,37	0,66	
269	FTIR	1,90	-0,270	-2,47	-1,19	
270	FTIR	1,99	-0,180	-1,65	-0,79	
271	FTIR	2,07	-0,100	-0,92	-0,44	
273	FTIR	1,92	-0,250	-2,29	-1,10	
274	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
275	FTIR	1,99	-0,180	-1,65	-0,79	
276	FTIR	1,95	-0,220	-2,01	-0,97	
277	FTIR	1,99	-0,180	-1,65	-0,79	
278	FTIR	1,60	-0,570	-5,22	-2,51	
280	FTIR	2,21	0,040	0,37	0,18	
281	FTIR	2,15	-0,020	-0,18	-0,09	
282	FTIR	2,32	0,150	1,37	0,66	
283	FTIR	2,08	-0,090	-0,82	-0,40	
322	FTIR	2,54	0,370	3,39	1,63	
338	FTIR	1,60	-0,570	-5,22	-2,51	
349	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
363	FTIR	1,60	-0,570	-5,22	-2,51	

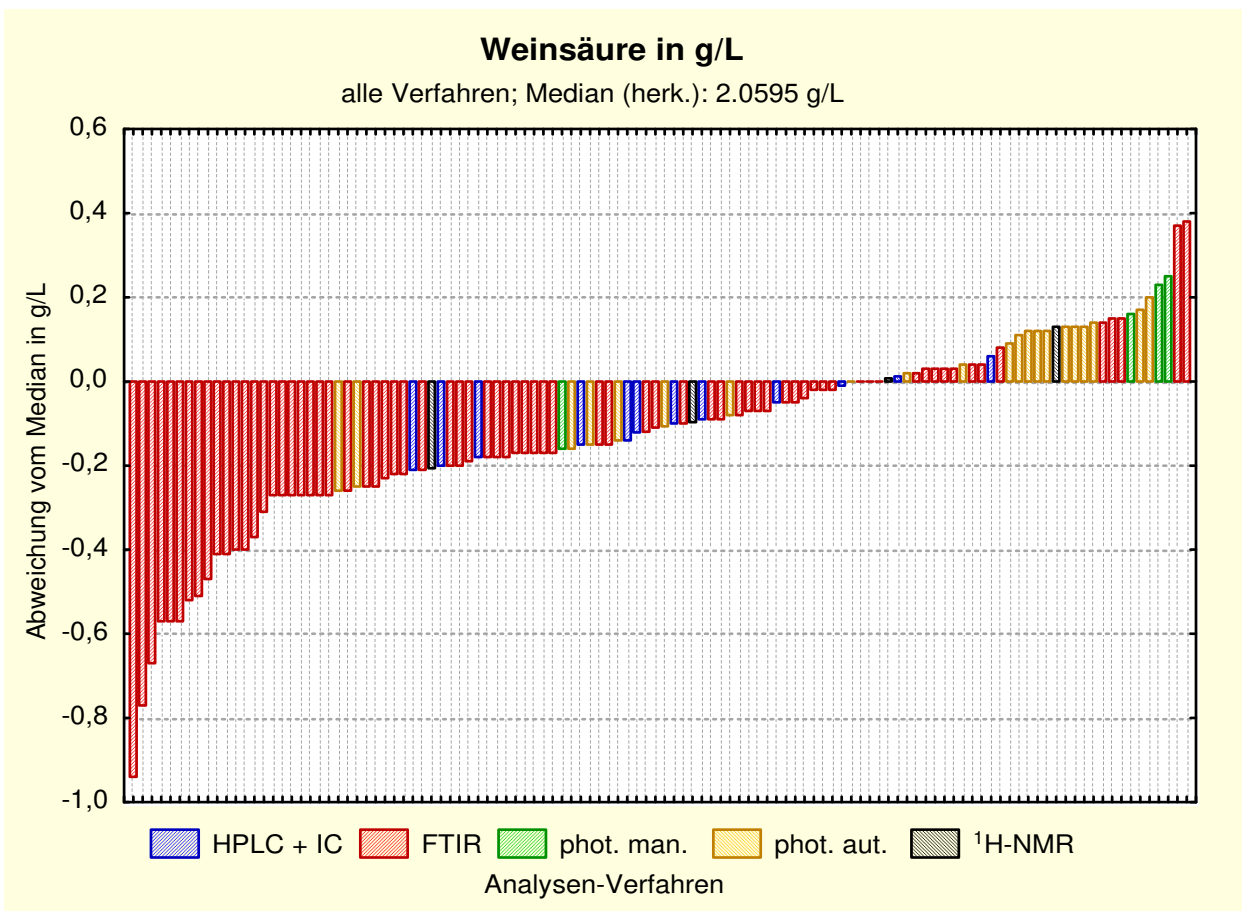
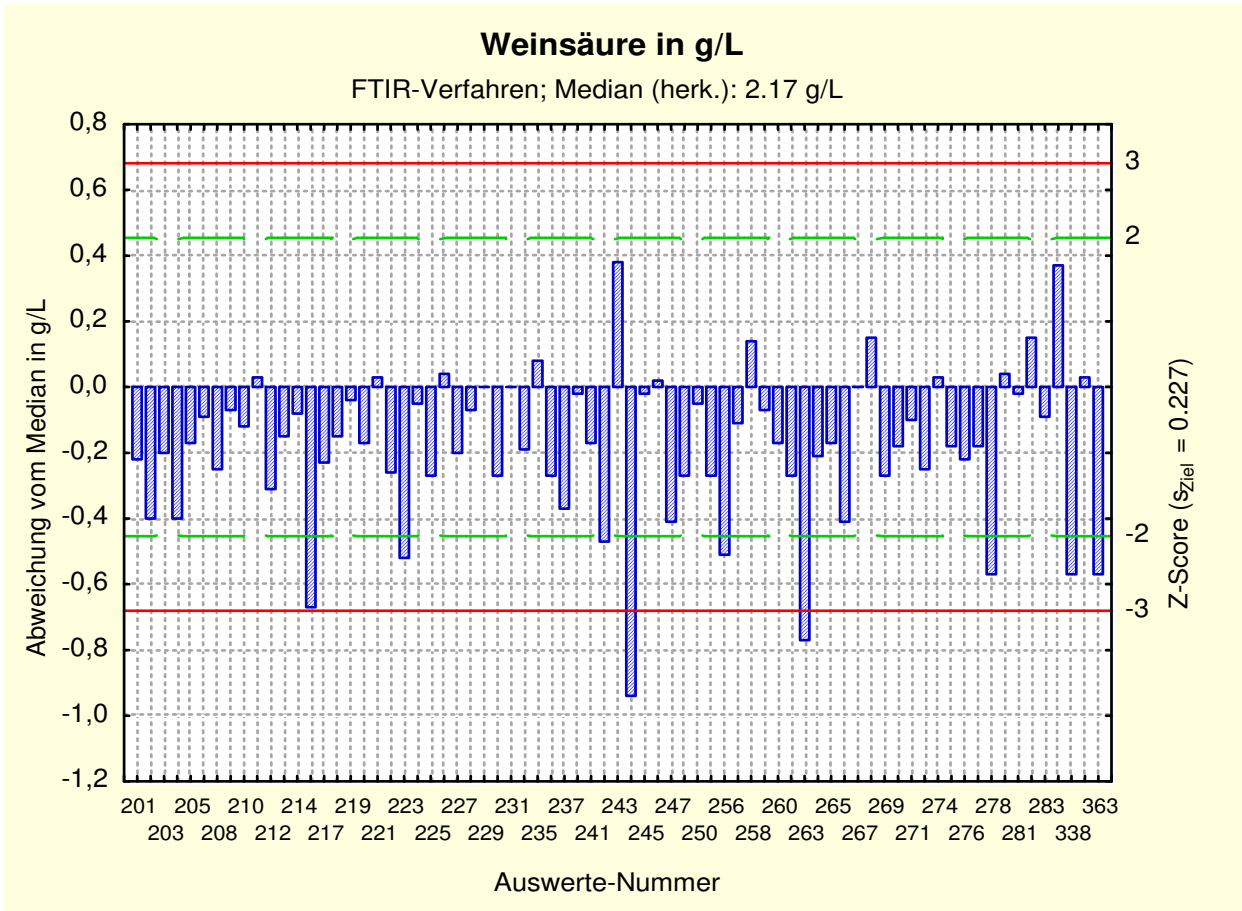
6.14.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC alle Daten	herk. Verf. alle Daten
Gültige Werte	12	37
Minimalwert	1,96	1,91
Mittelwert	2,072	2,161
Median	2,059	2,170
Maximalwert	2,23	2,42
Standardabweichung (s _L)	0,086	0,147
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,025	0,024
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,104	0,109
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)	0,227	0,227
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,83	1,35
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)		
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)	0,38	0,65
Quotient (u _M /s _H)	0,24	0,22
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)		
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)	0,11	0,11

6.14.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	2,057	0,084
IC	Ionenchromatographie (IC)	1	2,182	
	HPLC + IC	12	2,070	0,095
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	2,294	0,207
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	21	2,199	0,144
	alle photometrischen Verfahren	25	2,214	0,155
	alle herkömmlichen Verfahren	37	2,161	0,167
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	2,000	0,201
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,026	0,296





6.15 Flüchtige Säure [g/L]**6.15.1 Herkömmliche Laborergebnisse**Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO ₂ unber.	0,670	0,0141	0,36	
05	OIV SO ₂ -korr.	0,700	0,0441	1,12	
06	Gerhardt SO ₂ korr.	0,619	-0,0369	-0,93	
11	OIV SO ₂ -korr.	0,585	-0,0709	-1,79	
12	Halbmikro SO ₂ unber.	0,620	-0,0359	-0,91	
13	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,480	-0,1759	-4,45	
15	Gerhardt SO ₂ korr.	0,678	0,0221	0,56	
22	Gerhardt SO ₂ korr.	0,730	0,0741	1,87	
23	Halbmikro SO ₂ unber.	0,730	0,0741	1,87	
28	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,635	-0,0209	-0,53	
29	Halbmikro SO ₂ unber.	0,738	0,0821	2,08	
30	Wädenswil SO ₂ korr.	0,600	-0,0559	-1,41	
31	Gerhardt SO ₂ korr.	0,610	-0,0459	-1,16	
32	Gerhardt SO ₂ korr.	0,660	0,0041	0,10	
33	Halbmikro SO ₂ unber.	0,730	0,0741	1,87	
38	Halbmikro SO ₂ korr.	0,522	-0,1339	-3,39	
39	Gerhardt SO ₂ korr.	0,660	0,0041	0,10	
40	Gerhardt SO ₂ korr.	0,662	0,0061	0,15	
41	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,648	-0,0079	-0,20	
42	Gerhardt SO ₂ ausg.	0,750	0,0941	2,38	
44	Gerhardt SO ₂ korr.	0,730	0,0741	1,87	
45	Gerhardt SO ₂ korr.	0,740	0,0841	2,13	
46	Halbmikro SO ₂ korr.	0,540	-0,1159	-2,93	
47	Halbmikro SO ₂ ausg.	0,546	-0,1099	-2,78	
49	Gerhardt SO ₂ korr.	0,717	0,0611	1,55	
55	Gerhardt SO ₂ korr.	0,660	0,0041	0,10	
56	Rentschler mod. korr.	0,729	0,0731	1,85	
57	Büchi SO ₂ korr.	0,709	0,0527	1,33	
58	OIV SO ₂ -korr.	0,660	0,0041	0,10	
60	Wädenswil SO ₂ korr.	0,630	-0,0259	-0,66	
63	Halbmikro SO ₂ unber.	0,685	0,0291	0,74	
65	Wädenswil SO ₂ korr.	0,650	-0,0059	-0,15	
67	Wädenswil SO ₂ korr.	0,640	-0,0159	-0,40	
68	Gerhardt SO ₂ korr.	0,570	-0,0859	-2,17	
84	Halbmikro SO ₂ unber.	0,730	0,0741	1,87	
87	OIV SO ₂ -korr.	0,652	-0,0041	-0,10	
103	spezial_1 (siehe S. 104)	0,719	0,0631	1,60	

6.15.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,700	0,0441	1,12	0,49	
202	FTIR	0,680	0,0241	0,61	0,27	
203	FTIR	0,689	0,0331	0,84	0,37	
204	FTIR	0,760	0,1041	2,63	1,17	
205	FTIR	0,690	0,0341	0,86	0,38	
206	FTIR	0,700	0,0441	1,12	0,49	
208	FTIR	0,634	-0,0219	-0,55	-0,25	
209	FTIR	0,560	-0,0959	-2,43	-1,08	
210	FTIR	0,630	-0,0259	-0,66	-0,29	
211	FTIR	0,620	-0,0359	-0,91	-0,40	
212	FTIR	0,830	0,1741	4,40	1,95	
214	FTIR	0,640	-0,0159	-0,40	-0,18	
216	FTIR	0,660	0,0041	0,10	0,05	
217	FTIR	0,490	-0,1659	-4,20	-1,86	
218	FTIR	0,540	-0,1159	-2,93	-1,30	
219	FTIR	0,640	-0,0159	-0,40	-0,18	
220	FTIR	0,640	-0,0159	-0,40	-0,18	
221	FTIR	0,840	0,1841	4,66	2,07	
222	FTIR	0,600	-0,0559	-1,41	-0,63	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	0,620	-0,0359	-0,91	-0,40	
225	FTIR	0,650	-0,0059	-0,15	-0,07	
226	FTIR	0,560	-0,0959	-2,43	-1,08	
227	FTIR	0,624	-0,0319	-0,81	-0,36	
228	FTIR	0,610	-0,0459	-1,16	-0,52	
229	FTIR	0,760	0,1041	2,63	1,17	
230	FTIR	0,560	-0,0959	-2,43	-1,08	
231	FTIR	0,703	0,0471	1,19	0,53	
233	FTIR	0,750	0,0941	2,38	1,06	
235	FTIR	0,560	-0,0959	-2,43	-1,08	
236	FTIR	0,600	-0,0559	-1,41	-0,63	
237	FTIR	0,610	-0,0459	-1,16	-0,52	
238	FTIR	0,750	0,0941	2,38	1,06	
241	FTIR	0,710	0,0541	1,37	0,61	
242	FTIR	0,730	0,0741	1,87	0,83	
243	FTIR	0,790	0,1341	3,39	1,51	
244	FTIR	0,760	0,1041	2,63	1,17	
245	FTIR	0,580	-0,0759	-1,92	-0,85	
246	FTIR	0,850	0,1941	4,91	2,18	
247	FTIR	0,670	0,0141	0,36	0,16	
249	FTIR	0,670	0,0141	0,36	0,16	
250	FTIR	0,350	-0,3059	-7,74	-3,43	
251	FTIR	0,760	0,1041	2,63	1,17	
254	FTIR	0,640	-0,0159	-0,40	-0,18	
255	FTIR	0,680	0,0241	0,61	0,27	
256	FTIR	0,560	-0,0959	-2,43	-1,08	
257	FTIR	0,680	0,0241	0,61	0,27	
258	FTIR	0,530	-0,1259	-3,18	-1,41	
260	FTIR	0,610	-0,0459	-1,16	-0,52	
261	FTIR	0,500	-0,1559	-3,94	-1,75	
262	FTIR	0,750	0,0941	2,38	1,06	
263	FTIR	0,650	-0,0059	-0,15	-0,07	
264	FTIR	0,740	0,0841	2,13	0,94	
265	FTIR	0,630	-0,0259	-0,66	-0,29	
266	FTIR	0,590	-0,0659	-1,67	-0,74	
267	FTIR	0,660	0,0041	0,10	0,05	
268	FTIR	0,900	0,2441	6,17	2,74	
269	FTIR	0,630	-0,0259	-0,66	-0,29	
270	FTIR	0,580	-0,0759	-1,92	-0,85	
271	FTIR	0,580	-0,0759	-1,92	-0,85	
273	FTIR	0,730	0,0741	1,87	0,83	
274	FTIR	0,630	-0,0259	-0,66	-0,29	
275	FTIR	0,540	-0,1159	-2,93	-1,30	
276	FTIR	0,620	-0,0359	-0,91	-0,40	
277	FTIR	0,640	-0,0159	-0,40	-0,18	
278	FTIR	0,360	-0,2959	-7,48	-3,32	
280	FTIR	0,540	-0,1159	-2,93	-1,30	
281	FTIR	0,630	-0,0259	-0,66	-0,29	
282	FTIR	0,565	-0,0909	-2,30	-1,02	
284	FTIR	0,790	0,1341	3,39	1,51	
322	FTIR	0,690	0,0341	0,86	0,38	
338	FTIR	0,670	0,0141	0,36	0,16	
349	FTIR	0,700	0,0441	1,12	0,49	
363	FTIR	0,700	0,0441	1,12	0,49	

Beschreibung zum Verfahren "spezial_1":

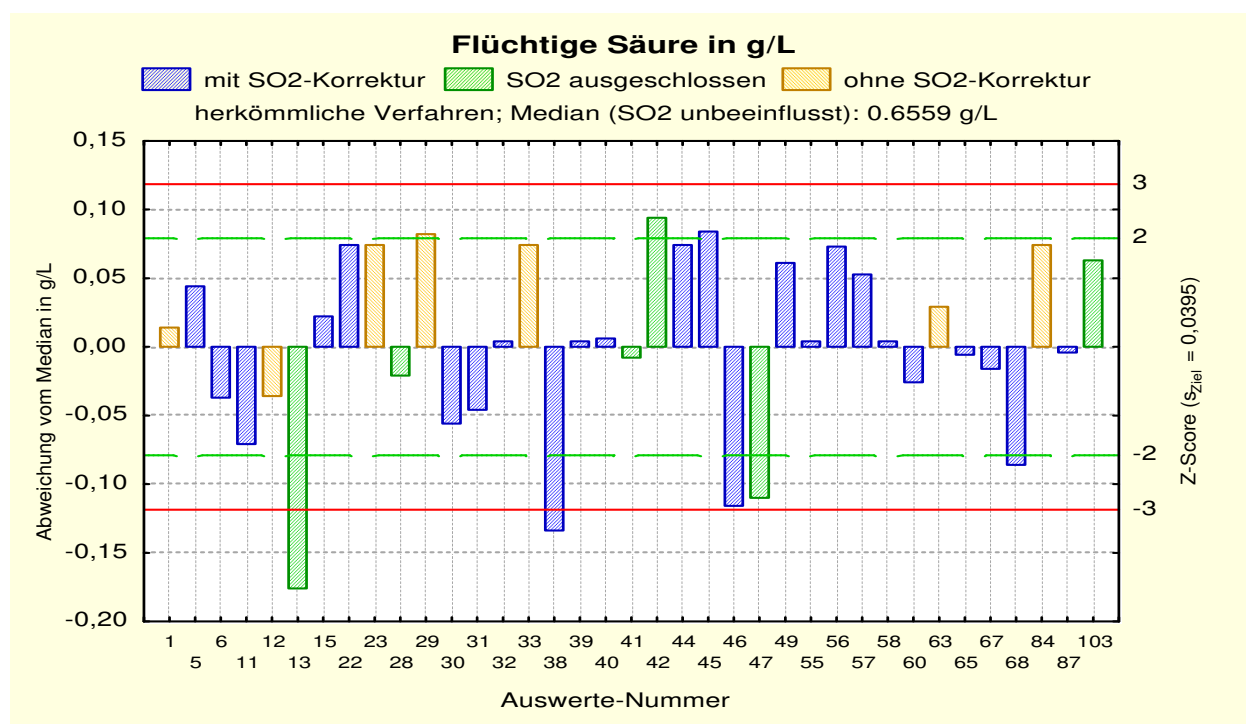
Modifikation des Verfahrens nach Rentschler unter Ausschluss des Überganges der Schwefligen Säure in das Destillat durch Oxydation in der Probe mit Wasserstoffperoxid in Anwesenheit von Barium- oder Calciumionen.

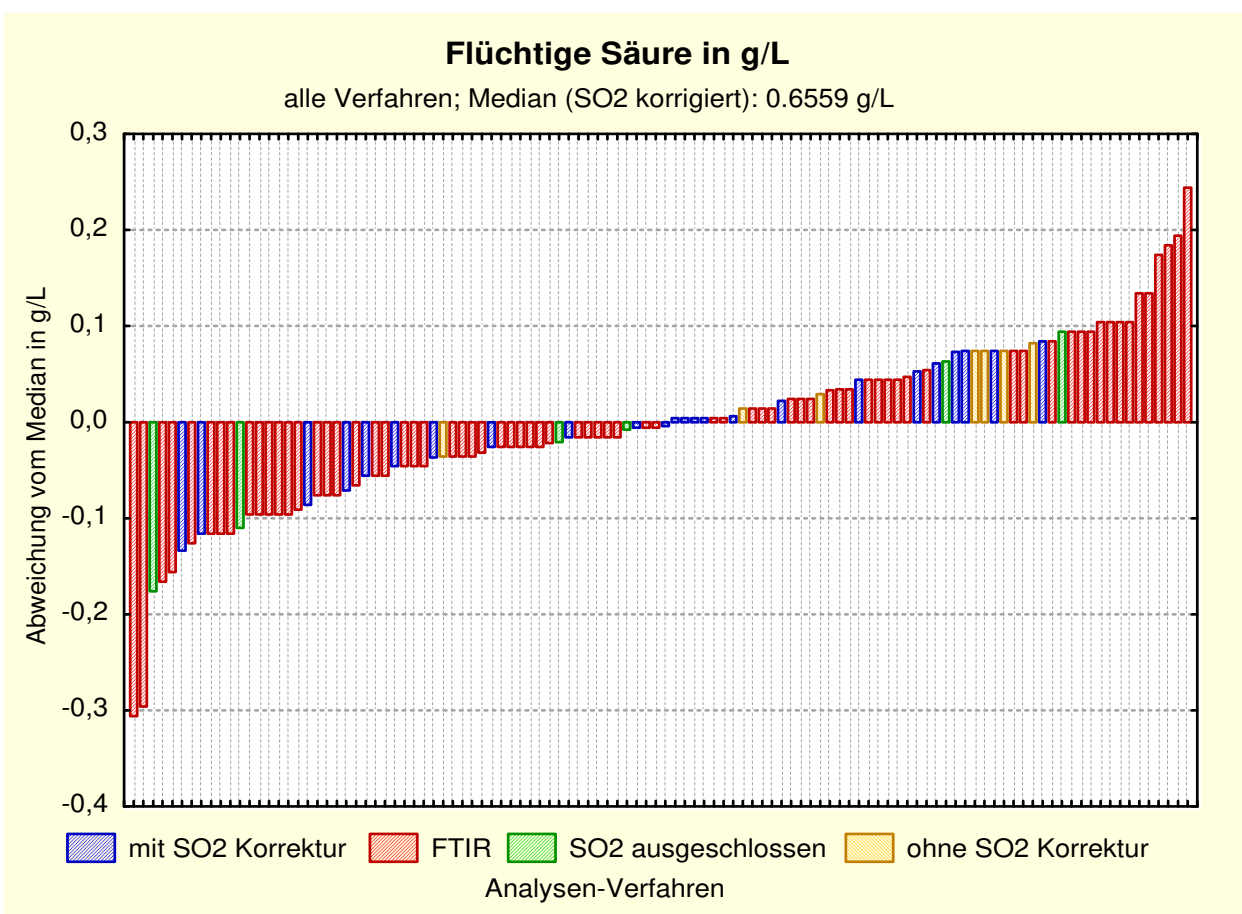
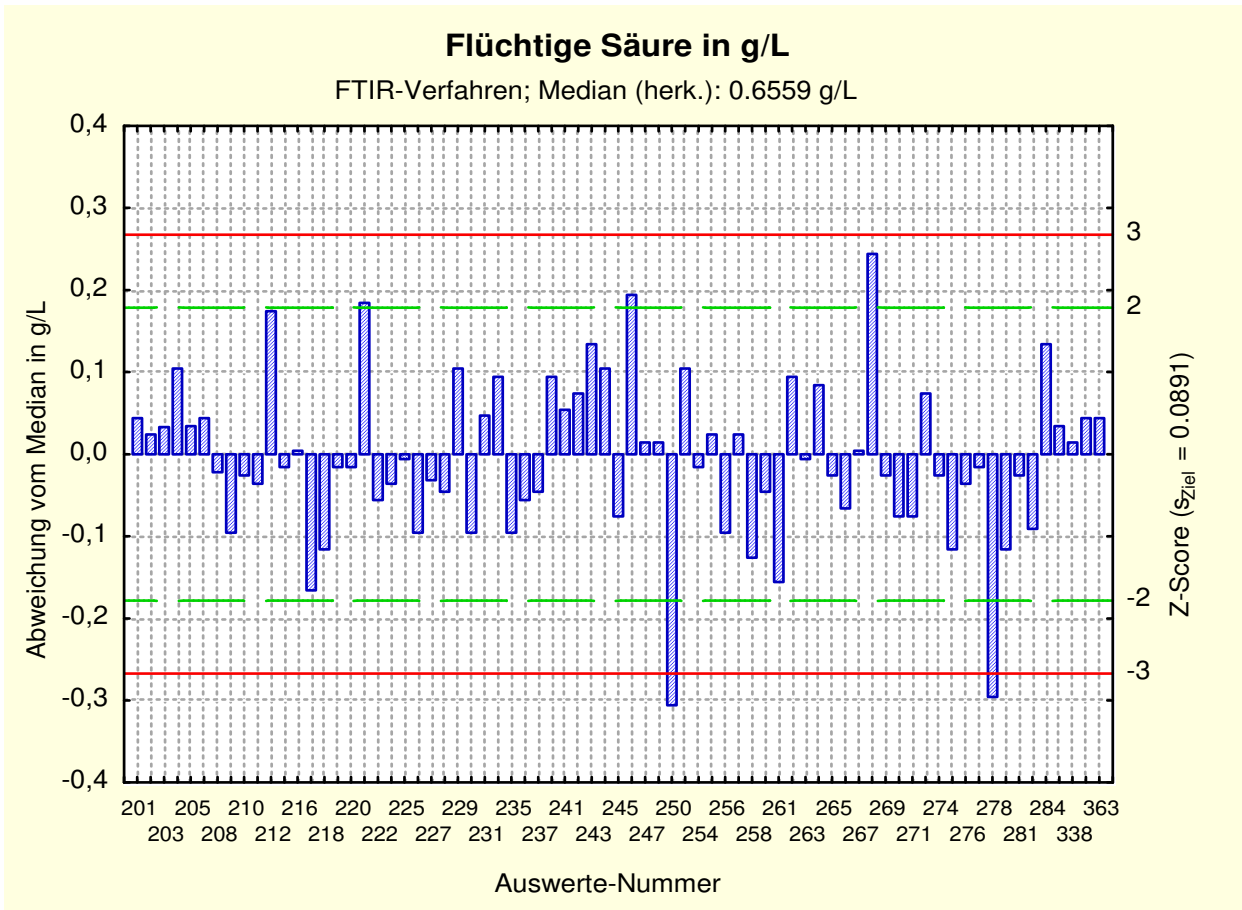
6.15.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren mit SO₂-Korrektur

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L	alle Daten
Gültige Werte	30
Minimalwert	0,480
Mittelwert	0,6477
Median	0,6559
Maximalwert	0,750
Standardabweichung (s _L)	0,069
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,040
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,75
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)	
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)	0,77
Quotient (u _M /s _H)	0,32
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)	0,14

6.15.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO ₂ unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,7052	0,0417
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	1	0,5460	
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	2	0,5310	0,0144
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren,			
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	4	0,6315	0,0213
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO ₂ ausg.	SO ₂ -Einfl. ausgeschlossen, z.B. mit H ₂ O ₂	4	0,6366	0,1098
SO ₂ korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	12	0,6709	0,0574
OIV SO ₂ -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	4	0,6493	0,0540
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO ₂ -korr	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,7290	
Büchi SO ₂ korr.	Destillationsapparat Büchi,			
SO ₂ -Einfluss korrigiert		1	0,7086	
spezial_1	Kurzbeschreibung siehe Seite 104	1	0,7190	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	30	0,6507	0,0701
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	0,6515	0,0877





6.16 Acetat (als Essigsäure) [g/L]**6.16.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1**

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert (verbindliche Z-Score für diese Werte)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,619	-0,076	-1,83	
03	HPLC	0,539	-0,156	-3,76	
06	enzymat. autom.	0,656	-0,039	-0,94	
07	enzymat. autom.	0,655	-0,040	-0,96	
12	enzymat. autom.	0,650	-0,045	-1,08	
14	enzymat. autom.	0,620	-0,075	-1,81	
16	enzymat. autom.	0,780	0,085	2,05	
17	enzymat. autom.	0,720	0,025	0,60	
20	enzymat. autom.	0,645	-0,050	-1,20	
24	NMR	0,580	-0,115	-2,77	
26	HPLC	0,740	0,045	1,08	
27	enzymat. autom.	0,690	-0,005	-0,12	
31	enzymat. autom.	0,790	0,095	2,29	
39	enzymat. autom.	0,690	-0,005	-0,12	
40	HPLC	0,660	-0,035	-0,84	
42	enzymat. autom.	0,680	-0,015	-0,36	
43	enzymat. autom.	0,850	0,155	3,73	
45	enzymat. autom.	0,700	0,005	0,12	
46	enzymat. autom.	0,770	0,075	1,81	
47	enzymat. autom.	0,770	0,075	1,81	
48	enzymat. autom.	0,480	-0,215	-5,18	(**)
50	enzymat. autom.	0,720	0,025	0,60	
53	enzymat. autom.	0,750	0,055	1,32	
56	enzymat. autom.	0,690	-0,005	-0,12	
58	enzymat. autom.	0,730	0,035	0,84	
59	enzymat. autom.	0,590	-0,105	-2,53	
61	enzymat. autom.	0,730	0,035	0,84	
68	enzymat. autom.	0,680	-0,015	-0,36	
88	HPLC	0,530	-0,165	-3,97	
107	NMR	0,574	-0,121	-2,91	
108	NMR	0,555	-0,140	-3,37	
109	NMR	0,577	-0,118	-2,83	
110	NMR	0,643	-0,052	-1,25	
210	FTIR	0,760	0,065	1,57	
213	FTIR	0,640	-0,055	-1,32	
224	FTIR	0,680	-0,015	-0,36	
242	FTIR	0,620	-0,075	-1,81	
245	FTIR	0,580	-0,115	-2,77	
259	FTIR	0,580	-0,115	-2,77	
260	FTIR	0,690	-0,005	-0,12	
274	FTIR	0,630	-0,065	-1,57	
283	FTIR	0,513	-0,182	-4,38	

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

Zeilen in grauer Schrift dienen nur der Information. Gültige Z-Score für diese Laborergebnisse im Abschnitt.6.16.2.

6.16.2 Herkömmliche und FTIR-Laboreergebnisse, Teil 2Bewertungsbasis: HPLC, enzymatisch, manuell, ¹H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,619	0,042	1,17	
03	HPLC	0,539	-0,038	-1,08	
24	NMR	0,580	0,003	0,08	
26	HPLC	0,740	0,163	4,59	
40	HPLC	0,660	0,083	2,33	
88	HPLC	0,530	-0,047	-1,33	
107	NMR	0,574	-0,003	-0,08	
108	NMR	0,555	-0,022	-0,62	
109	NMR	0,577	0,000	0,00	
110	NMR	0,643	0,066	1,86	
210	FTIR	0,760	0,183	5,15	(**)
213	FTIR	0,640	0,063	1,77	
224	FTIR	0,680	0,103	2,89	
242	FTIR	0,620	0,043	1,20	
245	FTIR	0,580	0,003	0,08	
259	FTIR	0,580	0,003	0,08	
260	FTIR	0,690	0,113	3,18	
274	FTIR	0,630	0,053	1,48	
283	FTIR	0,513	-0,064	-1,81	

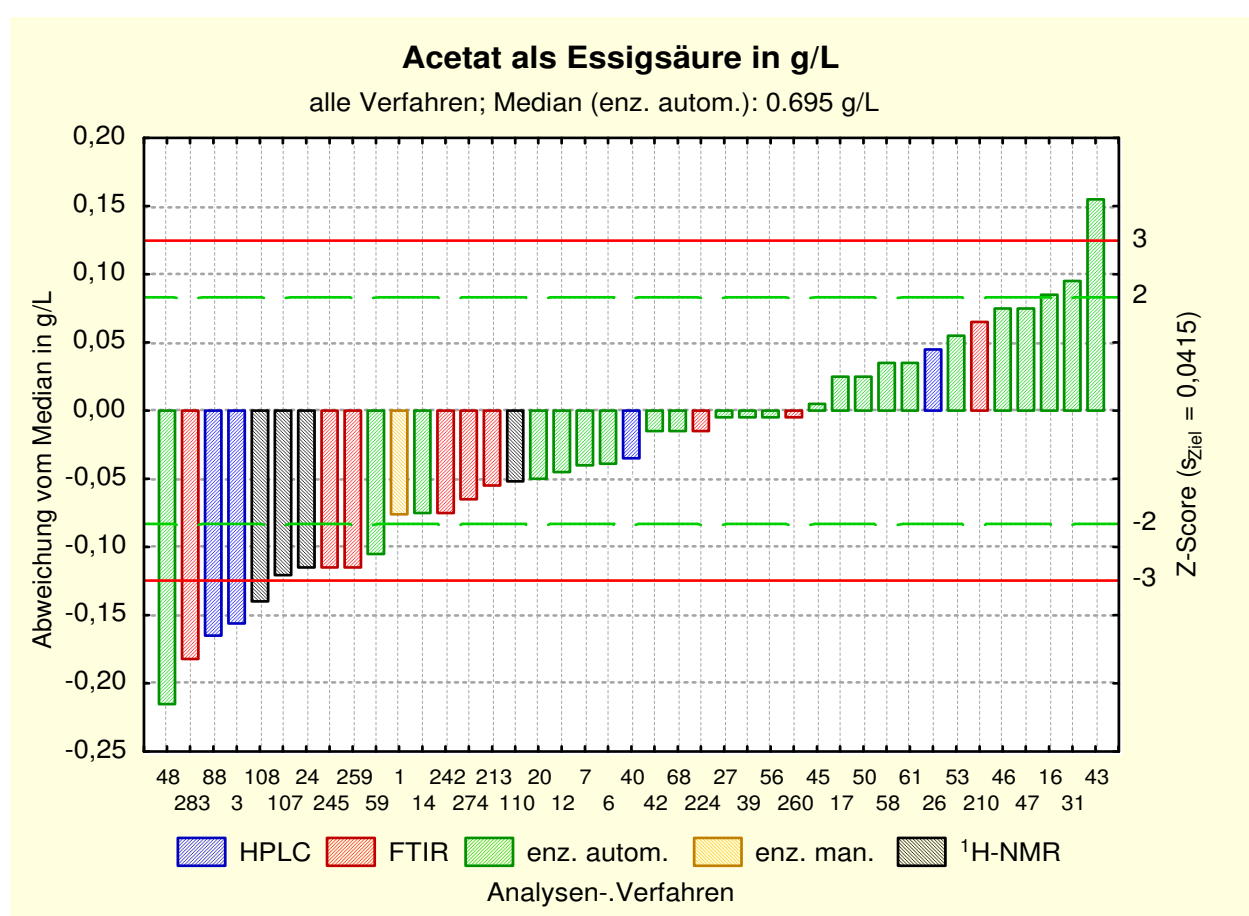
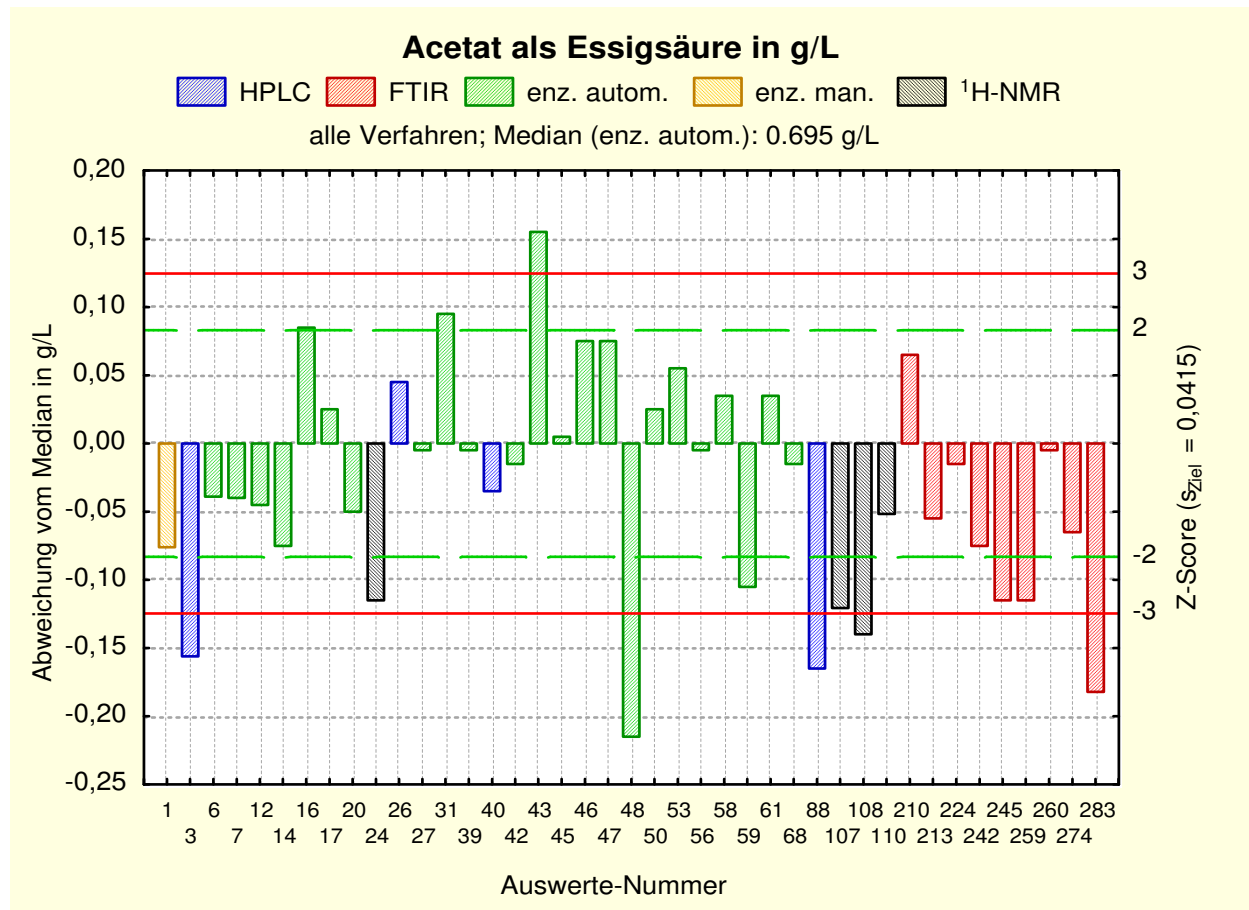
Der mit (**) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

6.16.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat.		HPLC, enz.man., ¹ H-NMR	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. z _{Max} 4,5
Gültige Werte	23	22	10	9
Minimalwert	0,480	0,590	0,530	0,530
Mittelwert	0,697	0,707	0,602	0,586
Median	0,690	0,695	0,579	0,577
Maximalwert	0,850	0,850	0,740	0,660
Standardabweichung (s _L)	0,0766	0,0617	0,0646	0,0453
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,0160	0,0131	0,0204	0,0151
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,0413	0,0415	0,0355	0,0355
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)				
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)				
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,86	1,49	1,82	1,28
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)				
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)				
Quotient (u _M /s _H)	0,39	0,32	0,57	0,43
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)				
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)				

6.16.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	23	0,7003	0,0654
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,6172	0,1146
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,6190	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	5	0,5844	0,0330
	HPLC, enzymatisch, manuell + ¹ H-NMR	10	0,5965	0,0603
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	9	0,6316	0,0796



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

Bewertungsbasis: ohne NMR

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,12	0,000	0,00	0,00	
03	HPLC	3,22	0,100	0,67	1,03	
06	HPLC	3,12	0,000	0,00	0,00	
07	enzymat. autom.	3,06	-0,064	-0,43	-0,66	
23	HPLC	2,97	-0,150	-1,01	-1,54	
24	NMR	3,09	-0,030	-0,20	-0,31	
26	HPLC	3,09	-0,030	-0,20	-0,31	
28	HPLC	3,07	-0,050	-0,34	-0,51	
40	IC	3,23	0,112	0,75	1,15	
59	HPLC	3,27	0,150	1,01	1,54	
87	HPLC	3,03	-0,090	-0,61	-0,93	
91	HPLC	3,12	0,000	0,00	0,00	
107	NMR	2,99	-0,135	-0,91	-1,39	
108	NMR	3,09	-0,032	-0,21	-0,33	
109	NMR	3,25	0,126	0,85	1,29	
110	NMR	3,23	0,111	0,75	1,14	

6.17.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	3,10	0,010	0,07	0,10	
05	enz.(L-), autom.	3,03	-0,060	-0,41	-0,62	
06	enz.(L-), autom.	3,09	0,000	0,00	0,00	
07	enz.(L-), autom.	3,03	-0,060	-0,41	-0,62	
08	enz.(L-), autom.	3,28	0,187	1,27	1,94	
11	enz.(L-), autom.	2,93	-0,160	-1,08	-1,66	
12	enz.(L-), autom.	3,24	0,150	1,02	1,56	
14	enz.(L-), autom.	3,04	-0,050	-0,34	-0,52	
16	enz.(L-), autom.	3,36	0,270	1,83	2,80	
17	enz.(L-), autom.	2,90	-0,190	-1,29	-1,97	
20	enz.(L-), autom.	3,15	0,060	0,41	0,62	
27	enz.(L-), autom.	3,18	0,090	0,61	0,93	
31	enz.(L-), autom.	3,31	0,219	1,48	2,27	
39	enz.(L-), autom.	2,29	-0,800	-5,42	-8,30	(**)
41	enz.(L-), autom.	3,08	-0,015	-0,10	-0,16	
42	enz.(L-), autom.	3,35	0,260	1,76	2,70	
43	enz.(L-), autom.	3,13	0,040	0,27	0,41	
45	enz.(L-), autom.	3,09	-0,004	-0,03	-0,04	
46	enz.(L-), autom.	3,25	0,160	1,08	1,66	
47	enz.(L-), autom.	3,48	0,390	2,64	4,05	
48	enz.(L-), autom.	3,69	0,600	4,07	6,22	(**)
50	enz.(L-), autom.	2,75	-0,340	-2,31	-3,53	
55	enz.(L-), autom.	3,20	0,110	0,75	1,14	
56	enz.(L-), autom.	2,97	-0,120	-0,81	-1,24	
57	enz.(L-), autom.	2,99	-0,100	-0,68	-1,04	
58	enz.(L-), autom.	3,26	0,170	1,15	1,76	
59	enz.(L-), autom.	3,09	0,000	0,00	0,00	
61	enz.(L-), autom.	3,73	0,640	4,34	6,64	(**)
63	enz.(L-) Hand	3,00	-0,088	-0,60	-0,91	
68	enz.(L-), autom.	3,30	0,210	1,42	2,18	
81	enz.(L-) Hand	2,96	-0,128	-0,87	-1,33	
87	enz.(L-), autom.	3,00	-0,090	-0,61	-0,93	
89	enz.(L-) Hand	2,97	-0,120	-0,81	-1,24	

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

6.17.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
202	FTIR	2,95	-0,170	-1,14	-0,78	
203	FTIR	3,14	0,016	0,11	0,07	
204	FTIR	3,22	0,100	0,67	0,46	
205	FTIR	2,82	-0,300	-2,02	-1,38	
206	FTIR	2,88	-0,240	-1,61	-1,10	
208	FTIR	3,07	-0,050	-0,34	-0,23	
209	FTIR	2,60	-0,520	-3,50	-2,39	
210	FTIR	2,96	-0,160	-1,08	-0,73	
211	FTIR	2,90	-0,220	-1,48	-1,01	
212	FTIR	3,19	0,070	0,47	0,32	
213	FTIR	2,95	-0,170	-1,14	-0,78	
214	FTIR	2,98	-0,140	-0,94	-0,64	
216	FTIR	4,70	1,580	10,62	7,25	(*)
217	FTIR	3,06	-0,060	-0,40	-0,28	
218	FTIR	3,24	0,120	0,81	0,55	
219	FTIR	3,57	0,450	3,03	2,06	
220	FTIR	3,25	0,130	0,87	0,60	
221	FTIR	3,20	0,080	0,54	0,37	
222	FTIR	3,08	-0,040	-0,27	-0,18	
223	FTIR	3,46	0,340	2,29	1,56	
224	FTIR	2,95	-0,170	-1,14	-0,78	
225	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
226	FTIR	2,93	-0,190	-1,28	-0,87	
227	FTIR	3,19	0,070	0,47	0,32	
228	FTIR	3,60	0,480	3,23	2,20	
229	FTIR	3,16	0,040	0,27	0,18	
230	FTIR	4,02	0,900	6,05	4,13	
231	FTIR	3,07	-0,050	-0,34	-0,23	
233	FTIR	3,35	0,230	1,55	1,06	
235	FTIR	3,14	0,020	0,13	0,09	
237	FTIR	3,20	0,080	0,54	0,37	
238	FTIR	3,41	0,290	1,95	1,33	
241	FTIR	3,42	0,300	2,02	1,38	
242	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
243	FTIR	3,67	0,550	3,70	2,52	
244	FTIR	3,29	0,170	1,14	0,78	
245	FTIR	2,87	-0,250	-1,68	-1,15	
246	FTIR	3,22	0,100	0,67	0,46	
247	FTIR	3,58	0,460	3,09	2,11	
249	FTIR	2,60	-0,520	-3,50	-2,39	
250	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
254	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
255	FTIR	3,10	-0,020	-0,13	-0,09	
256	FTIR	3,12	0,000	0,00	0,00	
257	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
258	FTIR	3,40	0,280	1,88	1,28	
259	FTIR	2,85	-0,270	-1,82	-1,24	
260	FTIR	2,70	-0,420	-2,82	-1,93	
261	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
263	FTIR	3,00	-0,120	-0,81	-0,55	
264	FTIR	4,06	0,940	6,32	4,31	
265	FTIR	2,55	-0,570	-3,83	-2,61	
266	FTIR	3,27	0,150	1,01	0,69	
267	FTIR	3,29	0,170	1,14	0,78	
268	FTIR	3,36	0,240	1,61	1,10	
269	FTIR	3,50	0,380	2,56	1,74	
270	FTIR	3,51	0,390	2,62	1,79	
271	FTIR	3,00	-0,120	-0,81	-0,55	
273	FTIR	3,35	0,230	1,55	1,06	
274	FTIR	3,30	0,180	1,21	0,83	
275	FTIR	3,08	-0,040	-0,27	-0,18	
276	FTIR	2,93	-0,190	-1,28	-0,87	
277	FTIR	3,09	-0,030	-0,20	-0,14	
278	FTIR	3,60	0,480	3,23	2,20	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

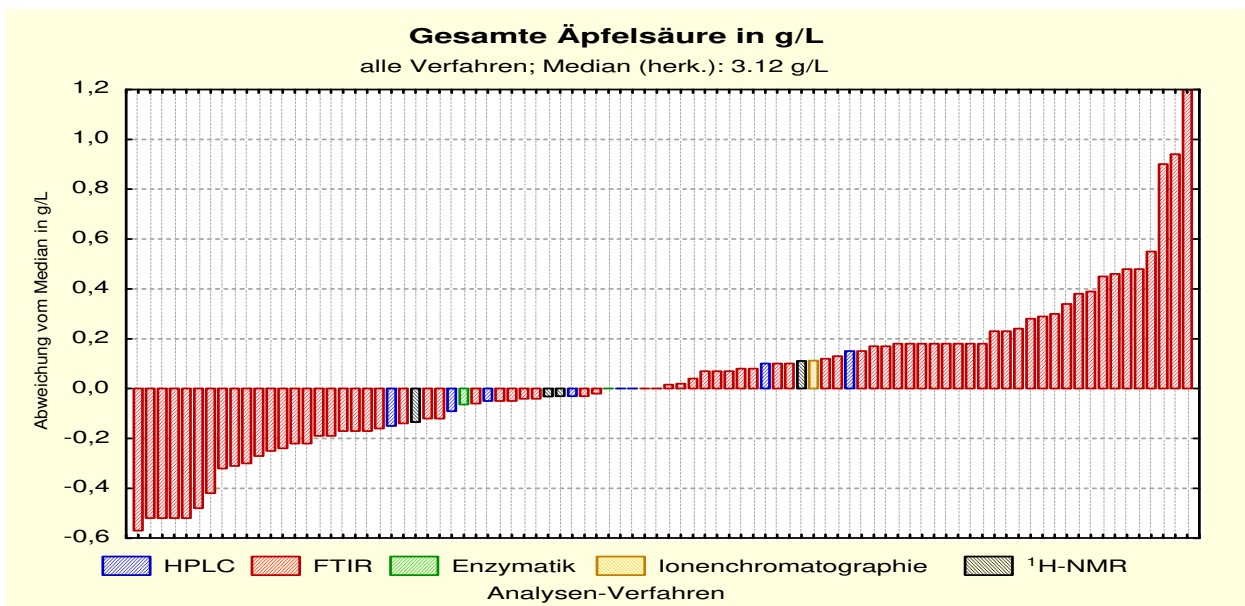
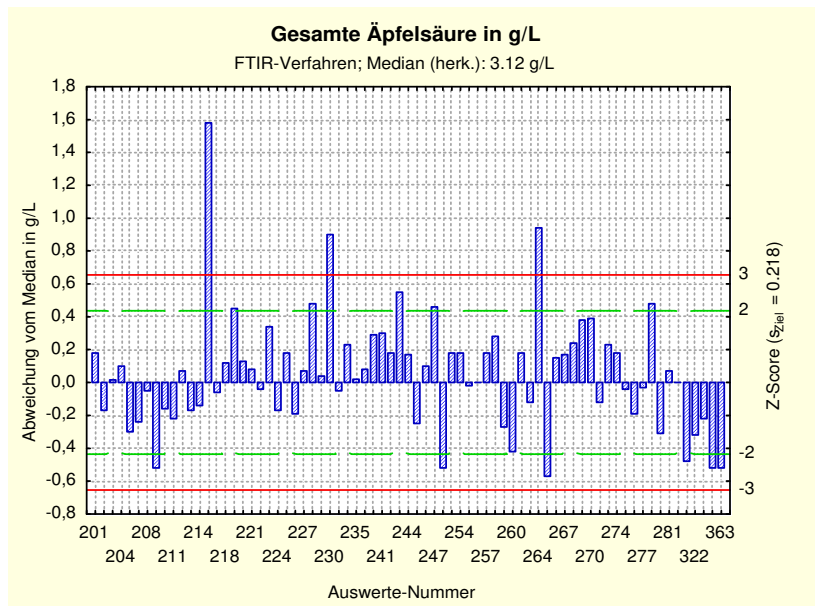
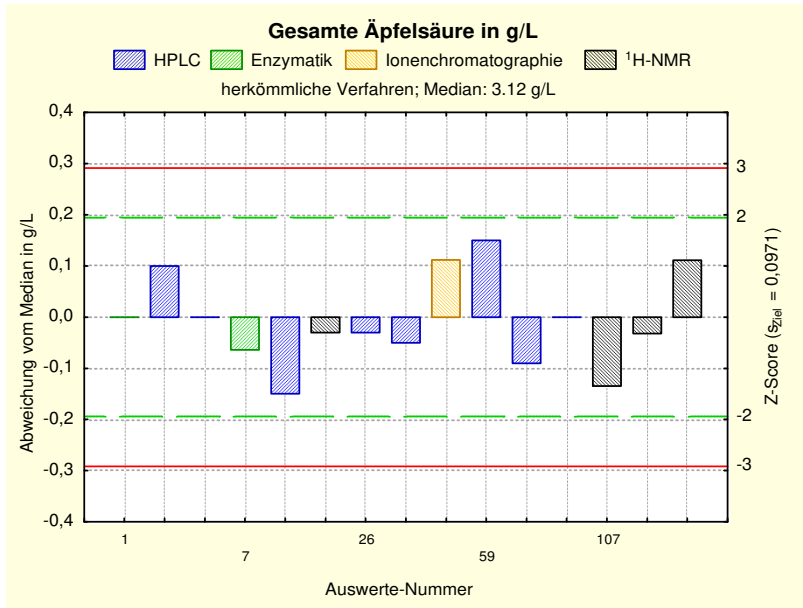
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
280	FTIR	2,81	-0,310	-2,08	-1,42	
281	FTIR	3,19	0,070	0,47	0,32	
282	FTIR	3,12	0,000	0,00	0,00	
283	FTIR	2,64	-0,480	-3,23	-2,20	
322	FTIR	2,80	-0,320	-2,15	-1,47	
338	FTIR	2,90	-0,220	-1,48	-1,01	
349	FTIR	2,60	-0,520	-3,50	-2,39	
363	FTIR	2,60	-0,520	-3,50	-2,39	

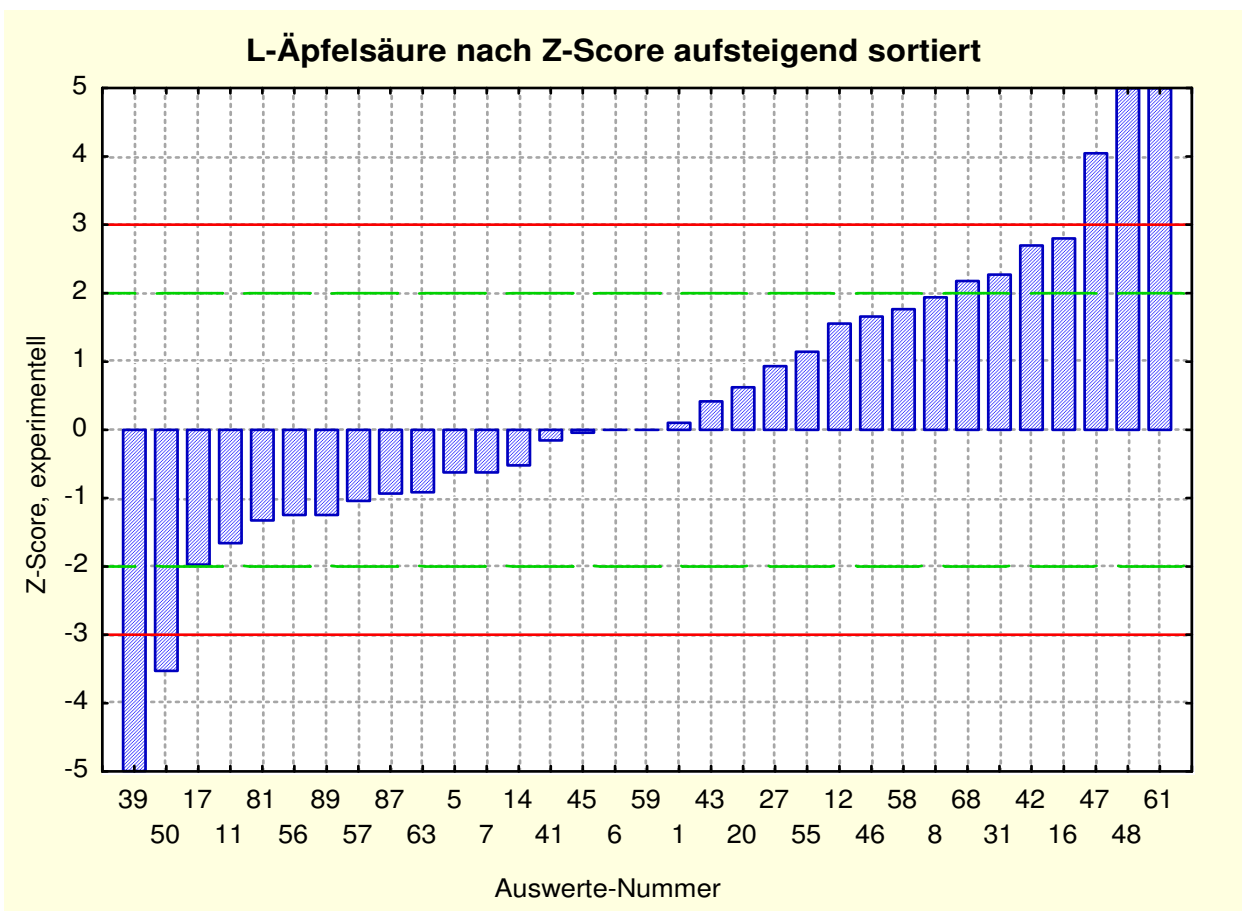
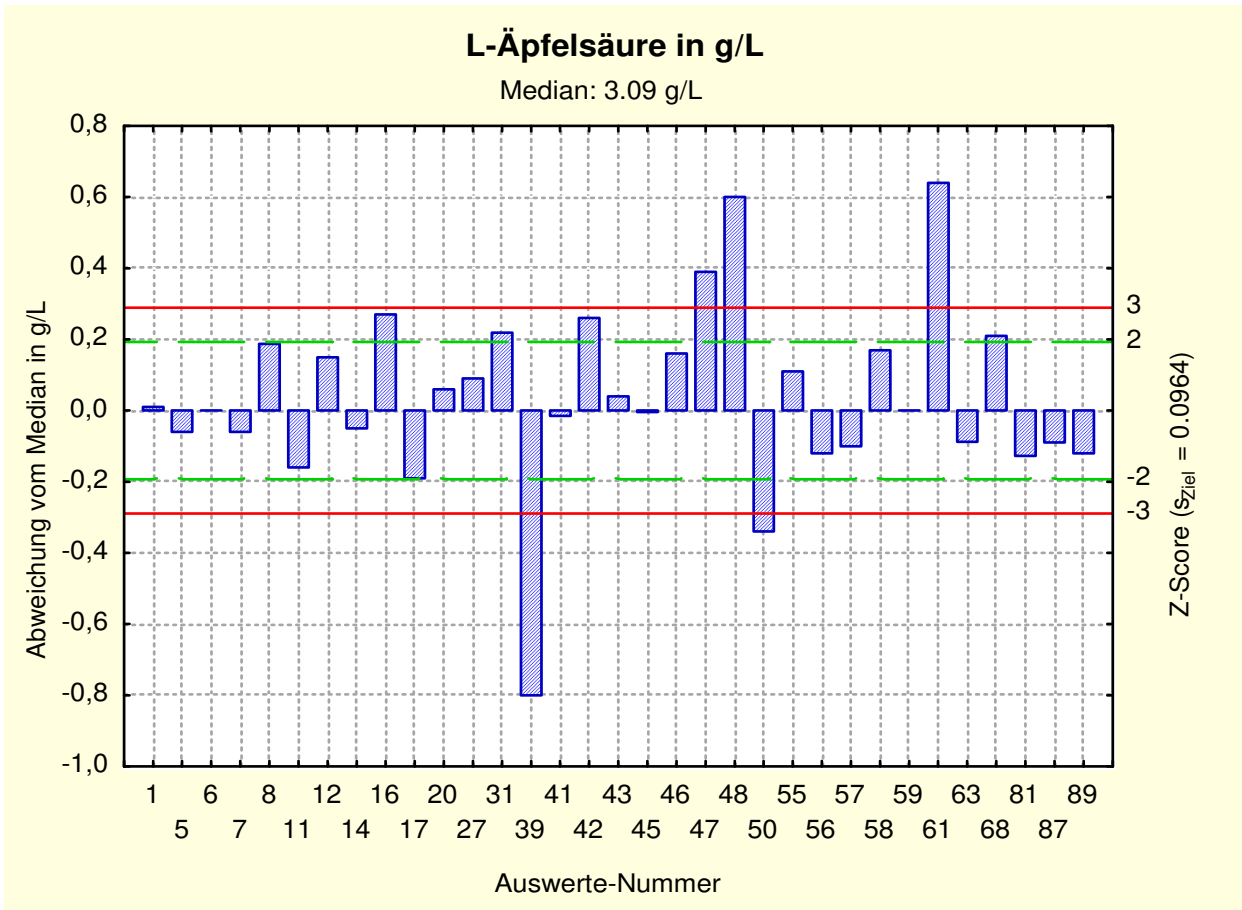
6.17.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	excl. NMR	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	11		33	30
Minimalwert	2,97		2,29	2,75
Mittelwert	3,118		3,128	3,117
Median	3,120		3,090	3,090
Maximalwert	3,27		3,73	3,48
Standardabweichung (s _L)	0,091		0,259	0,162
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,027		0,045	0,030
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,149		0,147	0,147
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,097		0,096	0,096
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,218			
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,61		1,75	1,10
Quotient (s _L /s _{exp})	0,94		2,69	1,68
Quotient (s _L /s _{FTIR})	0,42			
Quotient (u _M /s _H)	0,18		0,31	0,20
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)	0,28		0,47	0,31
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,13			

6.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	3,112	0,106
IC	Ionenchromatographie	1	3,232	
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	3,056	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	3,120	
	herkömmliche Verfahren	11	3,119	0,102
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	3,155	0,298
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	3,128	0,124
enz.(L-), autom.	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	29	3,147	0,202
enz.(L-) Hand	enzymatisch, nur L-Form, automatisiert	4	3,005	0,065
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	33	3,127	0,190





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

Bewertungsbasis nur enzymatische Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,590	0,009	0,27	
03	HPLC	0,703	0,122	3,44	
05	enzymat. autom.	0,570	-0,011	-0,29	
06	enzymat. autom.	0,581	0,000	0,01	
07	HPLC	0,566	-0,015	-0,41	
08	enzymat. autom.	0,616	0,035	1,00	
11	enzymat. autom.	0,612	0,031	0,88	
20	enzymat. autom.	0,580	-0,001	-0,01	
23	HPLC	0,430	-0,151	-4,22	
24	NMR	0,530	-0,050	-1,42	
26	HPLC	0,470	-0,111	-3,10	
28	HPLC	0,620	0,039	1,11	
40	HPLC	0,550	-0,030	-0,86	
59	enzymat. autom.	0,774	0,194	5,43	(**)
63	enzymat. Hand	0,689	0,108	3,04	
68	enzymat. autom.	0,550	-0,030	-0,86	
81	enzymat. Hand	0,534	-0,047	-1,31	
91	HPLC	0,620	0,039	1,11	
107	NMR	0,543	-0,037	-1,04	
108	NMR	0,508	-0,073	-2,05	
109	NMR	0,531	-0,050	-1,40	
110	NMR	0,582	0,001	0,03	

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

6.18.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,430	-0,010	-0,36	-0,27	
04	enz.(L-) autom.	0,450	0,010	0,36	0,27	
05	enz.(L-) autom.	0,440	0,000	0,00	0,00	
06	enz.(L-) autom.	0,433	-0,007	-0,25	-0,19	
08	enz.(L-) autom.	0,474	0,034	1,21	0,91	
11	enz.(L-) autom.	0,482	0,042	1,49	1,13	
12	enz.(L-) autom.	0,510	0,070	2,49	1,88	
14	enz.(L-) autom.	0,491	0,051	1,81	1,37	
16	enz.(L-) autom.	0,740	0,300	10,65	8,06	(*)
17	enz.(L-) autom.	0,300	-0,140	-4,97	-3,76	
20	enz.(L-) autom.	0,430	-0,010	-0,36	-0,27	
27	enz.(L-) autom.	0,420	-0,020	-0,71	-0,54	
28	enz.(L-) autom.	0,424	-0,016	-0,57	-0,43	
31	enz.(L-) autom.	0,357	-0,083	-2,95	-2,23	
39	enz.(L-) autom.	0,340	-0,100	-3,55	-2,69	
42	enz.(L-) autom.	0,460	0,020	0,71	0,54	
43	enz.(L-) autom.	0,500	0,060	2,13	1,61	
45	enz.(L-) autom.	0,435	-0,005	-0,18	-0,13	
46	enz.(L-) autom.	0,540	0,100	3,55	2,69	
47	enz.(L-) autom.	0,420	-0,020	-0,71	-0,54	
48	enz.(L-) autom.	0,753	0,313	11,11	8,41	(*)
50	enz.(L-) autom.	0,520	0,080	2,84	2,15	
55	enz.(L-) autom.	0,500	0,060	2,13	1,61	
56	enz.(L-) autom.	0,430	-0,010	-0,36	-0,27	
57	enz.(L-) autom.	0,500	0,060	2,13	1,61	
58	enz.(L-) autom.	0,440	0,000	0,00	0,00	
59	enz.(L-) autom.	0,464	0,024	0,85	0,64	
61	enz.(L-) autom.	0,400	-0,040	-1,42	-1,07	
63	enz.(L-) Hand	0,559	0,119	4,23	3,20	
68	enz.(L-) autom.	0,410	-0,030	-1,07	-0,81	
81	enz.(L-) Hand	0,412	-0,028	-0,99	-0,75	

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

6.18.3 FTIR-Laboregebnisse Gesamte Milchsäure

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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,730	0,145			
202	FTIR	0,510	-0,075			
203	FTIR	0,584	-0,001			
204	FTIR	0,100	-0,485			
205	FTIR	n.n.<0,5				
206	FTIR	0,770	0,185			
208	FTIR	0,470	-0,115			
209	FTIR	0,400	-0,185			
210	FTIR	0,460	-0,125			
211	FTIR	0,300	-0,285			
212	FTIR	0,220	-0,365			
213	FTIR	0,390	-0,195			
214	FTIR	0,390	-0,195			
216	FTIR	0,500	-0,085			
217	FTIR	0,540	-0,045			
218	FTIR	0,080	-0,505			
219	FTIR	0,540	-0,045			
220	FTIR	0,550	-0,035			
221	FTIR	0,100	-0,485			
222	FTIR	0,790	0,205			
223	FTIR	0,520	-0,065			
224	FTIR	0,540	-0,045			
225	FTIR	0,400	-0,185			
226	FTIR	0,220	-0,365			
227	FTIR	0,520	-0,065			
228	FTIR	0,400	-0,185			
229	FTIR	0,350	-0,235			
230	FTIR	0,550	-0,035			
231	FTIR	0,640	0,055			
233	FTIR	0,450	-0,135			
235	FTIR	0,710	0,125			
237	FTIR	0,400	-0,185			
238	FTIR	0,090	-0,495			
241	FTIR	0,430	-0,155			
242	FTIR	0,200	-0,385			
243	FTIR	0,700	0,115			
245	FTIR	0,370	-0,215			
246	FTIR	0,610	0,025			
247	FTIR	0,630	0,045			
249	FTIR	0,600	0,015			
250	FTIR	0,590	0,005			
254	FTIR	0,400	-0,185			
255	FTIR	0,400	-0,185			
256	FTIR	0,750	0,165			
257	FTIR	0,570	-0,015			
258	FTIR	0,300	-0,285			
259	FTIR	0,390	-0,195			
260	FTIR	0,100	-0,485			
261	FTIR	0,300	-0,285			
263	FTIR	0,500	-0,085			
264	FTIR	0,800	0,215			
265	FTIR	0,360	-0,225			
266	FTIR	1,760	1,175			(*)
267	FTIR	0,360	-0,225			
268	FTIR	0,680	0,095			
269	FTIR	0,700	0,115			
270	FTIR	0,260	-0,325			
271	FTIR	0,450	-0,135			
273	FTIR	0,640	0,055			
274	FTIR	0,400	-0,185			
275	FTIR	0,420	-0,165			
276	FTIR	0,250	-0,335			
277	FTIR	0,280	-0,305			
280	FTIR	0,630	0,045			

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

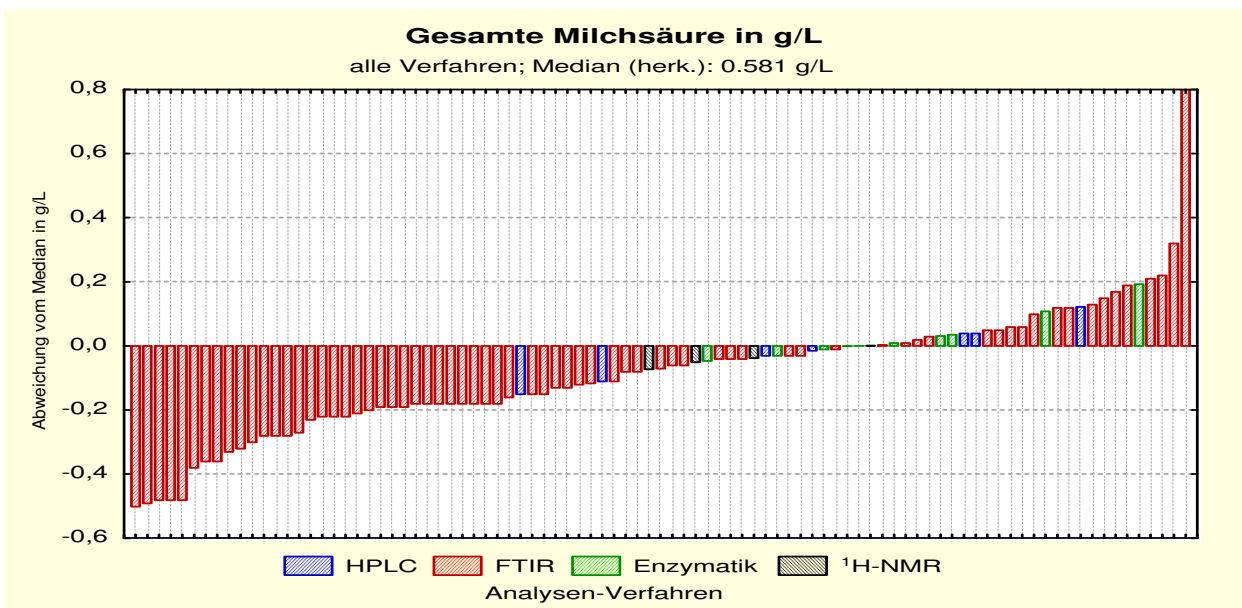
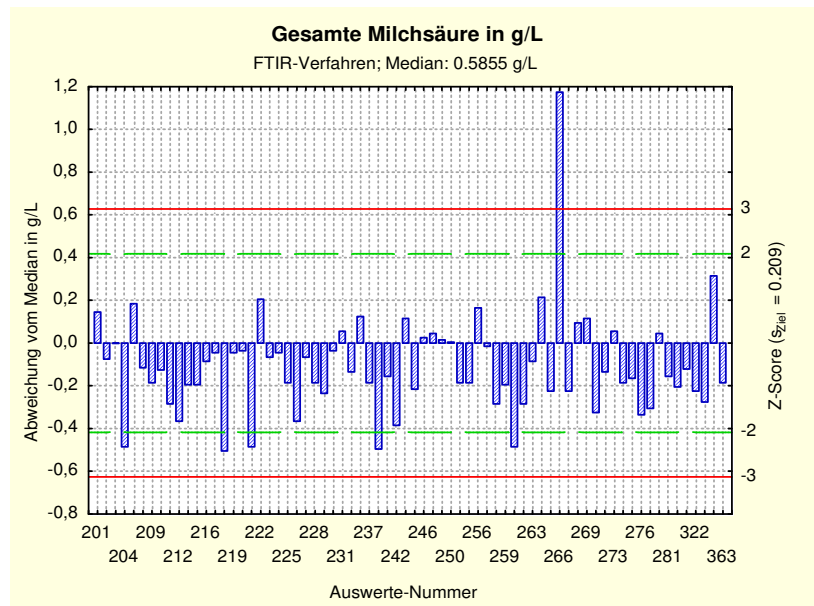
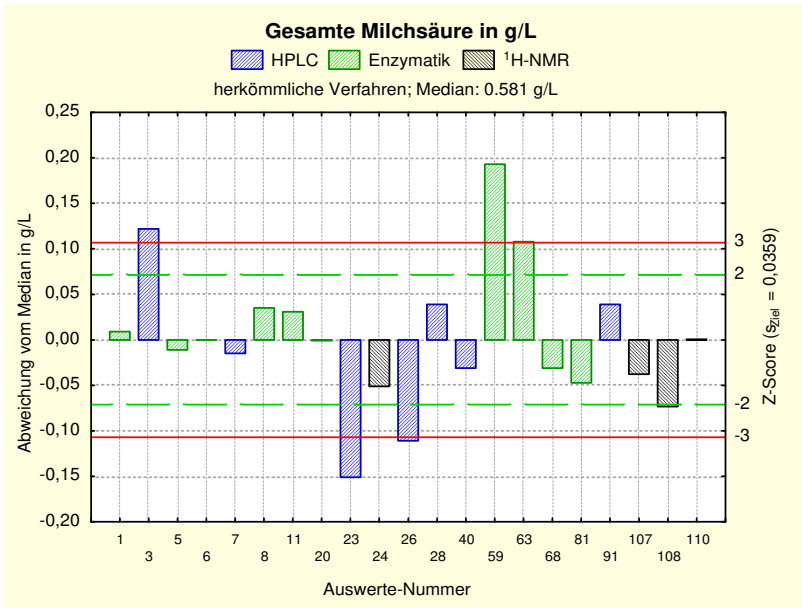
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
281	FTIR	0,430	-0,155			
282	FTIR	0,380	-0,205			
283	FTIR	0,464	-0,121			
322	FTIR	0,360	-0,225			
338	FTIR	0,310	-0,275			
349	FTIR	0,900	0,315			
363	FTIR	0,400	-0,185			

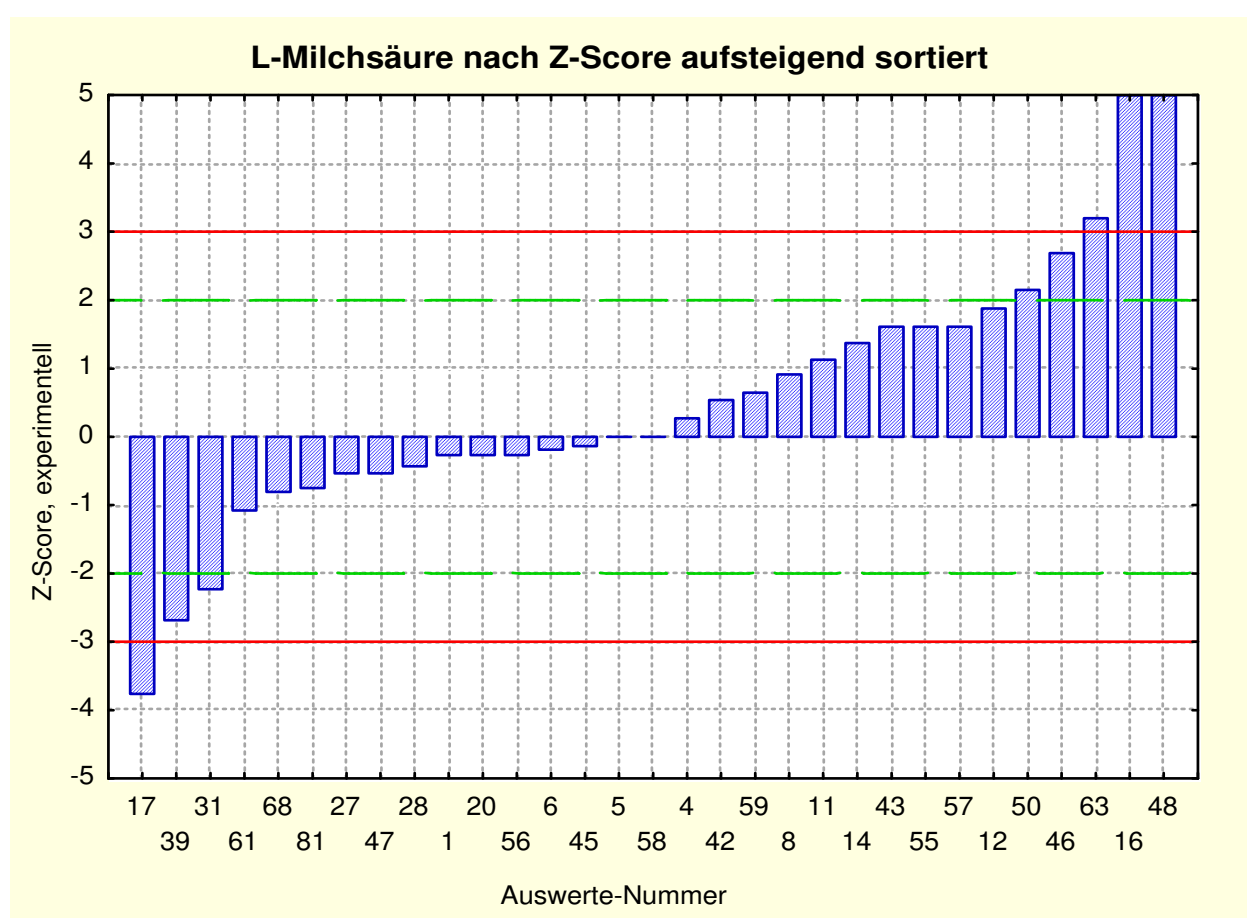
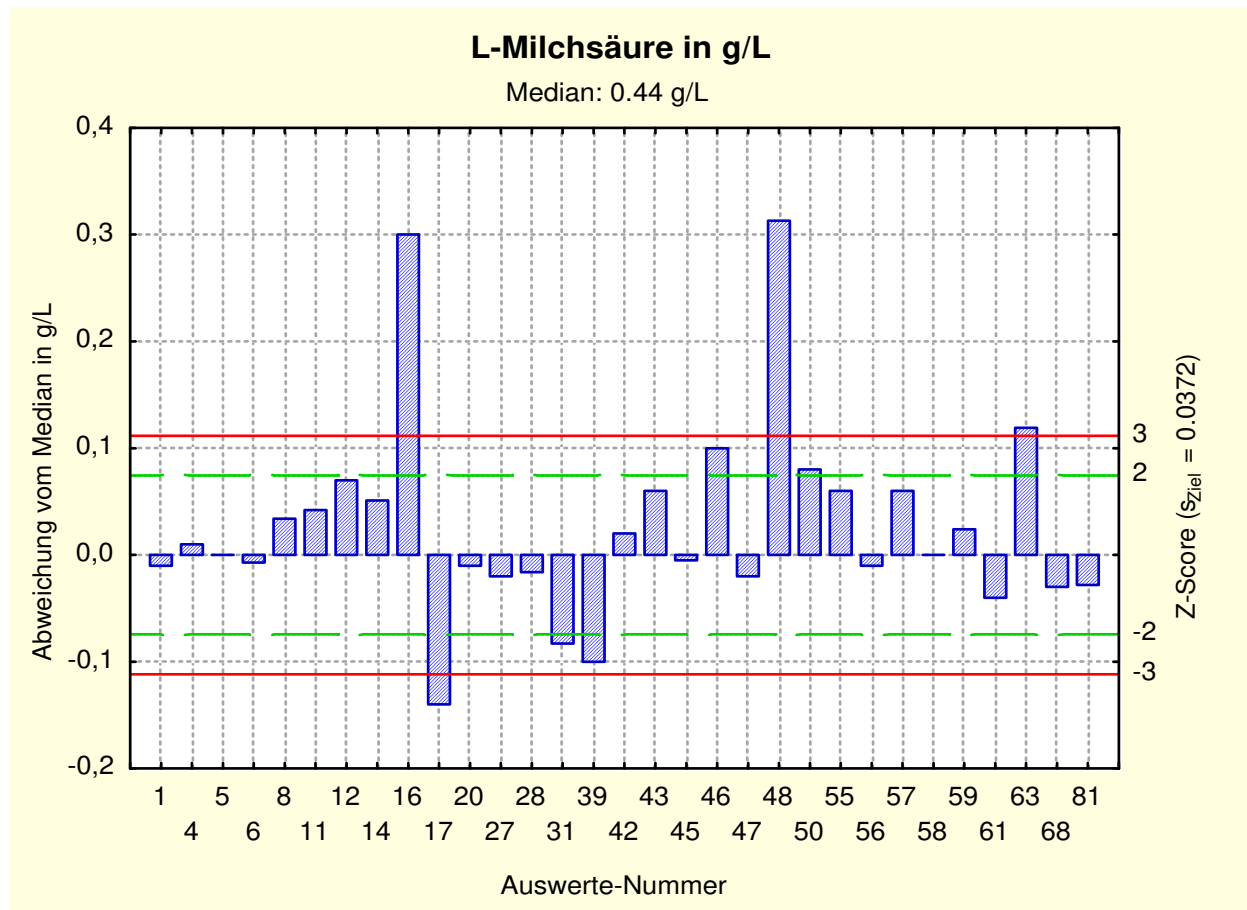
6.18.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L für :	Gesamte Milchsäure				L- Milchsäure alle Daten
	alle Verfahren		Enzymatik		
	alle Werte	ber. Werte	alle Werte	ber. Werte	
Gültige Werte	17	16	10	9	29
Minimalwert	0,43	0,43	0,53	0,53	0,30
Mittelwert	0,591	0,580	0,610	0,591	0,447
Median	0,581	0,581	0,585	0,581	0,440
Maximalwert	0,77	0,70	0,77	0,69	0,56
Standardabweichung (s_L)	0,082	0,069	0,072	0,045	0,057
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,020	0,017	0,023	0,015	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,036	0,036	0,036	0,036	0,028
- experimentell (s_{exp})					0,037
- experimentell ($s_{\bar{U}}$ FTIR)	0,209	0,209	0,209	0,209	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,29	1,94	2,00	1,27	2,04
Quotient (s_L/s_{exp})					1,54
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}}$ FTIR)	0,39	0,33	0,34	0,22	
Quotient (u_M/s_H)	0,56	0,48	0,63	0,42	0,38
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)					0,29
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}}$ FTIR)	0,15	0,08	0,21	0,07	

6.18.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	0,565	0,0973
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	7	0,595	0,0394
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	3	0,604	0,0891
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	17	0,590	0,0753
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	0,463	0,1901
NMR	1H -Kernresonanzspektroskopie	5	0,538	0,0306
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	28	0,456	0,0586
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	3	0,461	0,0788
	alle Verfahren L-Milchsäure	31	0,456	0,0595





6.19 Reduktone [mg/L]

6.19.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Reaktionszeit min	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	5	3,0	-1,00	-1,93	
06	Acetaldehyd/potent.	30	3,0	-1,00	-1,93	
13	Glyoxal/potentiometr.	20	7,0	3,00	5,78	(**)
15	Glyoxal/potentiometr.	25	4,0	0,00	0,00	
17	Glyoxal/Stärke	2	8,0	4,00	7,70	(*)
27	Glyoxal/potentiometr.	25	4,7	0,69	1,33	
28	Propionaldehyd/Stärke	5	3,0	-1,00	-1,93	
31	Glyoxal/Stärke	30	3,0	-1,00	-1,93	
32	Glyoxal/potentiometr.	12	<= 0			
34	Glyoxal/potentiometr.	10	5,0	1,00	1,93	
36	Propionaldehyd/Stärke	20	5,0	1,00	1,93	
40	Glyoxal/potentiometr.	>10	3,6	-0,40	-0,77	
42	Glyoxal/Stärke	10	5,0	1,00	1,93	
44	Glyoxal/Stärke	10	3,0	-1,00	-1,93	
45	Propionaldehyd/Stärke	20	4,0	0,00	0,00	
56	Glyoxal/MTT	5	0,5	-3,50	-6,74	(*)
57	Glyoxal/Stärke	6	5,0	1,00	1,93	
61	photometr.	fehlt	2,0	-2,00	-3,85	
64	Glyoxal/Stärke	5	4,0	0,00	0,00	
67	Glyoxal/potentiometr.	20	4,0	0,00	0,00	
68	Glyoxal/potentiometr.	10	7,3	3,29	6,33	(**)
70	Glyoxal/Stärke	5	14,0	10,00	19,25	(*)
104	Glyoxal/Stärke	5	16,0	12,00	23,10	(*)
133	Glyoxal/potentiometr.	10	6,0	2,00	3,85	
136	Glyoxal/potentiometr.	10	5,0	1,00	1,93	
137	Propionaldehyd/Stärke	15	6,0	2,00	3,85	
142	Acetaldehyd/Stärke	15	4,0	0,00	0,00	
143	Glyoxal/Stärke	4	4,0	0,00	0,00	
146	Glyoxal/Stärke	5	5,0	1,00	1,93	
149	Acetaldehyd/potent.	10	5,0	1,00	1,93	

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

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

Anmerkung:

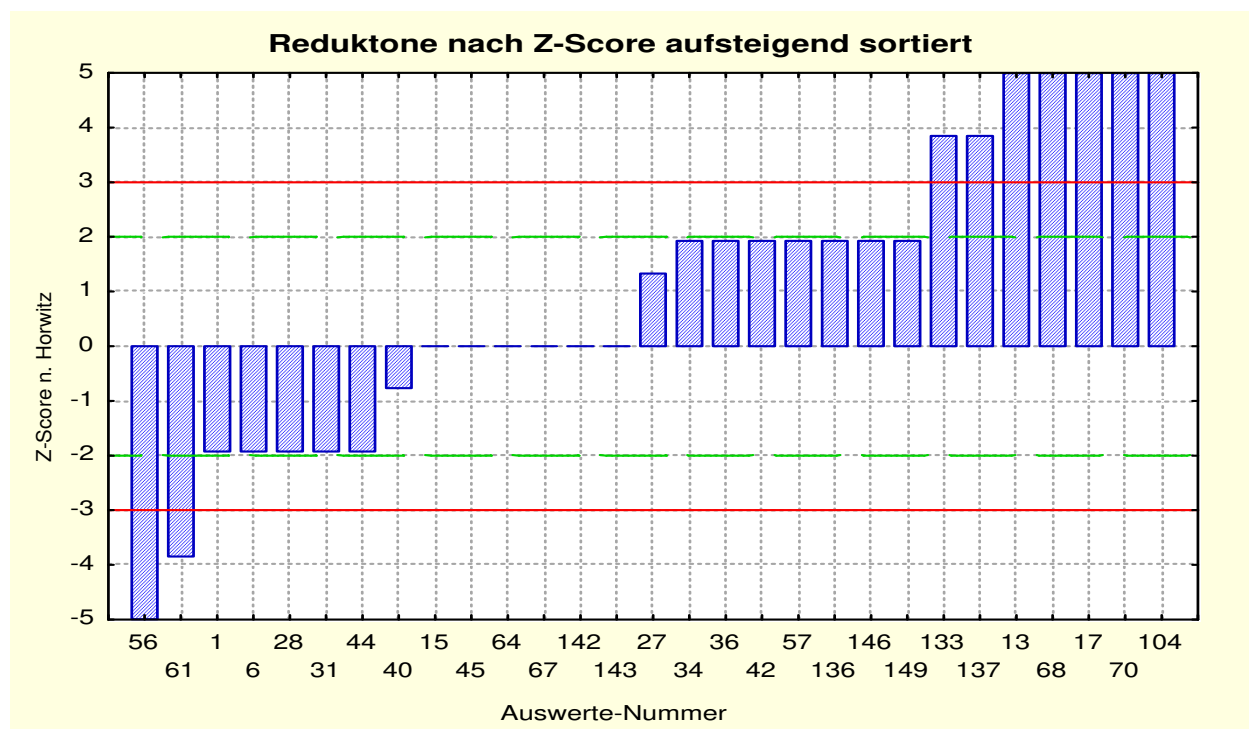
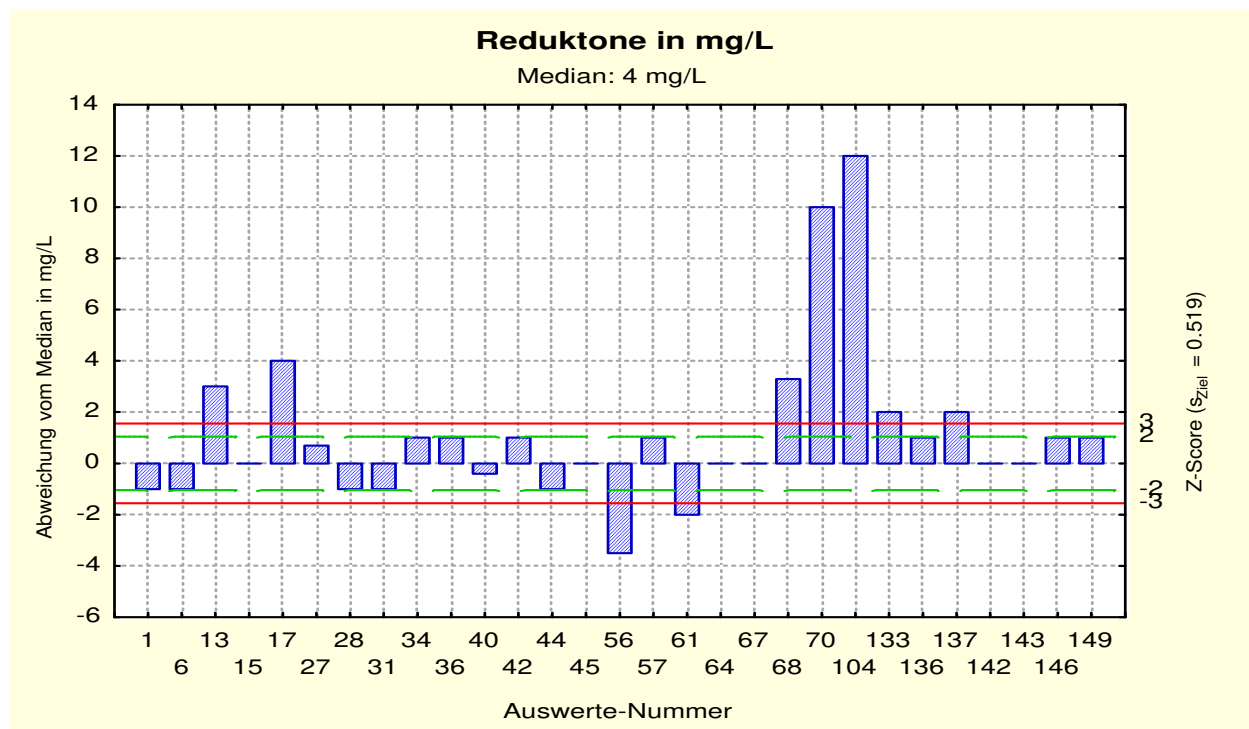
Die in der vorstehenden Tabelle ausgewiesenen Z-Score sind trotz Erfüllung der formalen Gültigkeitsregeln in Anbetracht des hohen Anteiles ausgeschlossener Laborergebnisse, des Erreichens der Höchstwertes für den Quotienten (s_L/s_H) und der eingeschränkten Zuverlässigkeit des Bezugswertes nicht als zuverlässige Bewertung der Laborleistung zu bewerten.

6.19.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone in mg/L	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	25	23
Minimalwert	2,0	2,0
Mittelwert	4,42	4,19
Median	4,00	4,00
Maximalwert	7,3	6,0
Standardabweichung (s_L)	1,291	1,041
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,258	0,217
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,519	0,519
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})		
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,48	2,00
Quotient (s_L/s_{exp})		
Quotient (u_M/s_H)	0,50	0,42
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		

6.19.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	1	4,00	
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	4,00	1,604
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	4	4,50	1,464
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	11	5,43	2,972
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	9	5,17	1,487
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Farbreaktion mit MTT	1	0,50	
photometr.	Photometrie mit MTT (Angabe zur SO ₂ -Bindung fehlt)	1	2,00	
alle Verfahren		29	4,64	1,791



6.20 Freie Schweflige Säure [mg/L]

6.20.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.2	40,0	10,00	3,48	
06	LwK 6.2	28,0	-2,00	-0,70	
07	LwK 6.2	30,4	0,40	0,14	
11	LwK 6.2	28,6	-1,40	-0,49	
12	LwK 6.4	27,0	-3,00	-1,04	
14	LwK 6.3	36,9	6,90	2,40	
29	LwK 6.2	28,2	-1,80	-0,63	
42	LwK 6.3	31,0	1,00	0,35	
45	LwK 6.3	30,0	0,00	0,00	
46	LwK 6.4	23,0	-7,00	-2,43	
47	LwK 6.3	34,0	4,00	1,39	
48	LwK 6.3	45,0	15,00	5,21	(**)
53	LwK 6.3	40,0	10,00	3,48	
55	LwK 6.4	23,0	-7,00	-2,43	
56	LwK 6.4	24,5	-5,50	-1,91	
57	LwK 6.4	26,1	-3,95	-1,37	
61	LwK 6.3	30,0	0,00	0,00	
91	LwK 6.2	31,3	1,30	0,45	
103	LwK 6.2	27,1	-2,90	-1,01	
115	LwK 6.3	39,0	9,00	3,13	
138	LwK 6.3	30,0	0,00	0,00	
203	LwK 6.5	32,3	2,28	0,79	
206	LwK 6.5	21,0	-9,00	-3,13	
207	LwK 6.5	28,2	-1,84	-0,64	
208	LwK 6.5	22,6	-7,42	-2,58	
210	LwK 6.5	25,6	-4,40	-1,53	
212	LwK 6.5	23,0	-7,00	-2,43	
214	LwK 6.5	34,0	4,00	1,39	
220	LwK 6.5	27,0	-3,00	-1,04	
226	LwK 6.5	35,0	5,00	1,74	
238	LwK 6.5	24,0	-6,00	-2,09	
245	LwK 6.5	26,0	-4,00	-1,39	
251	LwK 6.5	34,0	4,00	1,39	
258	LwK 6.5	42,0	12,00	4,17	
262	LwK 6.5	29,0	-1,00	-0,35	
264	LwK 6.5	44,0	14,00	4,87	
280	LwK 6.5	29,0	-1,00	-0,35	
284	LwK 6.5	30,0	0,00	0,00	
338	LwK 6.5	25,0	-5,00	-1,74	
349	LwK 6.5	31,0	1,00	0,35	
363	LwK 6.5	39,0	9,00	3,13	

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

6.20.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone (Basis der Laborergebnismitteilung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
13	LwK 6.1(incl.Red.)	35,0	6,00	2,15	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
16	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
19	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometr. Verfahren wie mitgeteilt; Basis der Laborergebnismitteilung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
26	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,0	5,00	1,79	
27	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,3	-1,66	-0,59	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	5,00	1,79	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-5,00	-1,79	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
33	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
34	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
35	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	40,0	11,00	3,94	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	8,00	2,86	
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
44	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
49	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	10,00	3,58	
51	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
54	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
58	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	9,00	3,22	
59	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,8	4,80	1,72	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	8,00	2,86	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,6	-2,44	-0,87	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,0	-11,00	-3,94	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,0	5,00	1,79	
76	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
77	Redox incl.	26,0	-3,00	-1,07	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
92	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
95	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
104	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
111	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
112	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	8,00	2,86	
113	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
114	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
116	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
117	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
118	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
119	LwK 6.1 (incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
120	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
121	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
122	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	6,00	2,15	
123	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,1	-0,90	-0,32	
124	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
125	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
126	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
127	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	
128	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
129	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
130	LwK 6.1 (incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
131	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
132	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,6	-2,40	-0,86	
133	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	
134	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
135	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	11,00	3,94	
136	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
137	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	1,00	0,36	
139	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-8,00	-2,86	

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometr. Verfahren wie mitgeteilt; Basis der Laborergebnismitteilung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
140	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
141	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	0,00	0,00	
142	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-4,00	-1,43	
143	LwK 6.1(incl.Red.)	32,1	3,10	1,11	
144	LwK 6.1(incl.Red.)	25,5	-3,50	-1,25	
145	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
146	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	7,00	2,50	
147	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	2,00	0,72	
148	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
149	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	4,00	1,43	
150	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	
151	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-3,00	-1,07	
152	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-1,00	-0,36	
153	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-2,00	-0,72	

6.20.3 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,00	0,00	0,00	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-2,00	-0,74	-0,72	
16	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-1,00	-0,37	-0,36	
17	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	-7,00	-2,58	-2,50	
27	LwK 6.1(excl.Red.)	22,6	-5,35	-1,97	-1,91	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	34,0	6,00	2,21	2,15	
31	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-1,00	-0,37	-0,36	
34	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-2,00	-0,74	-0,72	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	40,0	12,00	4,42	4,29	
37	LwK 6.1(excl.Red.)	37,0	9,00	3,32	3,22	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	1,00	0,37	0,36	
40	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	5,00	1,84	1,79	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	29,0	1,00	0,37	0,36	
44	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	-3,00	-1,11	-1,07	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	5,00	1,84	1,79	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	3,00	1,11	1,07	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	26,6	-1,44	-0,53	-0,52	
70	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-10,00	-3,69	-3,58	
104	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	-1,00	-0,37	-0,36	
125	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	3,00	1,11	1,07	
133	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	2,00	0,74	0,72	
136	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-2,00	-0,74	-0,72	
137	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	-4,00	-1,47	-1,43	
142	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	-7,00	-2,58	-2,50	
143	LwK 6.1(excl.Red.)	28,1	0,10	0,04	0,04	
146	LwK 6.1(excl.Red.)	31,0	3,00	1,11	1,07	
149	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	0,00	0,00	0,00	
151	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	-2,00	-0,74	-0,72	

Methodenkode **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteiltMethodenkode **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet

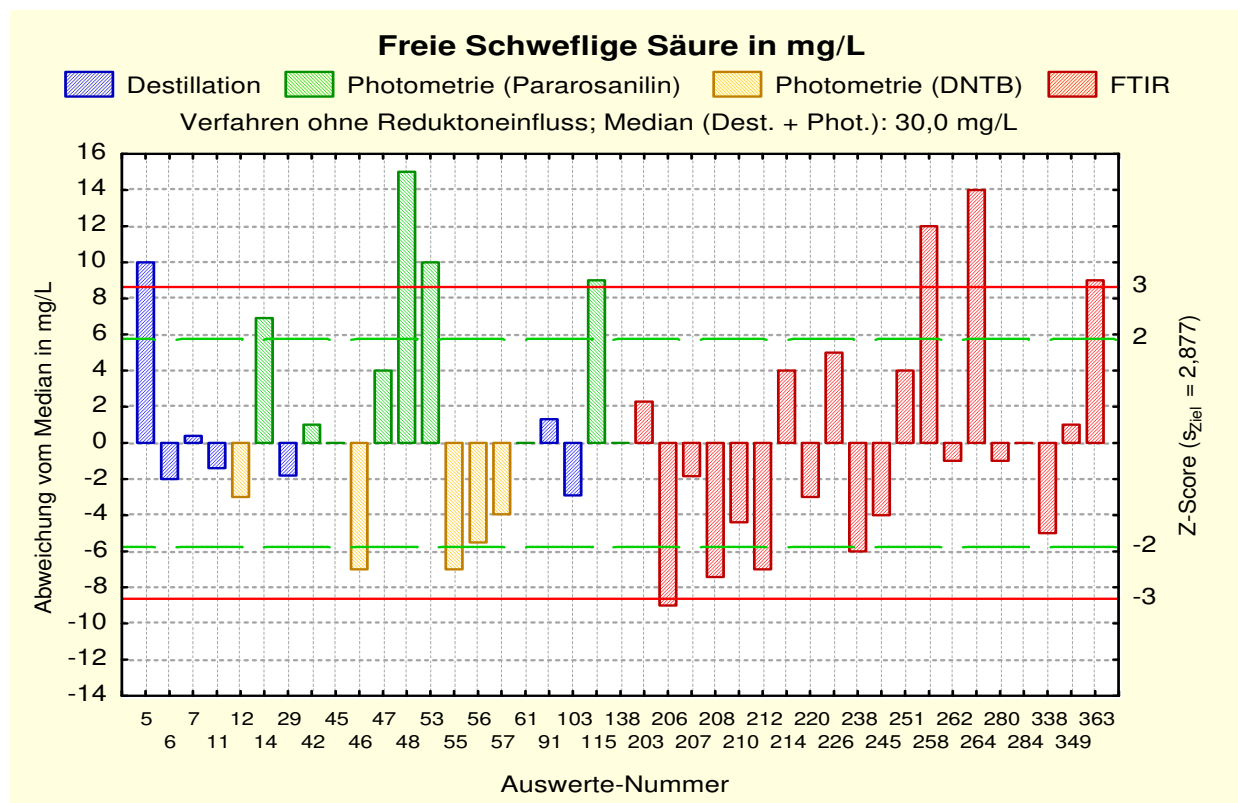
SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus dem Median der Werte einschließlich Reduktone

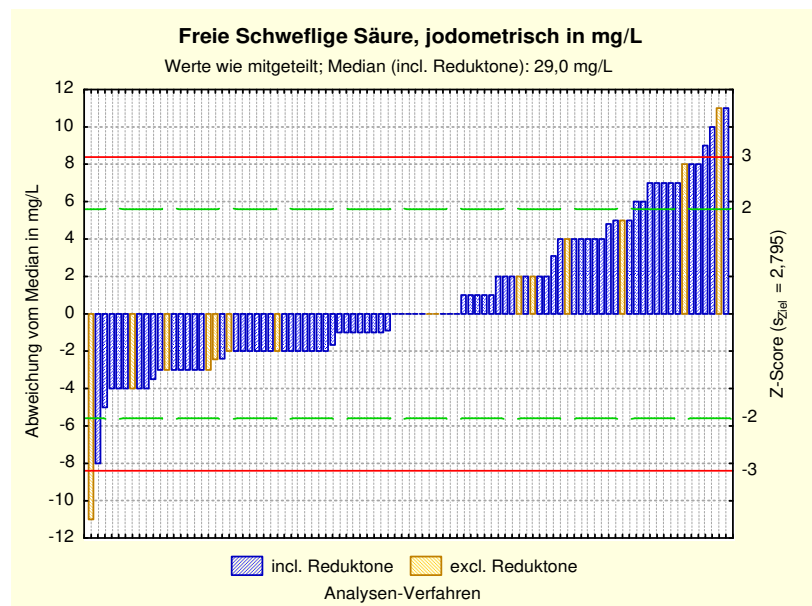
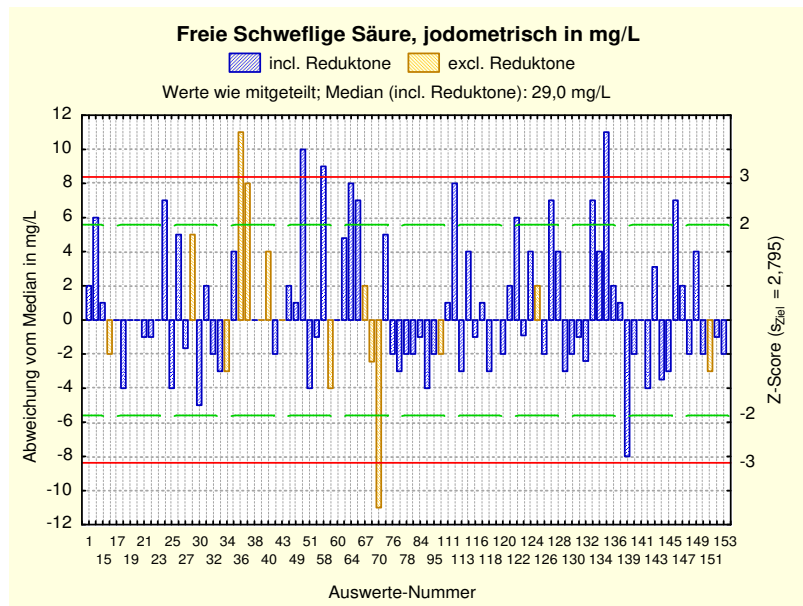
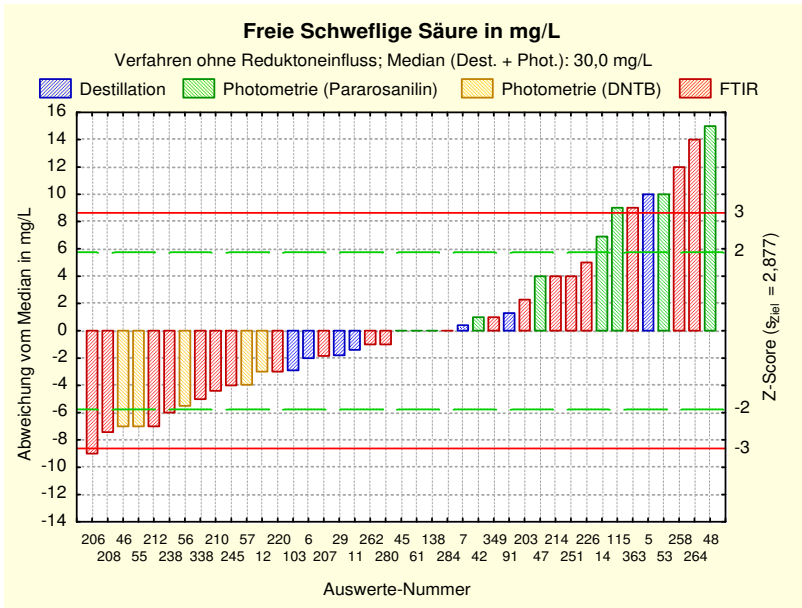
6.20.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation	Destillation,+ Photometrie	jodometrisch Reduktone		
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	7	21	20	78	31
Minimalwert	27,1	23,0	23,0	21,0	18,0
Mittelwert	30,51	31,10	30,40	29,76	28,04
Median	28,60	30,00	30,00	29,00	28,00
Maximalwert	40,0	45,0	40,0	40,0	40,0
Standardabweichung (s _L)	4,427	5,990	5,205	3,969	4,534
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,673	1,307	1,164	0,449	0,814
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	2,762	2,877	2,877	2,795	2,713
- n. Horwitz incl. Reduktone (s _H incl. Red.)					2,795
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,60	2,08	1,81	1,42	1,67
Quotient (s _L /s _{exp})					1,62
Quotient (u _M /s _H)	0,61	0,45	0,40	0,16	0,30
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)					0,29

6.20.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl. Red.)	ohne Abzug der Reduktone	77	29,62	3,941
(excl. Red.)	mit Abzug der Reduktone	15	29,33	4,922
Basis erweitert	mit Abzug der Reduktone einschließlich nachberechnete Werte	31	27,94	3,938
Redox	Elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und			
(incl. Red.)	der Redoxelektrode ORP ohne Abzug der Reduktone	1	26,00	
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	29,55	2,485
LwK 6.3	Pararosanilinmethode (auch automatisiert)	9	34,96	5,845
LwK 6.4	photometrisch mit DNTB (auch automatisiert)	5	24,71	2,039
	Destillations- und photometrische Verfahren	21	30,86	6,128
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	20	29,72	6,450
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	41	30,29	6,251





6.21 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]**6.21.1 Laborergebnisse (Verfahren ohne Reduktoneinfluß)**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	143,0	19,00	1,98	3,55	
05	LwK 7.3	136,5	12,48	1,30	2,33	
06	LwK 7.3	115,0	-9,00	-0,94	-1,68	
07	LwK 7.3	126,4	2,40	0,25	0,45	
11	LwK 7.3	119,5	-4,50	-0,47	-0,84	
12	LwK 7.4.2	125,0	1,00	0,10	0,19	
13	LwK 7.3	129,0	5,00	0,52	0,93	
14	LwK 7.4.2	120,0	-4,00	-0,42	-0,75	
15	LwK 7.4.2	128,0	4,00	0,42	0,75	
21	LwK 7.4.2	118,0	-6,00	-0,62	-1,12	
22	LwK 7.4.2	122,0	-2,00	-0,21	-0,37	
24	LwK 7.4.2m	110,0	-14,00	-1,46	-2,61	
29	LwK 7.3	137,1	13,10	1,36	2,45	
31	LwK 7.4.1	124,0	0,00	0,00	0,00	
35	LwK 7.4.1	125,0	1,00	0,10	0,19	
38	LwK 7.4.1	110,2	-13,80	-1,44	-2,58	
39	LwK 7.7	133,0	9,00	0,94	1,68	
40	LwK 7.4.2	123,0	-1,00	-0,10	-0,19	
41	LwK 7.4.1	125,0	1,00	0,10	0,19	
42	LwK 7.7	123,0	-1,00	-0,10	-0,19	
43	LwK 7.4.2	128,0	4,00	0,42	0,75	
45	LwK 7.4.2	129,0	5,00	0,52	0,93	
46	LwK 7.7	128,0	4,00	0,42	0,75	
47	LwK 7.4.2	140,0	16,00	1,67	2,99	
48	LwK 7.7	148,0	24,00	2,50	4,48	
49	LwK 7.4.2	123,0	-1,00	-0,10	-0,19	
50	LwK 7.7	7,0	-117,00	-12,18	-21,84	(*)
52	LwK 7.4.1	132,0	8,00	0,83	1,49	(**)
53	LwK 7.7	138,0	14,00	1,46	2,61	
54	LwK 7.8	121,0	-3,00	-0,31	-0,56	
55	LwK 7.7	127,0	3,00	0,31	0,56	
56	LwK 7.7	123,3	-0,70	-0,07	-0,13	
57	LwK 7.4.2	117,0	-7,00	-0,73	-1,31	
58	LwK 7.4.2	138,0	14,00	1,46	2,61	
61	LwK 7.6	119,0	-5,00	-0,52	-0,93	
63	LwK 7.4.2	118,0	-6,00	-0,62	-1,12	
81	LwK 7.4.1	118,0	-6,00	-0,62	-1,12	
88	LwK 7.4.2	124,0	0,00	0,00	0,00	
91	LwK 7.3	128,6	4,60	0,48	0,86	
93	LwK 7.4.2	117,0	-7,00	-0,73	-1,31	
97	LwK 7.4.2	118,0	-6,00	-0,62	-1,12	
99	LwK 7.4.2	132,0	8,00	0,83	1,49	
102	LwK 7.4.1	136,0	12,00	1,25	2,24	
103	LwK 7.3	126,9	2,90	0,30	0,54	
113	LwK 7.3	125,0	1,00	0,10	0,19	
115	LwK 7.6	138,0	14,00	1,46	2,61	
116	LwK 7.4.2	122,0	-2,00	-0,21	-0,37	
123	LwK 7.4.2	124,0	0,00	0,00	0,00	
125	IFU 7	126,0	2,00	0,21	0,37	
128	LwK 7.4.2	134,0	10,00	1,04	1,87	
138	LwK 7.7	128,5	4,50	0,47	0,84	
147	LwK 7.4.1	119,0	-5,00	-0,52	-0,93	
148	LwK 7.4.2	114,0	-10,00	-1,04	-1,87	
151	LwK 7.1	124,0	0,00	0,00	0,00	
152	LwK 7.4.2	131,0	7,00	0,73	1,31	
153	LwK 7.4.2	114,0	-10,00	-1,04	-1,87	
203	LwK 7.8	124,2	0,17	0,02	0,03	
206	LwK 7.8	129,0	5,00	0,52	0,93	

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

Laut Korrekturmitteilung des Teilnehmers während der Auswertung: richtig 123,0 mg/L. Damit ergeben sich eine Abweichung von -1,00 und $Z_H = -0,10$ bzw. $Z_{exp} = -0,19$. Diese Werte wurden in den Graphiken verwendet.

(**) Das Ergebnis wurde ausnahmsweise bei den statistischen Berechnungen nicht berücksichtigt.

Fortsetzung: Laborergebnisse (Verfahren ohne Reduktoneinfluß)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
207	LwK 7.8	131,3	7,26	0,76	1,36	
208	LwK 7.8	124,9	0,86	0,09	0,16	
209	FTIR(direkt)	124,0	0,00	0,00	0,00	
210	LwK 7.8	138,0	14,00	1,46	2,61	
212	LwK 7.8	139,0	15,00	1,56	2,80	
214	LwK 7.8	131,0	7,00	0,73	1,31	
220	LwK 7.8	113,0	-11,00	-1,15	-2,05	
226	LwK 7.8	147,0	23,00	2,39	4,29	
238	LwK 7.8	119,0	-5,00	-0,52	-0,93	
245	LwK 7.8	132,0	8,00	0,83	1,49	
251	LwK 7.8	119,0	-5,00	-0,52	-0,93	
258	LwK 7.8	149,0	25,00	2,60	4,67	
262	LwK 7.8	119,0	-5,00	-0,52	-0,93	
264	LwK 7.8	166,0	42,00	4,37	7,84	(**)
280	LwK 7.8	144,0	20,00	2,08	3,73	
284	LwK 7.8	155,0	31,00	3,23	5,79	(**)
338	LwK 7.8	122,0	-2,00	-0,21	-0,37	
349	LwK 7.8	133,0	9,00	0,94	1,68	
363	LwK 7.8	138,0	14,00	1,46	2,61	

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.

6.21.2 Laborergebnisse (jodometrische Verfahren; Werte wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone
(Basis der Laborergebnismitteilung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	5,50	0,56	1,03	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-19,50	-1,97	-3,64	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,0	-5,50	-0,56	-1,03	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	6,50	0,66	1,21	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	-3,50	-0,35	-0,65	
26	LwK 7.5.2(incl. Red.)	138,0	9,50	0,96	1,77	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	131,0	2,49	0,25	0,46	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	137,0	8,50	0,86	1,59	
30	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	-8,50	-0,86	-1,59	
32	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	
33	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	-13,50	-1,36	-2,52	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	133,0	4,50	0,45	0,84	
36	LwK 7.5.2(incl. Red.)	145,0	16,50	1,67	3,08	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	154,0	25,50	2,58	4,76	
44	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	4,50	0,45	0,84	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	-3,50	-0,35	-0,65	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,4	2,90	0,29	0,54	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	135,0	6,50	0,66	1,21	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	141,0	12,50	1,26	2,33	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	9,50	0,96	1,77	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,0	2,50	0,25	0,47	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	133,0	4,52	0,46	0,84	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	0,50	0,05	0,09	
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,0	-5,50	-0,56	-1,03	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	138,0	9,50	0,96	1,77	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
95	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,0	-8,50	-0,86	-1,59	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	0,50	0,05	0,09	
104	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,0	-11,50	-1,16	-2,15	
111	LwK 7.5.1(incl. Red.)	137,0	8,50	0,86	1,59	
112	LwK 7.5.1(incl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	

Fortsetzung: Laborergebnisse (jodometr. Verfahren wie mitgeteilt; Basis der Laborergebnismitteilung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
114	LwK 7.5.1(incl. Red.)	136,0	7,50	0,76	1,40	
117	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
118	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	-6,50	-0,66	-1,21	
119	LwK 7.5.1(incl. Red.)	131,0	2,50	0,25	0,47	
120	LwK 7.5.2(incl. Red.)	125,0	-3,50	-0,35	-0,65	
121	LwK 7.5.1(incl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
122	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	6,50	0,66	1,21	
124	LwK 7.5.1(incl. Red.)	138,0	9,50	0,96	1,77	
126	LwK 7.5.2(incl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
127	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	11,50	1,16	2,15	
129	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
130	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	
131	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	-6,50	-0,66	-1,21	
132	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,2	-5,30	-0,54	-0,99	
133	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	11,50	1,16	2,15	
134	LwK 7.5.2(incl. Red.)	143,0	14,50	1,46	2,71	
135	LwK 7.5.2(incl. Red.)	120,0	-8,50	-0,86	-1,59	
136	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
137	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	-2,50	-0,25	-0,47	
139	LwK 7.5.2(incl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
140	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	-1,50	-0,15	-0,28	
141	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
142	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,0	-4,50	-0,45	-0,84	
143	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	0,50	0,05	0,09	
144	LwK 7.5.1(incl. Red.)	131,0	2,50	0,25	0,47	
145	LwK 7.5.1(incl. Red.)	130,0	1,50	0,15	0,28	
146	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,0	3,50	0,35	0,65	
149	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	4,50	0,45	0,84	
150	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-0,50	-0,05	-0,09	

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
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	6,00	0,61	1,12	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	118,0	-10,00	-1,01	-1,87	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,3	-1,70	-0,17	-0,32	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	137,0	9,00	0,91	1,68	
32	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	0,00	0,00	0,00	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	133,0	5,00	0,51	0,93	
36	LwK 7.5.2(excl. Red.)	140,0	12,00	1,22	2,24	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	154,0	26,00	2,64	4,85	
44	LwK 7.5.1(excl. Red.)	130,0	2,00	0,20	0,37	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,4	3,40	0,34	0,63	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	137,0	9,00	0,91	1,68	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,0	3,00	0,30	0,56	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	133,0	5,02	0,51	0,94	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	126,0	-2,00	-0,20	-0,37	
104	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,0	-11,00	-1,11	-2,05	
133	LwK 7.5.1(excl. Red.)	134,0	6,00	0,61	1,12	
136	LwK 7.5.1(excl. Red.)	121,0	-7,00	-0,71	-1,31	
137	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	-8,00	-0,81	-1,49	
142	LwK 7.5.1(excl. Red.)	120,0	-8,00	-0,81	-1,49	
143	LwK 7.5.1(excl. Red.)	125,0	-3,00	-0,30	-0,56	
146	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,0	-1,00	-0,10	-0,19	
149	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	0,00	0,00	0,00	

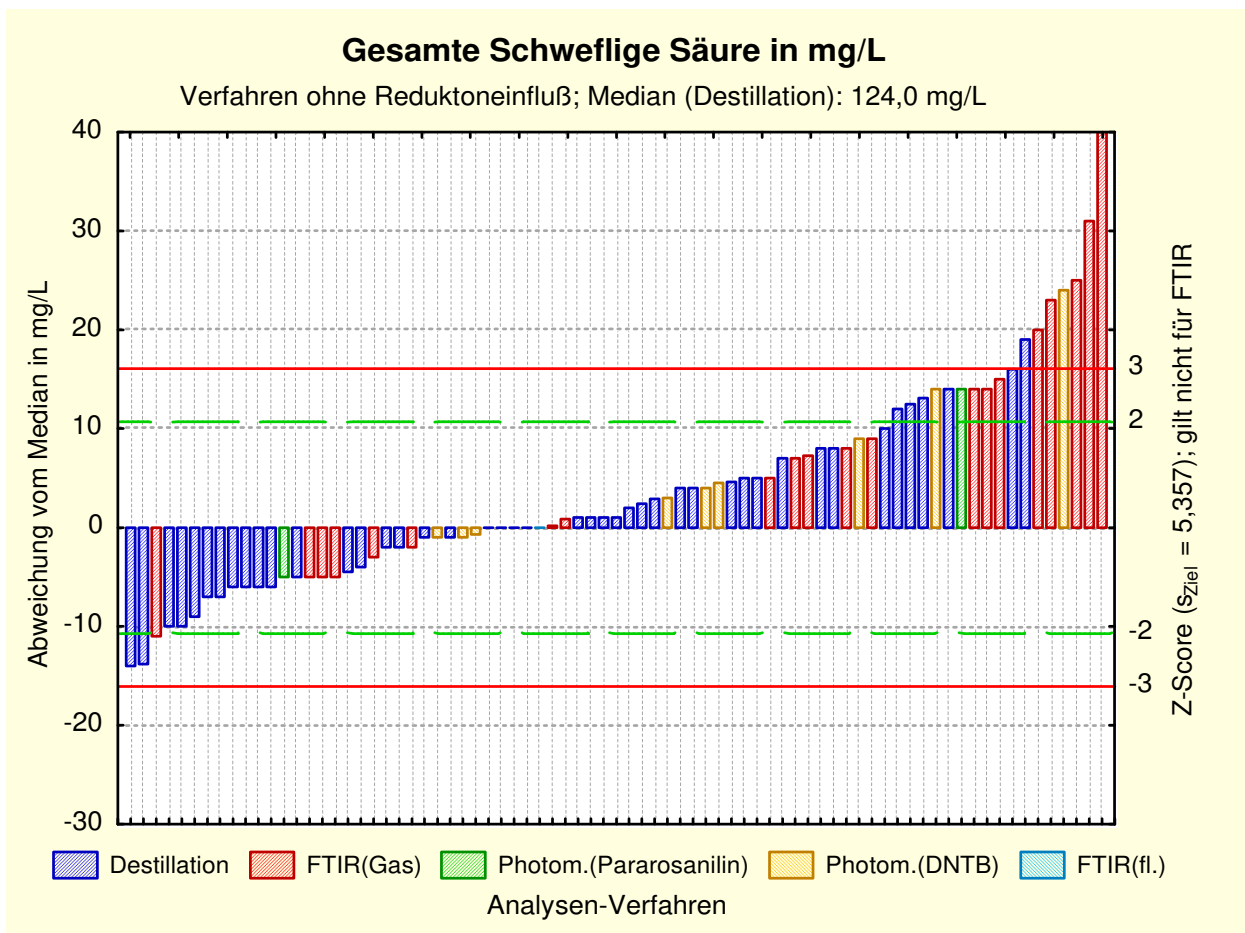
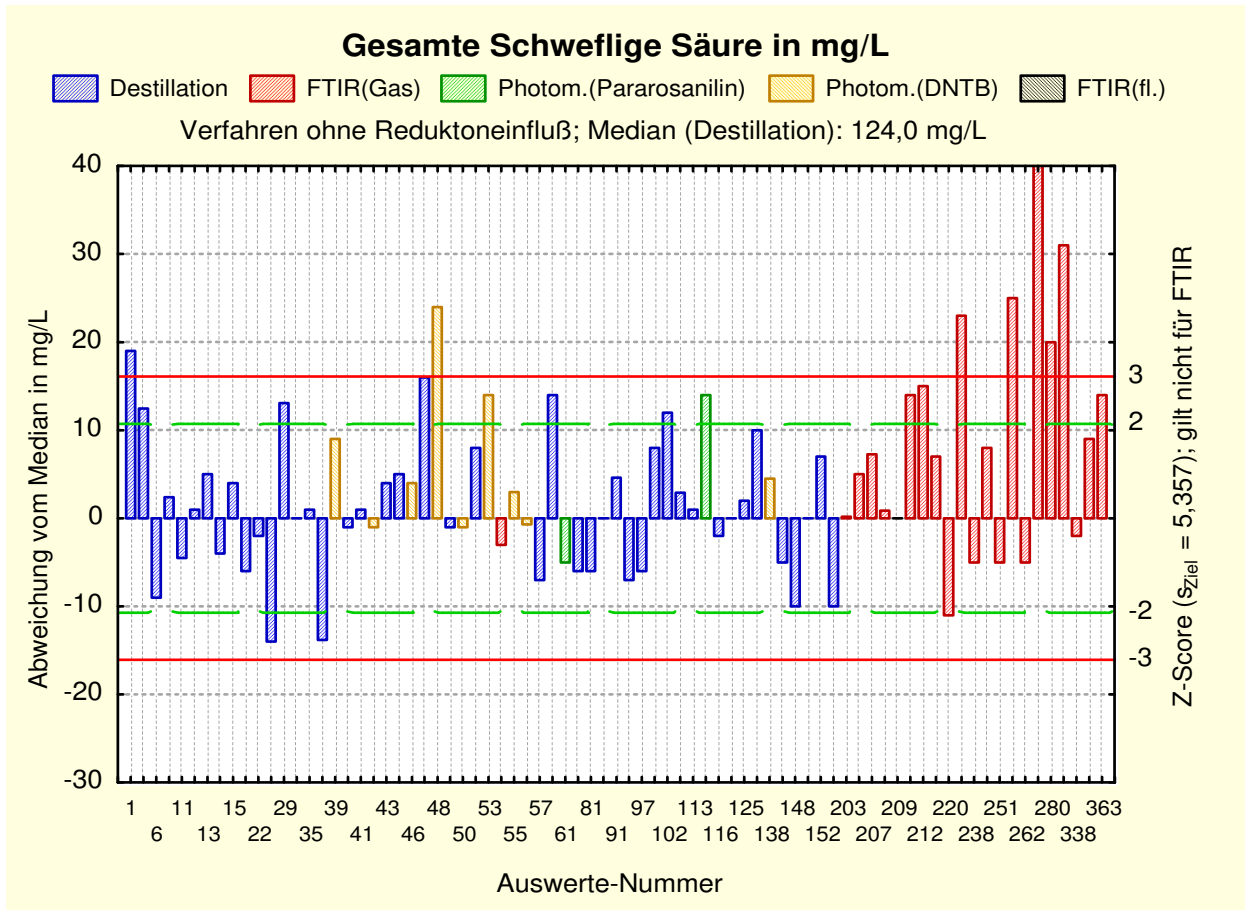
Methodenkode **blaue Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteiltMethodenkode **schwarze Schrift**: Wert vom Auswerter nachberechnet

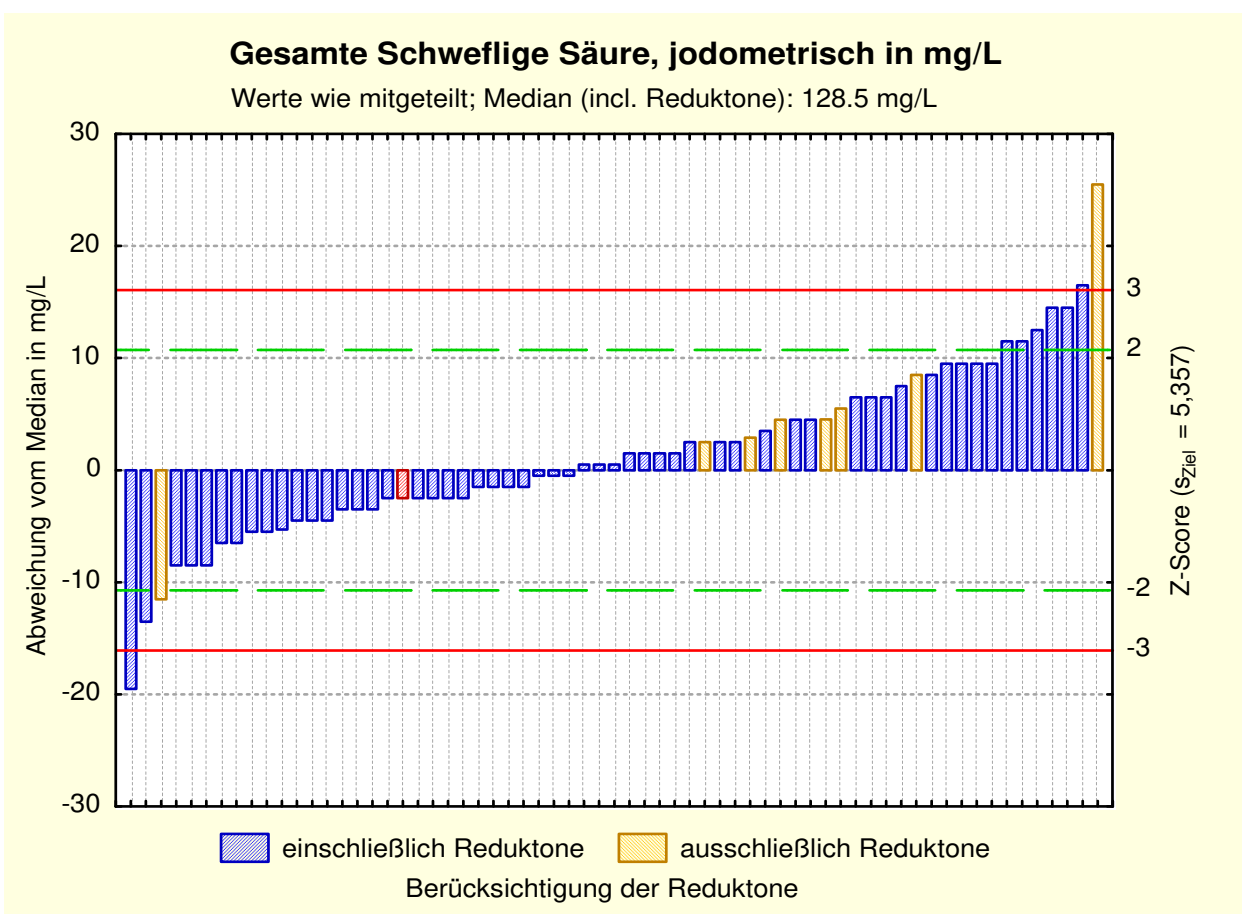
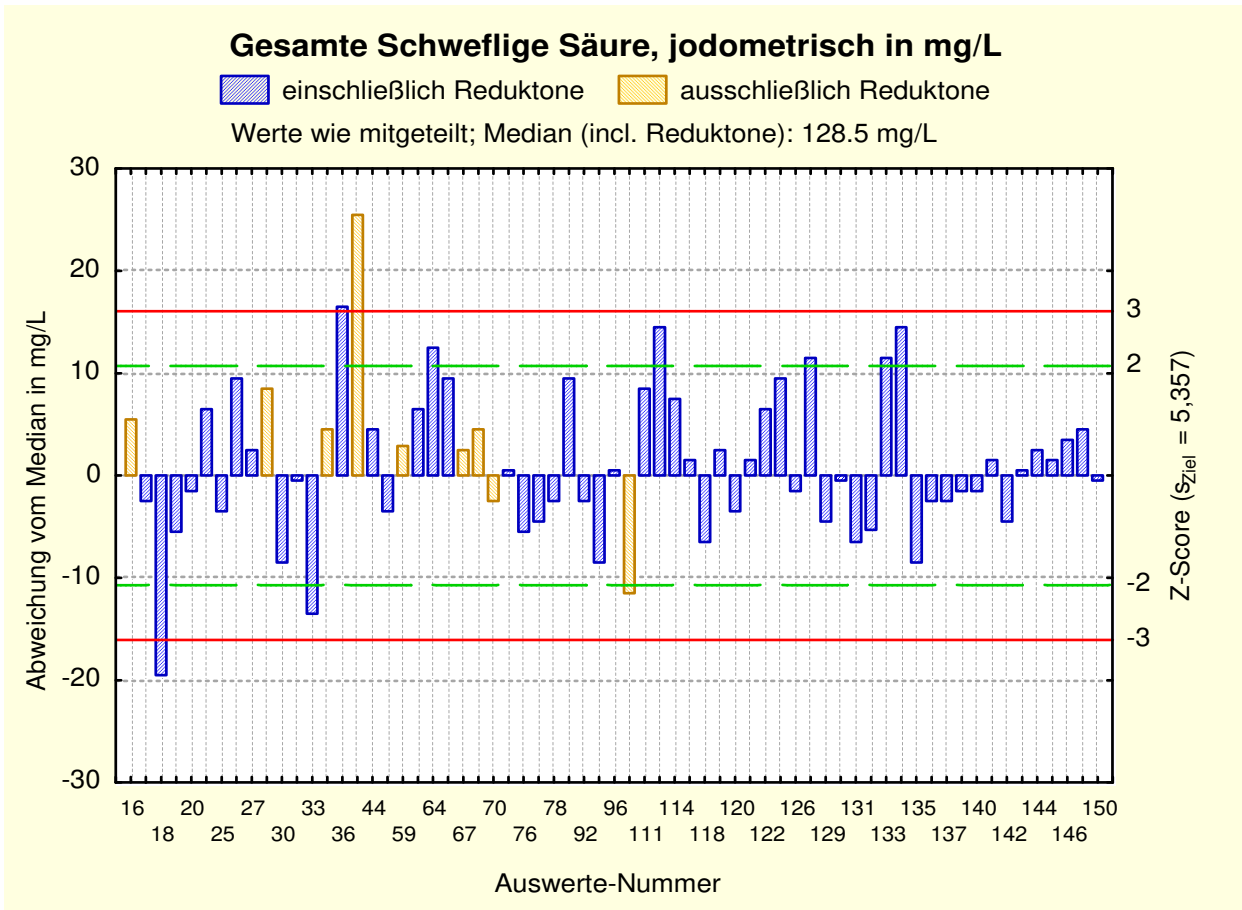
6.21.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillation		Jodometrie	
	incl. Reduktone		excl. Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	alle Daten	ber. Daten $z_{\text{Max}} 4,5$
Gültige Werte	43	56	22	21
Minimalwert	110,0	109,0	117,0	117,0
Mittelwert	124,73	129,40	129,58	128,42
Median	124,00	128,50	129,00	128,00
Maximalwert	143,0	145,0	154,0	140,0
Standardabweichung (s_L)	7,839	7,207	8,420	6,573
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	1,195	0,963	1,795	1,434
Zielstandardabweichung				
- n. Horwitz (s_H)	9,604	9,899	9,932	9,867
- experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,82	0,73	0,85	0,67
Quotient (s_L/s_{exp})	1,46	1,35	1,57	1,23
Quotient (u_M/s_H)	0,12	0,10	0,18	0,15
Quotient ($u_M/s_{\text{exp herk.}}$)	0,22	0,18	0,34	0,27

6.21.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	1	124,00	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	127,08	7,70
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	7	122,47	8,76
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	24	124,65	8,16
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein modifiziert	1	110,00	
IFU 7	Intern. Fruchtsaftunion Nr. 7	1	126,00	
	alle Destillationsverfahren	43	124,56	8,06
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	43	128,50	6,44
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	10	131,80	8,82
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	135,78	7,49
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktionabzug	56	129,42	7,11
	wie mitgeteilt:			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktionabzug	8	133,24	4,94
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	126,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktionabzug	9	132,21	6,26
	Basis erweitert:			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktionabzug	19	128,04	7,38
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktionabzug	1	140,00	
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	2	131,50	8,82
	mit Abzug der Reduktone einschl. nachberechnete Werte	22	128,99	7,62
LwK 7.6	Pararosanilinverfahren	2	128,50	15,24
LwK 7.7	DNTB-Verfahren (z. B. FOSS FIAStar)	9	128,69	9,92
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	21	132,30	13,49
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Flüssigkeit	1	124,00	





6.22 Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
1	Aussehen: blassgelbe, blanke Flüssigkeit; Geruch: weinig, mineralisch, gering fruchtig; Geschmack: Restsüße, leicht säuerlich, im Abgang etwas dünn, handelsüblich
13	QZ 2,83; reife Noten, Nase verschwommen, leichte Bitternote
14	beginnender UTA, sehr reif, etwas dumpf, Geruch nach Marzipan, wenig Körper; Der Wein ist im Hinblick auf eine Erteilung der A.P.Nr. sehr kritisch zu betrachten.
15	Der Wein hat UTA
16	1,0 Punkte grob fehlerhaft
17	Der Wein riecht grau und dumpf; Im Geschmack wirkt er sehr gereift, fast firm; Das Süße-Säure-Verhältnis ist unharmonisch.
18	Der Wein zeigt im Geruch leichte Reife/Alterungsnoten. Evtl. ein Fall von aufkommendem UTA
19	technisch einwandfrei, ohne Beanstandung
20	in der Nase etwas SO ₂ , etwas müde/breit, für 2017er bereits erkennbar gereift, schwache UTA, evtl. Riesling/Müller-Thurgau Cuvée
22	Geruch: unsauber, dumpf, muffig, Pilznote, dezent flüchtige Säure; Geschmack: ok, klein, leicht säuerlich; 1,8Punkte
23	schon sehr reif, flüchtige sensorisch wahrnehmbar
24	Farbe: blass bis leicht grüngelb, blank; Bukett: dezente Frucht-Noten, leicht aromatisch, fehlerfrei; Geschmack: leicht fruchtig, aromatisch, dezent säurebetont, fehlerfrei; Punktzahl der Sensorik: 3,0
25	die Probe hat leicht UTA. Ist ansonsten Rund und harmonisch 2,5 Punkte (von 5 Punkten LWK).
26	2,0 Pkt
27	Die Weinprobe hat UTA
29	unsauber im Geruch, evtl. Bockser und leichte Alterungsnote, Geschmack ok mit Anflug von Petrol
30	sauber, fehlerfrei
32	deutliche UTA - keine AP - QZ 1,0
33	firm, flüchtige Säure, muffig, leicht Champignon, breit
35	Sensorik: Aussehen: klar, schwach gelb; Geruch: dumpf, wenig Frucht, gereift; Geschmack: wenig Frucht, dünn, wenig Extrakt, leicht bitter.
37	Geruch: keine klare Frucht- Esterverbindungen wahrnehmbar; Geschmack: flüchtige Säure wahrnehmbar- extraktarmer Wein- unharmonische Säure; Gesamteindruck: Wein ist schon weit entwickelt
38	leicht fruchtig, fehlerfrei, in Ordnung
39	Der Wein hat eine untypische Alterungsnote
42	Geruch nach Akazie, strenge Blüten, Honigmelone, unharmonisches Süße-Säure-Verhältnis
43	wirkt sehr reif, alt, etwas Bohnerwachs. Prüfstelle: 1,0
44	2017 Mosel QW diverse Rebsorten QW: nicht moseltypisch, leichter Anflug von UTA, zeigt wenig Frucht, etwas dumpfe Nase. Im Mund ist die Säure gut spürbar aber nicht zu spitz. Im Abgang wirkt der Wein etwas bitter. Wir würden dem Wein eine Gesamtpunktzahl von 1,5 geben.
46	UTA sehr präsent - hohe Wahrscheinlichkeit der Ablehnung
47	UTA sehr präsent
50	untypische Alterungsnote
51	Gereift, leicht oxidativ, angenehme Säure, gelbe Früchte, im Abgang leicht muffig, anhaltende Gerbstoffe.
54	ohne Beanstandung
56	Reif, leicht hängend, kleine Säurekante; 1,83 Punkte.
57	Der Wein besitzt in der Nase deutliche Alterungstöne, die nach Luftkontakt verstärkt werden. Weiterhin sind keine Fruchtaromen, jedoch ein deutlicher Lösungsmittelton vorhanden. Im Geschmack ist er klein mit einer unharmonischen, spitzen Säure. Auch im Geschmack ist ein untypischer Alterungsston durch ein unsauberer Geschmackempfinden zu erkennen.
58	im Geruch leicht Fruchtester, süßlich, pikante Säure, unharmonisch, im Abgang etwas stumpf;
76	Geruch: 1,5 Punkte Ester; Geruch: 2,0 Punkte; Harmonie: 2,0 Punkte
77	Geruch: 2,0 Punkte Ester; Geschmack: 2,0 Punkte beginnende UTA; Harmonie: 2,0 Punkte
78	grüngelbe Reflexe; leichter Beginn von UTA, vegetative Aromen, grüner Apfel, etwas medizinisch; unkomplizierter geradliniger Gesamteindruck, unharmonisches Säureempfinden am Gaumenfinish
111	Der Wein ist sensorisch in Ordnung 3 Punkte
112	Aussehen: typisch, blank; Geruch: leicht fruchtig, typisch; Geschmack: kräftig, nicht ganz frisch, fruchtig; Bewertung: 2,0 / 2,3 / 2,3
116	gut, in Ordnung
117	ausdruckloser Wein, geringe Qualität
119	Geruch: 2,0 Punkte; Geschmack: 2,6 Punkte; Harmonie: 2,5 Punkte; Qualitätszahl: 2,37 Punkte
120	Der Wein hat eine leichte Alterungsnote u. wäre im Bereich des Punkteschemas der Qualitätsweinprüfung zwischen 1,5 bis 2,0 einzugliedern.
122	Ester/Klebstoff-Note in Geruch und Geschmack; keine Prüfnummer erteilt

Fortsetzung: Sensorische Befunde

Auswerte- Nummer	Beschreibung des sensorischen Befundes und Bewertung der Bezeichnung
123	Aussehen: klar, hell mit gelben Reflexen; Geruch:stumpf, verschlossen, Tendenz zu Petrol- und UTA-Note; Geschmack: halbtrocken, dezent gelbfruchtig mit Zitrusnoten, markante Säure, im Abgang bitter, leichte beginnende Reife, phenolische Note; Punktezah: (unter Berücksichtigung der Jahrgangsproblematik) 1,75
124	ohne Befund, da allergiebedingt keine objektive Probe möglich.
125	es handelt sich um einen kleinen, dünnen Wein mit erhöhter flüchtiger Säure. Qualitätszahl: 2,5 Punkte
126	leichter Muffton
127	Aussehen: typisch, blank; Geruch: leicht fruchtig, typisch; Geschmack: kräftig, nicht ganz frisch, fruchtig; Bewertung: 2,0 / 2,3 / 2,3
128	fruchtig, sauber, etwas alt
129	bei der Probe handelt es sich um einen kleinen, dünnen Wein mit erhöhter Flüchtiger Säure!
130	Punktzahl: 1,87. Der Duft ist wenig ausgeprägt, im Geschmack etwas unsauber, keine schöne Frucht und nicht sehr einladend.
131	keine Beanstandung
132	sauber, ordentlich
133	Es ist ein sehr einfacher Weißwein, der kaum einen Körper aufweist. Im Geschmack ist der Wein bitter und ausdruckslos. Punktzahl 1,67
135	viel Säure, Beginn UTA, Ton: alt
136	leichter Alterungston in der Nase, gehaltvoll, nachhaltig
138	leichte Reifernote, einfache Struktur, harmonisch -> in Ordnung.
140	sensorisch unauffällig; Bewertung: 2,67
142	nicht reintonig, muffig, Botrytiston, wenig Pilz, estrig, krautig, leichter Lösungsmittelgeruch Qualitätszahl: 1,18 (Ablehnung)
143	Reife Apfelfrucht im Bukett; zeigt gereifte, leicht nussige Aprikosenblume mit dezenter verhaltener Birnenschale. Der Geschmack zeigt eine schlanke Süßstruktur mit kurzem Säure-Citrus-Effekt im Abgang; Geruch: 2,0; Geschmack: 2,5; Harmonie: 2,0; Gesamt: 2,17
144	als 2017er bereits weit gereift, Aromen nach gelben Früchten, Honig, etwas Stachelbeere, Frische fehlt etwas, 1,75 Punkte von 5
146	Aussehen: blank, typisch; Geruch und Geschmack: fehlerfrei, aromatisch, würzig, reif, fruchtig.
147	Wein unsauber (böckserhaft); Punkte 1,53
148	Der angestellte Wein ist nach den Kriterien 2017er Qualitätswein Mosel, halbtrocken (ohne Sortenangabe) AP geeignet. Die Laborwerte erfüllen die Anforderungen für das Geschmacksprofil halbtrocken (Sensorisch ist die Säure für halbtrocken etwas zu spitz um ein ausgewogenes Säure - / Restzuckerverhältniss herzustellen). In Farbe, Geschmack und Geruch liegen keine Fehler vor.
150	Farbe ohne Beanstandungen Klarheit ohne Beanstandungen Geruch/Geschmack ohne Beanstandungen Harmonie ohne Beanstandungen Bewertung : 1,83 Punkte
151	Ein Wein ohne Fehler. Fruchtig, harmonisch, aber klein.
152	keine wesentliche Beanstandung – 1,7 Punkte
153	Farbe einwandfrei. In Geruch und Geschmack oxidativ, am Gaumen fruchtsüß, säurebetont. Im Abgang oxidativ. Geschmacksangabe "halbtrocken" entspricht den gesetzl. Vorgaben.

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
Ahr-Winzer eG, Betriebslabor	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Amt für Lebensmittelsicherheit und Tiergesundheit	CH 7001	Chur
Analytisches Labor Link, Niederlassung Rheinhessen	67551	Worms-Pfeddersheim
Analytisches Labor Link, Zweigstelle Weisenheim	67256	Weisenheim a.S.
Arauner Paul GmbH & Co KG	97306	Kitzingen/Main
AUSTRIA JUICE Germany GmbH	55411	Bingen
Baden-Badener Winzergenossenschaft eG	76534	Baden-Baden
Badischer Winzerkeller EG	79206	Breisach
Bay. Landesanstalt für Weinbau und Obstbau Abt. Oenologie und Analytik -	97209	Veitshöchheim
Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit	97082	Würzburg
Bezirksschellerei Markgräflerland eG	79588	Efringen-Kirchen
Braun Weinlabor, Inh. Günter Braun	67435	Neustadt/W.
Briegel e.K.	67146	Deidesheim
Bruker Optics GmbH	CH 8117	Fällanden
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
Dr. Karl-Heinz Franzen und Hans-Jürgen Franzen	56814	Bremm
Emil Wissing GmbH	76887	Bad Bergzabern
Fellbacher Weingärtner eG	70734	Fellbach
Felsengartenkellerei Besigheim eG	74394	Besigheim
Franz Stettner & Sohn GmbH	D-83059	Kolbermoor
Franz Wilhelm Langguth Erben GmbH & Co. KG, Abtlg 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
Jakob Vogel, Inh. Werner Vogel	65366	Geisenheim
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
Landesbetrieb Hessisches Landeslabor	65203	Wiesbaden
Landesuntersuchungsamt		
Inst. f. Lebensmittelchemie und Arzneimittelprüfung	55129	Mainz
Lehr- und Forschungszentrum für Wein- und Obstbau	A-3400	Klosterneuburg
Niedersächsisches Landesamt für Verbraucherschutz und	38124	Braunschweig
Lebensmittelsicherheit, Lebensmittelinstitut Braunschweig		
Pieroth AG	55450	Langenlonsheim
Raiffeisen Lagerhaus Absdorf - Ziersdorf eGen Weinbaucenter Langenlois	A-3550	Langenlois
Reh-Kendermann GmbH Betriebslabor Bingen	55411	Bingen
Rheinberg-Kellerei GmbH	55411	Bingen
Rimuss- und Weinkellerei Rahm AG	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

Fortsetzung: Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

Name/Firma	PLZ	Ort
Sektkellerei Schloss Wachenheim, Betriebslabor	54294	Trier
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
Weinchemisches Labor Schöller	55294	Bodenheim
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG; Betrieb Bönningheim	74357	Bönningheim
Weingärtner Stromberg-Zabergäu eG; Betrieb Brackenheim	74336	Brackenheim
Weingut Graf	76835	Weyher/Pfalz
Weinkellerei Adam Trautwein	55237	Lonsheim
Weinkellerei Andreas Oster	56812	Cochem
Weinkellerei Deutsch GmbH	55278	Hahnheim
Weinkellerei Einig-Zenzen GmbH & Co KG	56759	Kaisersesch
Weinkellerei Hechtsheim GmbH	55129	Mainz
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 Berg	54329	Konz
Weinlabor Bollig	54349	Trittenheim
Weinlabor Carl Klein GmbH	97318	Kitzingen
Weinlabor Dautermann	55585	Duchroth
Weinlabor Emmel	67483	Edesheim
Weinlabor Frank	55283	Nierstein
Weinlabor Geissel	67169	Kallstadt
Weinlabor J. Neumann	67278	Bockenheim
Weinlabor Jaeckel	55595	Wallhausen
Weinlabor Keßler	76829	Landau
Weinlabor Kiefer	67487	Maikammer
Weinlabor Krauß	55291	Saulheim
Weinlabor Mathias Schreml	55444	Waldlaubersheim
Weinlabor Michaeli	54453	Nittel
Weinlabor Mündel-Börtzler	67487	Maikammer
Weinlabor Peitz	55595	Wallhausen
Weinlabor Porn	54518	Osann-Monzel
Weinlabor Porten, Inh. Mechthild Steck	56814	Bruttig-Fankel
Weinlabor Rößler	55599	Eckelsheim
Weinlabor Schloeder	54347	Neumagen-Dhron
Weinlabor Schmitt	55450	Langenlonsheim
Weinlabor Schumacher	53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Weinlabor U. Lieser	56841	Traben-Trarbach
Weinlabor Weinbautechniker Th. Kaufmann	54536	Kröv
Weinlabor Winkler	76829	Landau
Weinlabor Zenz	56814	Ernst
Weinlaboratorien Dr. E. M. Kleinknecht	55543	Bad Kreuznach
Weinlaboratorien Dr. E. M. Kleinknecht	55232	Alzey
Winzergemeinschaft Franken eG	97318	Kitzingen
Winzergenossenschaft Moselland eG	54470	Bernkastel-Kues
Winzergenossenschaft Moselland eG, Betriebslabor Rhodt	76835	Rhodt
Winzergenossenschaft Schliengen-Müllheim	79418	Schliengen
Winzerkeller Hex vom Dasenstein	77876	Kappelrodeck
Winzerverein Hagnau	88709	Hagnau
WSB-Labor Ruzycki GbR	55278	Hahnheim
WSB-Labor Ruzycki GbR, Zweigstelle Nierstein	55283	Nierstein
Württembergische Weingärtner-Zentralgenossenschaft e.G.	71696	Mögingen
Zentrallabor Witowski	55232	Alzey
Zentrallabor Witowski, Zweigst. Bechtheim	67595	Bechtheim
Zimmermann-Graeff&Müller GmbH & Co KG	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH & Co KG	56856	Zell/Mosel
Zimmermann-Gräff & Müller GmbH & Co KG - Zwgstelle Werk 2 -	56856	Zell/Mosel