DEUTSCHE WEINANALYTIKER E.V.

VERBAND DER AMTLICH ZUGELASSENEN WEINLABORATORIEN

Laborvergleichsuntersuchung 2019

Relative Dichte 20 °C/20 °C, Gesamtalkohol, Vorhandener Alkohol, Gesamtextrakt, Zuckerfreier Extrakt, Vergärbare Zucker, Glucose, Fructose, Glycerin, pH-Wert, Gesamtsäure, Weinsäure, Gesamtäpfelsäure, L-Äpfelsäure, Gesamtmilchsäure, L-Milchsäure, Citronensäure, Acetat, Flüchtige Säure, Sorbinsäure, Reduktone, Freie Schweflige Säure, Gesamte Schweflige Säure, Farbcharakteristik

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

Stand: 15.01.2020

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 7

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung 7
2.1 Untersuchungsmaterial 7
2.1.1 Herstellung des Untersuchungsgutes 7
2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung 8
2.1.3 Verteilung des Untersuchungsgutes 11
2.2 Informationen zu Probenbehandlung und Untersuchungsumfang 11
2.3 Ergebnisübermittlung und Behandlung 12

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung 15

4 Anmerkungen zu einzelnen Parametern und Methoden 17
4.1 Vorhandener Alkohol 17
4.2 Vergärbare Zucker 17
4.3 Weinsäure 18
4.4 Gesamtäpfelsäure 18
4.5 Acetat 19
4.6 Flüchtige Säure 19
4.7 Sorbinsäure 20
4.8 Schweflige Säure und Reduktone 20
4.8.1 Reduktone 21
4.8.2 Freie Schweflige Säure 21
4.8.3 Gesamte Schweflige Säure 22
4.9 Farbcharakteristik 22
4.10 Ergebnisse der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie 23

5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern 29
5.1 Darstellung der analytischen Ergebnisse 29
5.1.1 Aufbau der Laborergebnistabelle 29
5.1.2 Aufbau der Tabelle der deskriptiven Ergebnisse 30
5.1.3 Aufbau der Tabelle Methodenübersicht 30
5.1.4 Aufbau der Graphiken 30
5.2 Relative Dichte 20 °C/20 °C 32
5.2.1 Laborergebnisse 32
5.2.2 Deskriptive Ergebnisse 33
5.2.3 Methodenübersicht 34
5.3 Gesamtalkohol [g/L] 35
5.3.1 Laborergebnisse 35
5.3.2 Deskriptive Ergebnisse 36
5.3.3 Methodenübersicht 36
5.4 Vorhandener Alkohol [g/L] 38
5.4.1 Laborergebnisse 38
5.4.2 Deskriptive Ergebnisse 39
5.4.3 Methodenübersicht 40

5.5 Gesamtextrakt [g/L] 41
5.5.1 Laborergebnisse 41
5.5.2 Deskriptive Ergebnisse 42
5.5.3 Methodenübersicht 42
5.6 Zuckerfreier Extrakt [g/L] 44
5.6.1 Laborergebnisse 44
5.6.2 Deskriptive Ergebnisse 45
5.6.3 Methodenübersicht 45
5.7 Vergärbare Zucker [g/L] 47
5.7.1 Laborergebnisse 47
5.7.2 Deskriptive Ergebnisse 48
5.7.3 Methodenübersicht 49
5.8 Glucose [g/L] 50
5.8.1 Laborergebnisse 50
5.8.2 Deskriptive Ergebnisse 51
5.8.3 Methodenübersicht 51
5.9 Fructose [g/L] 53
5.9.1 Laborergebnisse 53
5.9.2 Deskriptive Ergebnisse 54
5.9.3 Methodenübersicht 54
5.10 Glycerin [g/L] 56
5.10.1 Laborergebnisse 56
5.10.2 Deskriptive Ergebnisse 56
5.10.1 Methodenübersicht 57
5.11 pH-Wert 58
5.11.1 Laborergebnisse 58
5.11.2 Deskriptive Ergebnisse 59
5.11.3 Methodenübersicht 59
5.12 Gesamtsäure [g/L] 61
5.12.1 Laborergebnisse 61
5.12.2 Deskriptive Ergebnisse 62
5.12.3 Methodenübersicht 63
5.13 Weinsäure [g/L] 64
5.13.1 Laborergebnisse 64
5.13.2 Deskriptive Ergebnisse 65
5.13.3 Methodenübersicht 65
5.14 Gesamtäpfelsäure [g/L] 66
5.14.1 Laborergebnisse 66
5.14.2 Methodenübersicht 66
5.14.3 Deskriptive Ergebnisse 67
5.15 L-Äpfelsäure [g/L] 68
5.15.1 Laborergebnisse 68
5.15.2 Deskriptive Ergebnisse 68
5.15.3 Methodenübersicht 69
5.16 Gesamtmilchsäure [g/L] 70
5.16.1 Laborergebnisse 70
5.16.2 Methodenübersicht 70
5.16.3 Deskriptive Ergebnisse 71

5.17 L-Milchsäure [g/L] 72
5.17.1 Laborergebnisse 72
5.17.2 Deskriptive Ergebnisse 72
5.17.3 Methodenübersicht 73
5.18 Citronensäure [mg/L] 74
5.18.1 Laborergebnisse 74
5.18.2 Deskriptive Ergebnisse 74
5.18.3 Methodenübersicht 74
5.19 Acetat (als Essigsäure) [g/L] 76
5.19.1 Laborergebnisse 76
5.19.2 Deskriptive Ergebnisse 76
5.19.3 Methodenübersicht 77
5.20 Flüchtige Säure [g/L] 78
5.20.1 Laborergebnisse 78
5.20.2 Zusätzliche Angaben zur Untersuchung bei Destillationsverfahren 79
5.20.3 Deskriptive Ergebnisse 79
5.20.4 Methodenübersicht 80
5.21 Sorbinsäure [mg/L] 81
5.21.1 Laborergebnisse 81
5.21.2 Deskriptive Ergebnisse 81
5.21.3 Methodenübersicht 81
5.22 Reduktone [mg/L] 83
5.22.1 Laborergebnisse 83
5.22.2 Deskriptive Ergebnisse 84
5.22.3 Methodenübersicht 84
5.23 Freie Schweflige Säure [mg/L] 86
5.23.1 Laborergebnisse: Verfahren ohne Reduktoneinfluß 86
5.23.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren 86
5.23.3 Deskriptive Ergebnisse 87
5.23.4 Methodenübersicht 88
5.24 Gesamte Schweflige Säure [mg/L] 90
5.24.1 Laborergebnisse 90
5.24.2 Methodenübersicht 91
5.24.3 Deskriptive Ergebnisse 92
5.25 Extinktion pro cm bei 420 nm 93
5.25.1 Laborergebnisse 93
5.25.2 Deskriptive Ergebnisse 93
5.25.3 Methodenübersicht 93
5.26 Extinktion pro cm bei 520 nm 95
5.26.1 Laborergebnisse 95
5.26.2 Deskriptive Ergebnisse 95
5.26.3 Methodenübersicht 95
5.27 Extinktion pro cm bei 620 nm 97
5.27.1 Laborergebnisse 97
5.27.2 Deskriptive Ergebnisse 97
5.27.3 Methodenübersicht 97

6 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer 99

1 Einleitung

Zur Sicherung der Qualität der Analysenergebnisse seiner Mitglieder veranstaltet der Verband der Deutschen Weinanalytiker jährlich eine Laborvergleichsuntersuchung, in der alle Parameter angeboten werden, die in einer ausreichenden Anzahl der Mitgliedslaboratorien bestimmt werden. An der Laborvergleichsuntersuchung können auch Nichtmitglieder des Verbandes teilnehmen. Die Laborvergleichsuntersuchung ermöglicht den Mitgliedslaboratorien und den externen Teilnehmern aus eigener Initiative ihre Analysendaten mit den Ergebnissen einer großen Zahl anderer Laboratorien zu vergleichen, die dasselbe Probenmaterial untersucht haben. Im Falle wesentlicher Abweichungen der eigenen Laborwerte von dem aus den Ergebnissen aller Laboratorien erhaltenen Bezugswert können sie die angewandte Arbeitsweise selbst kritisch überprüfen. Gleichzeitig werden Schwachstellen bei der Übermittlung der Ergebnisdaten aufgezeigt.

Der vorliegende Bericht beschreibt die Durchführung und die Ergebnisse der Laborvergleichsuntersuchung der Deutschen Weinanalytiker, die für den Zeitraum zwischen dem 01. Oktober und dem 05. November 2019 ausgeschrieben wurde. Dieser Termin berücksichtigt einerseits die Empfehlung des Beirates des Verbandes einen optimalen zeitlichen Abstand von etwa sechs Monaten zu der Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz zu wählen und zum anderen den frühen Zeitpunkt der Lese sowie die damit verbundene Arbeitssituation bei einem großen Anteil der Laboratorien. Zugleich gibt er den Teilnehmern die Möglichkeit zu Beginn der größten Nachfrage den aktuellen Stand ihrer Analytik zu überprüfen. Im Folgenden wird über die Ergebnisse berichtet.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Die Laborvergleichsuntersuchung 2019 wurde gemäß den "Allgemeinen Regeln zur Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung der Deutschen Weinanalytiker", veranstaltet, die auf der Homepage des Verbandes veröffentlicht sind.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung des Untersuchungsgutes

Der Grundwein für die Herstellung des Probematerials (Prüfgutes) war ein Verschnitt zahlreicher Rotweine aus der Pfalz. Da das Prüfgut für mehrere Laborvergleichsuntersuchungen eingesetzt werden sollte, wurde es durch Zusatz von 22 Stoffen so eingestellt, dass insgesamt über 50 Parameter in analytisch relevanten Konzentrationen vorlagen und sinnvoll bestimmt werden konnten. Hiervon wurden in dieser Laborvergleichsuntersuchung 26 Parameter, darunter erstmals die Ermittlung der Farbcharakteristik durch Messung der Extinktion bei drei Wellenlängen, zur Bestimmung angeboten.

Insgesamt wurden 498 0,33-L-Flaschen gefüllt und während der Füllung jede 17. Flasche, insgesamt 30 aufsteigend nummerierte Proben, zur Prüfung der Homogenität entnommen.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung

Für die Homogenitäts-Analysen wurde mit einem Zufallsgenerator eine zufällige Reihenfolge der Proben erstellt und zwei Serien von je 12 Proben eingesetzt. Die erste Serie wurde am 18.03.2019 zur Bestimmung der Relativen Dichte 20 °C/20 °C durch elektronische Densitometrie (Biegeschwinger) und des Vorhandenen Alkohols mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIR) sowie zur Ermittlung von Relativer Dichte, Vorhandenem Alkohol, Gesamtsäure, pH-Wert, Glucose, Fructose, Vergärbare Zucker, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäure und Flüchtiger Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) verwendet. Die zweite Serie der Proben diente am 15.04.2019 der automatisierten jodometrischen Bestimmung von Freier, Gebundener und Gesamter Schwefliger Säure. Die Messungen wurden unter Wiederholbedingungen durchgeführt, wobei die ersten Messungen in der Reihenfolge der Ziehung der Proben erfolgten, während für die Wiederholung eine eigene Zufallsfolge erstellt wurde. Die Messergebnisse der Homogenitätsprüfung sind in der Tabelle 1 bis Tabelle 3 zusammengestellt.

Die Auswertung der Messungen erfolgte zunächst durch graphische Prüfung auf Anomalitäten und Korrelationen zur Abfolge der Messungen oder zu den Probenummern. Wie häufig zu beobachten, weichen einzelne Messwerte in der graphischen Darstellung auffällig von den übrigen Messergebnissen ab, ohne dass es sich tatsächlich um Ausreißer handelt.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung, erste Probenserie

Teil 1: Maßeinheit (außer Relaive Dichte): g/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Rel. Dichte		Vorh. Alkohol		Glucose			Fructose		verg. Zucker	
		dens.	FTIR	NIR	FTIR	enz.	enz. ges.	FTIR	enz.	FTIR	enz.	FTIR
1	30	1,00431	1,00485	90,39	89,80	11,510	11,310	12,374	11,820	11,752	23,3	23,821
2	9	1,00430	1,00482	90,31	89,76	11,510	11,380	12,164	11,420	11,827	22,9	24,212
3	25	1,00432	1,00480	90,39	90,15	11,220	11,110	12,205	11,500	11,860	22,7	24,295
4	17	1,00433	1,00485	90,31	89,96	11,530	11,340	12,142	11,610	11,810	23,1	24,322
5	1	1,00419	1,00471	90,39	90,03	11,030	11,150	12,105	11,470	11,676	22,5	24,234
6	19	1,00433	1,00488	90,31	89,94	11,140	11,140	12,323	11,270	11,743	22,4	23,927
7	14	1,00434	1,00481	90,31	89,68	11,390	11,000	12,086	11,500	11,815	22,9	23,998
8	28	1,00431	1,00487	90,31	89,99	11,240	11,080	12,195	11,650	11,827	22,9	24,166
9	2	1,00428	1,00481	90,23	89,92	11,450	10,970	12,321	11,630	11,798	23,1	24,304
10	27	1,00433	1,00483	90,23	89,79	11,230	11,140	12,371	11,660	11,858	22,9	24,203
11	21	1,00433	1,00484	90,31	89,88	11,180	11,310	12,076	11,490	11,816	22,7	24,128
12	4	1,00436	1,00483	90,31	89,88	11,120	11,200	12,472	11,530	11,713	22,7	24,237
13	19	1,00434	1,00490	90,31	89,80	11,140	11,100	12,623	11,480	11,834	22,6	24,047
14	21	1,00430	1,00485	90,31	89,98	11,410	11,230	12,140	11,670	11,926	23,1	24,192
15	4	1,00379	1,00481	90,31	89,81	11,320	11,100	12,298	11,500	11,952	22,8	24,111
16	30	1,00431	1,00481	90,23	89,86	11,450	11,420	12,385	11,310	11,825	22,8	24,210
17	27	1,00432	1,00481	90,31	89,85	11,500	11,300	12,394	11,710	11,830	23,2	24,269
18	2	1,00432	1,00482	90,31	89,86	11,300	11,300	12,253	11,480	12,011	22,8	24,341
19	14	1,00430	1,00481	90,39	89,85	11,320	11,320	12,471	11,760	11,711	23,1	24,223
20	17	1,00431	1,00482	90,39	90,09	11,530	11,360	12,435	11,880	11,859	23,4	24,506
21	1	1,00422	1,00473	90,47	89,99	11,400	11,050	12,339	11,650	11,841	23,1	24,229
22	9	1,00432	1,00483	90,31	90,01	11,430	11,180	12,544	11,660	11,995	23,1	24,208
23	28	1,00431	1,00480	90,23	90,00	11,170	11,070	12,181	11,670	11,784	22,8	24,168
24	25	1,00434	1,00487	90,23	90,04	11,200	11,200	12,338	11,730	11,861	22,9	24,312

Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung, erste Probenserie

Teil 2: Maßeinheit (außer pH-Wert): g/L; Kupfer: mg/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	pH-Wert	Gesamt-säure	Weinsäure	Äpfelsäure	Milchsäure	Flüchtige Säure	Kupfer
		FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	FTIR	AAS
1	30	3,516	6,922	2,160	1,189	1,923	0,694	1,15
2	9	3,513	6,906	2,138	1,132	1,923	0,688	1,12
3	25	3,515	6,969	2,103	1,192	1,878	0,671	1,13
4	17	3,517	6,907	2,116	1,159	1,895	0,681	1,13
5	1	3,510	6,894	2,111	1,187	1,846	0,687	1,09
6	19	3,512	6,920	2,144	1,151	1,886	0,692	1,13
7	14	3,505	6,906	2,180	1,221	1,860	0,668	1,14
8	28	3,515	6,923	2,129	1,199	1,784	0,681	1,13
9	2	3,520	6,918	2,134	1,208	1,905	0,695	1,12
10	27	3,517	6,905	2,060	1,170	1,902	0,695	1,09
11	21	3,513	6,928	2,121	1,169	1,854	0,687	1,13
12	4	3,521	6,913	2,156	1,217	1,905	0,680	1,12
13	19	3,515	6,918	2,099	1,185	1,876	0,691	1,10
14	21	3,509	6,930	2,131	1,204	1,866	0,687	1,12
15	4	3,513	6,943	2,153	1,235	1,816	0,665	1,16
16	30	3,520	6,932	2,104	1,211	1,868	0,686	1,12
17	27	3,518	6,921	2,121	1,212	1,875	0,692	1,13
18	2	3,514	6,917	2,113	1,180	1,860	0,691	1,11
19	14	3,526	6,917	2,133	1,193	1,863	0,686	1,09
20	17	3,525	6,924	2,104	1,159	1,871	0,694	1,09
21	1	3,513	6,888	2,125	1,141	1,844	0,690	1,10
22	9	3,519	6,923	2,099	1,188	1,881	0,695	1,14
23	28	3,513	6,927	2,133	1,208	1,855	0,666	1,15
24	25	3,514	6,930	2,072	1,222	1,837	0,685	1,13

Tabelle 3: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung, zweite Probenserie

Maßeinheit: mg/L

Lfd. Nr.	Probe Nr.	Freie SO_2	Freie SO_2 korr	Gebundene SO_2	Gesamte SO_2
1	23	39,1	38,9	105,4	144,5
2	20	38,0	37,6	105,3	143,3
3	5	39,6	39,0	105,5	145,1
4	3	39,1	38,3	107,0	146,1
5	6	39,6	38,6	108,7	148,3
6	8	39,6	38,4	108,7	148,3
7	10	40,1	38,7	108,8	148,9
8	12	40,1	38,5	107,2	147,3
9	16	39,6	37,8	107,9	147,5
10	13	39,6	37,6	107,1	146,7
11	18	38,5	36,3	106,2	144,7
12	7	40,6	38,2	108,2	148,8
13	3	40,1	37,5	104,9	145,0
14	20	40,6	37,8	104,3	144,9
15	13	41,2	38,2	105,1	146,3
16	18	40,6	37,4	105,1	145,7
17	16	42,2	38,8	106,1	148,3
18	6	42,2	38,6	106,9	149,1
19	10	43,2	39,4	107,1	150,3
20	8	42,7	38,7	107,0	149,7
21	23	42,2	38,0	106,1	148,3
22	12	43,2	38,8	106,3	149,5
23	5	42,2	37,6	104,5	146,7
24	7	43,2	38,4	105,6	148,8

Lediglich bei dem Parameter Relative Dichte ist ein Messwert mit dem Biegeschwinger ein deutlicher Ausreißer. Dieses Messergebnis ist in der Tabelle 1 rot markiert. Das zu derselben Messprobe erhaltene FTIR-Ergebnis zeigt keine Auffälligkeit. Es handelt sich somit um eine Fehlmessung, die keinen Hinweis auf eine Inhomogenität des Prüfgutes gibt. Eine mäßige, aber nur schwach signifikante Korrelation zur Probenfolge zeigte sich beim Parameter

Gesamtsäure, während eine mäßige und nur schwach signifikante Korrelation zur Messfolge bei den FTIR-Werten für Glucose durch die enzymatischen Messergebnisse nicht bestätigt wird. Eine straffe und hochsignifikante Korrelation zur Messfolge ergab sich hingegen für den Parameter Freie Schweflige Säure. Diese schlug auch auf die Messergebnisse für Gesamte Schweflige Säure durch, während die Messergebnisse für Gebundene Schweflige Säure weder zur Mess- noch zur Probenfolge korreliert waren.

Über die Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung entscheiden die Ergebnisse der Varianzanalyse. Diese sind in der Tabelle 4 zusammengefasst. Liegt der Quotient aus der Wiederholstandardabweichung (Fehler, s_r) und der Zielstandardabweichung (s_r/s_{Ziel}) unter 0,5 so belegt er die Gültigkeit eines nicht signifikanten Ergebnisses der Varianzanalyse. Diese Bedingung ist für den Parameter Relative Dichte für die densitometrischen Messungen erst nach Ausschluss des Ausreißers erfüllt. Der Höchstwert wird bei dem Parameter Freie Schweflige Säure infolge der Korrelation der Messergebnisse zur Messfolge nahezu erreicht. Daher wurde eine Korrektur dieses Einflusses durchgeführt. Danach ergab sich ein unauffälliger Wert dieses Quotienten.

Tabelle 4: Ergebnisse der Varianzanalyse

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_r)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_{ziel})	s_r/s_{ziel}	s_{Pr}/s_{ziel}	
Rel. Dichte dens.	1,004288	24	0,8163	0,6282	0,000117		0,000132	0,890		0,000121
ohne Lfd. Nr. 15	1,004310	23	8,6549	0,0006	0,000017	0,000034	0,000132	0,129	0,258	0,000055
Dichte FTIR	1,004823	24	5,0141	0,0049	0,000024	0,000034	0,000132	0,184	0,261	0,000058
Vorh. Alkohol NIR	90,317	24	1,0649	0,4550	0,061	0,011	0,535	0,114	0,021	0,2220
Vorh. Alkohol FTIR	89,913	24	2,7974	0,0454	0,084	0,079	0,535	0,156	0,148	0,2282
Glucose enzymat.	11,32	24	2,2465	0,0901	0,120	0,095	0,349	0,344	0,272	0,1787
enzymat. gesamt	11,20	24	1,3907	0,2893	0,116	0,051	0,345	0,337	0,149	0,1756
FTIR	12,30	24	0,8283	0,6190	0,156		0,375	0,415		0,2084
Fructose enzymat.	11,83	24	0,6254	0,7774	0,091		0,362	0,252		0,1681
FTIR	11,59	24	0,6557	0,7537	0,164		0,356	0,461		0,2085
Verg. Zucker enz.	22,91	24	1,4098	0,2816	0,225	0,102	0,661	0,341	0,154	0,3377
FTIR	24,19	24	2,5954	0,0580	0,107	0,096	0,696	0,154	0,138	0,2965
pH-Wert FTIR	3,52	24	0,5555	0,8302	0,005		0,0476	0,113		0,0197
Gesamtsäure FTIR	6,92	24	2,6022	0,0575	0,012	0,011	0,107	0,113	0,102	0,0444
Weinsäure FTIR	2,12	24	1,4461	0,2676	0,025	0,012	0,107	0,229	0,108	0,0487
Äpfelsäure FTIR	1,19	24	1,7758	0,1690	0,023	0,014	0,048	0,479	0,299	0,0288
Milchsäure FTIR	1,87	24	1,1480	0,4061	0,031	0,008	0,0963	0,322	0,088	0,0481
Flüchtige Säure FTIR	0,69	24	2,2674	0,0877	0,007	0,006	0,0410	0,178	0,142	0,0178
Freie Schwefl. Säure	40,71	24	0,4434	0,9057	1,828		3,729	0,490		2,2601
korrigiert	38,21	24	2,3041	0,0836	0,529	0,427	3,533	0,150	0,121	1,5002
Geb. Schwefl. Säure	106,46	24	1,7698	0,1704	1,154	0,716	5,357	0,215	0,134	2,4006
Ges. Schwefl. Säure	147,17	24	4,7611	0,0061	1,154	1,583	5,357	0,215	0,295	2,4008
Kupfer	1,12	24	0,9055	0,5619	0,021		0,176	0,117		0,0733

Maßeinheit g/L – ausgenommen Schweflige Säure und Kupfer mg/L sowie Dichte und pH-Wert

Die Varianzanalyse zeigt für die Parameter Relative Dichte und Gesamte Schweflige Säure ein signifikantes Ergebnis. Für den Parameter Vorhandener Alkohol ergab sich bei den Messergebnissen mittels FTIR ein gerade schwach signifikantes Ergebnis, das durch die Messergebnisse mittels NIR nicht bestätigt wird und daher unbeachtlich ist. Bei dem Parameter Relative Dichte beträgt der Quotient s_{Pr}/s_{Ziel} weniger als 0,3 und ist somit unauffällig. Letztlich entscheidend ist, dass der nach Fearn und Thompson (A New Test for Sufficient Homo-

geneity, Analyst 126 (2001), 1414-1417) maximal zulässige Wert für die Streuung zwischen den Proben (s_{Pr}) nicht überschritten wird. Damit ist das Prüfgut nach den Ergebnissen der statistischen Prüfung ohne Einschränkung für Laborvergleichsuntersuchungen geeignet.

2.1.3 Verteilung des Untersuchungsgutes

Jeder Teilnehmer der Laborvergleichsuntersuchung erhielt 2 Flaschen zu je 0,33 L des Prüfgutes. Der Versand geschah in der Regel über einen Paketdienst. 9 Teilnehmer erhielten das Material durch Kurier. Insgesamt wurde 77 Laboratorien einschließlich 6 externer Teilnehmer das Untersuchungsgut erfolgreich zugestellt, während in 2 Fällen eine Rücksendung wegen Schließung des Labors erfolgte.

2.2 Informationen zu Probenbehandlung und Untersuchungsumfang

Die Laboratorien erhielten mit den Proben ein Begleitschreiben. Mit diesem wurden sie insbesondere auf vermutlich von der Alltagspraxis abweichende Punkte aufmerksam gemacht. Dies betraf sowohl formale Anforderungen wie die Anzahl gültiger Ziffern oder die Vollständigkeit erbetener Zusatzauskünfte als auch fachliche Hinweise wie den maßgeblichen Zuckerbegriff oder die zweckmäßige Vorgehensweise bei der Bestimmung schwieriger Parameter wie Flüchtige Säure. Zur jodometrischen Bestimmung der Schwefligen Säure wurde darauf hingewiesen, dass in diesem Falle bei dem Rotwein-Prüfgut die Bestimmung des Gehaltes an Reduktonen unter Einhalten einer kurzen Reaktionszeit von 20 Minuten zur Bindung der Freien Schwefligen Säure und die Mitteilung des Wertes notwendig war. Ferner wurde wiederum gebeten, das Ergebnis so mitzuteilen, wie dies gegenüber den Kunden nach guter fachlicher Praxis und/oder den Vorgaben des Qualitätsmanagementsystems des Labors zu geschehen pflegt. Schließlich war – vor allem als Arbeitshilfsmittel – ein Formblatt beigefügt, aus dem die sinnvoll zu bestimmenden Parameter ersichtlich waren.

Wie bereits seit mehreren Jahren wurde die vorrangig zur Ergebnismitteilung zu verwendende Exceldatei per E-Mail zugesandt. Diese Exceldatei enthielt neben dem zentralen Registerblatt zur Ergebnismitteilung das Begleitschreiben, weiterhin – verteilt auf mehrere Registerblätter – Benutzungshinweise, Hinweise zur Durchführung von FTIR-Messungen sowie zur Bestimmung der Flüchtigen Säure und ein Blatt für zusätzliche Mitteilungen. Durch die Gestaltung des Registerblattes für die Ergebnisse, insbesondere die Nennung des Bestimmungsprinzips nach Auswahl einer Kurzbezeichnung, eine Aufforderung zur Methodenangabe nach der Eingabe eines Ergebnisses und die Abfrage ergänzender Informationen, wurden korrekte und vollständige Angaben zur Untersuchungsmethodik unterstützt. Wie auf den Arbeitsformularen betrafen diese Abfragen Details zur Bestimmung der Parameter Vergärbare Zucker, Reduktone, Citronensäure und Flüchtige Säure. Zu den in der Regel mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) oder Photometerautomaten bestimmten Parametern wurden zusätzliche Informationen vor allem im Hinblick auf die zur Kalibrierung verwendeten Standards und die Reagenziensätze abgefragt. Dies ermöglicht im Bedarfsfall

eine Prüfung, ob die Ergebnisse der Laborvergleichsuntersuchung durch diese Faktoren beeinflusst sein können. Schließlich vermeidet die Verwendung der Exceldatei Fehler bei der Übernahme der Ergebnisse in die Auswertung. Das Arbeitsblatt und die Exceldatei wurden auch auf der Internetsite des Verbandes zum Herunterladen bereitgestellt.

Grundsätzlich sollen nur Ergebnisse aus dem eigenen Labor mitgeteilt werden. Es wurde aber angeboten, Ergebnisse, die in einem anderen als dem einsendenden Labor ermittelt wurden, bei Nennung des Unterauftragnehmers zu bewerten. Diese Nennung ist wichtig, um eine Beeinträchtigung der Auswertung durch mehrfache Berücksichtigung einer eventuellen systematischen Abweichung in einem Labor zu vermeiden. Es wurde keine Beteiligung eines Unterauftragnehmers mitgeteilt.

Teilnehmern, die das Verfahren der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR-Verfahren) zur Weinanalyse einsetzen, wurde eine zusätzliche Untersuchung mit diesem Verfahren angeboten und sie erhielten hierzu ergänzende Hinweise.

2.3 Ergebnisübermittlung und Behandlung

Als Abgabetermin wurde im Informationsschreiben der 05.11.2019 und – für den Fall, dass kein abweichender Termin vereinbart wurde - als Ausschlusstermin der 10.11.2019 genannt. Die Übermittlung der Ergebnisse erfolgte nur teilweise termingerecht. Bis zum regulären Abgabedatum trafen nur 48, bis zum Ausschlusstermin weitere 12 Ergebnismitteilungen – teilweise nach vorausgegangener Vereinbarung einer Fristverlängerung – ein. Obwohl der Versandtermin und die Abgabefrist so gewählt wurden, dass auch bei Berücksichtigung des schwer kalkulierbaren Herbstgeschehens eine pünktliche Ergebniserstellung und Mitteilung möglich gewesen sein sollte, standen zum Ausschlusstermin noch 17 Laborergebnisse aus. 9 dieser Teilnehmer hatten um Fristverlängerung gebeten. Die 8 verbliebenen Teilnehmer wurden per E-Mail oder telefonisch erinnert und erhielten eine individuelle Nachfrist. Ein Teilnehmer entschuldigte sich wegen Krankheit. Erst zum 30.11.2019 lagen alle Ergebnisse vor, wobei das zuletzt eingegangene Ergebnis bei der Auswertung nicht mehr berücksichtigt werden konnte. 4 Teilnehmer haben z. T. nur für einzelne Parameter oder spezielle Methoden wie ^{1}H-Kernresonanzspektroskopie zusätzliche Ergebnisse mitgeteilt. Für diese Ergebnisreihen wurde die in der Reihenfolge des Einganges der Ergebnisse vergebene Nummer für die Auswertung (Auswertenummer) jeweils um 100 erhöht.

Zur Mitteilung der Ergebnisse machte mit 67 die überwiegende Zahl der Teilnehmer von der für die eigene Ergebniseingabe und die weitere Bearbeitung vorteilhaften Exceldatei Gebrauch. Dabei kam es bei 5 Teilnehmern zu Schwierigkeiten infolge des erstmals verwendeten XLSX-Formates, das sich mit der bei dem Teilnehmer verfügbaren Excel-Version bzw. mit den Kalkulationsmodulen anderer Office-Programme nicht öffnen bzw. nicht unbeschädigt im Excelformat speichern ließ. Aus eigener Initiative der Teilnehmer bzw. im Zusammenwirken mit ihnen konnte jeweils eine geeignete Form zur Datenübermittlung erreicht

werden. Diese sowie die Einsendung der zur Verfügung gestellten Formulare oder deren im Internet bereitgestellte Variante, die von 5 Teilnehmern verwendet wurden, sowie die Mitteilung von 4 Laborergebnissen in Form anderer Dateiformate, verursachten einen wesentlich höheren Aufwand bei der Aufbereitung der Daten für die Auswertung. Insgesamt waren die Methodenangaben einschließlich der Kodierungen für die Parameter der Qualitätsweinprüfung ziemlich vollständig, so dass nur in begrenztem Umfang Rückfragen notwendig wurden.

Vollständige Ergebnisreihen der FTIR-Untersuchung teilten zusätzlich 19 Laboratorien mit. Für diese Ergebnisreihen wurde die Auswertenummer des Teilnehmers jeweils um 200 erhöht. Nur 7 Teilnehmer sandten auch die spektralen Rohdaten im CSV- bzw. FSS-Format ein. Soweit FTIR-Laborergebnisse doppelt, d. h. sowohl als Bestandteil der normalen Ergebnisreihe als auch der Reihe der FTIR-Untersuchungsergebnisse mitgeteilt wurden, wurden sie in der Ergebnisreihe mit herkömmlichen Methoden gelöscht, weil solche Ergebnisse nicht doppelt in die Auswertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse eingehen dürfen.

Die mittels FTIR-Verfahren erhaltenen Ergebnisse wurden entsprechend der Empfehlung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung stets unter Bezugnahme auf den Median der Ergebnisse der anderen Analyseverfahren ausgewertet. Soweit sie in einem Befund gemeinsam mit den Ergebnissen anderer Methoden mitgeteilt wurden, erfolgte die Bewertung mit dem – in der Regel strengeren – Leistungskriterium (Zielstandardabweichung), das auf die Bewertung der Ergebnisse aller anderen Methoden angewendet wurde, weil in diesen Fällen, je einem bei den Parametern Gesamtalkohol, Gesamtsäure und pH-Wert, ein Irrtum bei der Angabe der Untersuchungsmethode nahe liegt. Somit wurden nur die als gesonderte Ergebnisreihen mitgeteilten FTIR-Untersuchungsergebnisse mit dem speziell empfohlenen, in der Regel großzügigeren Leistungskriterium der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen ($s_{Ü}$) bewertet. Dies berücksichtigt auch, dass die Präzision der FTIR-Methode – auch infolge von Matrixeffekten – in der Regel geringer ist als die Präzision der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und, dass die FTIR-Methode, abgesehen von den für die amtliche Qualitätsweinanalyse zugelassenen Parametern, von vielen Teilnehmern nur zu orientierenden Untersuchungen benutzt wird und für einige Parameter nur orientierende Ergebnisse liefert. Weitere Erläuterungen finden sich im Abschnitt 4.10.

Tabelle 5: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der Laborvergleichsuntersuchung 2019

	Alle Werte	Gültige Werte	Minimal-Wert	Mittel-Wert	Median-Wert	Maximal-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Labor-Stdfehler u_M	Zielstand.abweichung n. Horwitz s_H	Zielstand.abweichung experim. s_{exp}	Quotienten s_L/s_H	Quotienten s_L/s_{exp}	Quotienten u_M/s_H	Quotienten u_M/s_{exp}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	72	70	1,0040	1,00440	1,00440	1,0046	0,000086	0,000010		0,000132		0,65		0,08
Gesamtalkohol (g/L)	67 (1)	66	96,30	101,167	101,200	104,30	1,102	0,136	2,857	1,063	0,39	1,04	0,05	0,13
Vorhandener Alkohol (g/L)	28	26	89,11	90,065	90,10	91,03	0,477	0,0936	2,589	0,535	0,18	0,89	0,04	0,18
Gesamtextrakt (g/L)	70	69	49,9	50,67	50,60	52,30	0,413	0,0497	1,586	0,594	0,26	0,69	0,03	0,08
Zuckerfreier Extrakt (g/L)	67	66	23,1	27,29	27,30	30,0	1,006	0,124	0,939	1,048	1,07	0,96	0,13	0,12
Vergärb. Zucker (g/L)	57	57	21,20	23,13	23,20	23,9	0,513	0,0679	0,818	0,669	0,63	0,77	0,08	0,10
Glucose (g/L)	51	51	10,50	11,399	11,400	12,20	0,291	0,0407	0,447	0,351	0,65	0,83	0,09	0,12
Fructose (g/L)	51	51	10,70	11,685	11,700	12,29	0,305	0,0427	0,457	0,359	0,67	0,85	0,09	0,12
Glycerin (g/L)	22	22	6,23	7,282	7,300	7,88	0,367	0,0783	0,306		1,20		0,26	
pH-Wert	61	61	3,30	3,522	3,520	3,69	0,0637	0,0082		0,0476		1,34		0,17
Gesamtsäure (g/L)	69	68	6,30	6,785	6,805	7,34	0,166	0,02014	0,288	0,107	0,58	1,55	0,07	0,19
Weinsäure (g/L)	38 (1)	37	1,72	2,204	2,200	2,50	0,200	0,0328	0,111		1,81		0,30	
Gesamtäpfelsäure (g/L)	15	13	1,00	1,217	1,210	1,43	0,0980	0,02724	0,0665	0,0486	1,47	2,02	0,41	0,56
- ohne Ausreißer n. Grubbs	11 (4)	11	1,14	1,217	1,210	1,31	0,0478	0,0144	0,0665	0,0486	0,72	0,98	0,22	0,30
L-Äpfelsäure (g/L)	37 (2)	35	0,690	0,7926	0,7900	0,970	0,0574	0,00970	0,0463	0,0380	1,24	1,51	0,21	0,26
Gesamtmilchsäure (g/L)	20	19	1,70	2,120	2,140	2,44	0,153	0,0351	0,1080		1,42		0,33	
L-Milchsäure (g/L)	36	35	1,35	1,697	1,700	2,04	0,131	0,0221	0,0888	0,0934	1,47	1,40	0,25	0,24
Citronensäure (mg/L)	15 (1)	14	400	461,9	463,0	536	34,11	9,12	29,41	23,21	1,16	1,47	0,31	0,39
Acetat (g/L), enzymat. + HPLC-Verf.	33	33	0,500	0,6390	0,6500	0,760	0,0735	0,0128	0,0392		1,87		0,33	
Flüchtige Säure (g/L), SO2 korr.	23 (2)	23	0,680	0,7999	0,8200	0,874	0,0507	0,0106	0,0478		1,06		0,22	
Sorbinsäure (mg/L)	11	11	274	292,1	291,0	316	13,51	4,07	19,82	8,31	0,68	1,63	0,21	0,49
Reduktone (mg/L)	59 (10)	54	6,0	12,04	12,00	18,0	2,94	0,400	1,32		2,23		0,30	
Freie Schweflige Säure (mg/L)	18	18	20,0	25,93	26,20	32,0	3,64	0,858	2,56		1,42		0,33	
Fr. Schwefl. Säure incl. Red. (mg/L)	31	31	23,0	32,35	32,00	42,0	4,19	0,752	3,04		1,38		0,25	
Fr. Schwefl. Säure excl. Red. (mg/L)	29	29	12,0	20,18	20,30	30,0	4,74	0,880	2,06	3,04	2,30	1,56	0,43	0,29
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillation	27 (1)	26	99,2	119,38	120,50	131,0	8,06	1,58	9,37	5,36	0,86	1,50	0,17	0,30
Extinktion pro cm bei 420 nm	19 (1)	17	2,178	2,3913	2,4200	2,5000	0,100	0,0243		0,103		0,98		0,24
- bei 520 nm	20	19	2,253	2,7714	2,7900	3,0450	0,177	0,0407		0,141		1,26		0,29
- - ohne Ausreißer n. Grubbs	18 (2)	18	2,582	2,8002	2,8050	3,0450	0,129	0,0304		0,141		0,92		0,22
- bei 620 nm	21	21	0,472	0,6171	0,6200	0,8380	0,074	0,0161		0,0500		1,48		0,32
- ohne Ausreißer n. Grubbs	20 (1)	20	0,472	0,6061	0,6195	0,6980	0,055	0,0123		0,0500		1,10		0,25

Erläuterungen zur Tabelle 5:
Die Berechnung der statistischen Kennzahlen erfolgte ohne die Werte zur Auswertenummer 76
Labor-Stdabw. (s_L) = Standardabweichung der Werte zwischen den Laboratorien
Labor-Stdfehler (u_M)= Standardfehler des Mittelwertes der Laborergebnisse
Zielstdabw. n. Horwitz (s_H) = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz
Zielstdabw. experim. (s_{exp}) = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten (z.B. OIV-Methoden)

Quotient s_L/s_H = Quotient aus Labor-Stdabw. (s_L) und der Zielstandardabweichung n. Horwitz
Quotient s_L/s_{exp} = Quotient aus Labor-Stdabw. (s_L) und der Zielstdabw. experim. (s_{exp})
Quotient u_M/s_H = Quotient aus dem Stdfehler des Mittelw. und der Zielstdabw. n. Horwitz (s_H)
Quotient u_M/s_{exp} = Quotient aus dem Stdfehler des Mittelw. und der Zielstdabw. experim. (s_{exp})

Alle Werte: Gesamtzahl der betrachteten Werte ausschließlich der in Klammern angegebenen Anzahl der Werte, die um mehr als 50 % vom Median abweichen oder im Grubbs-Test als Ausreißer identifiziert wurden.
Blaue Markierungen kennzeichnen auffällige Befunde, die im Text diskutiert werden.
Rote Markierungen kennzeichnen die Überschreitung von Grenzwerten für eine gültige Z-Score-Bewertung.

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung belegt die Zusammenstellung der deskriptiv-statistischen Daten in der vorstehenden Tabelle 5. Diese beruht auf den Ergebnissen der herkömmlichen, chemisch-physikalischen Bestimmungsverfahren, die für den Gesamterfolg der Laborvergleichsuntersuchung maßgeblich sind. Die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens wurden aus den in Abschnitt 2.3 genannten Gründen ausgeschlossen.

Laborergebnisse, die in fehlerhaften Einheiten angegeben wurden oder um mehr als 50 % vom Median abweichen, werden zwar mit Z-Scores bewertet aber bei den statistischen Auswertungen nicht berücksichtigt. Sofern derartige Werte auftraten, ist ihre Anzahl in der Spalte "Alle Werte" der Tabelle 5 in Klammern angegeben und in der davorstehenden Zahl nicht enthalten. Erkennbar in fehlerhaften Einheiten mitgeteilt wurden von sechs Teilnehmern Werte für Vorhandenen Alkohol (%vol statt g/L) und von einem Teilnehmer zum Parameter Citronensäure (g/L anstatt mg/L). Einzelne, um mehr als 50 % vom Median abweichende Ergebnisse, so z. B. bei den Parametern Weinsäure und Flüchtige Säure, dürften auf versehentlich fehlerhaften Eintragungen beruhen.

Bei den Parametern Freie Schweflige Säure und den Extinktionswerten zur Farbcharakteristik sind jeweils die Ergebnisse mehrerer Auswertungsvarianten dargestellt. Die Gründe werden nachstehend diskutiert. Dies geschieht insbesondere, wenn eine differenzierte Betrachtung für die Bewertung des Gesamtergebnisses bzw. eine zutreffende Bewertung der Ergebnisse der einzelnen Laboratorien oder zum Aufzeigen von Verbesserungspotential sinnvoll ist. Eine gemeinsame Bewertung mit den Ergebnissen aus einer anderen Gruppe von Laboratorien, die das identische Material untersucht hat, war nicht erforderlich. Für die Bewertung des Gesamtergebnisses der Laborvergleichsuntersuchung anhand der Daten der Tabelle 5 ist – ggf. in der für die Bewertung maßgeblichen Auswertungsvariante – zunächst auf den Anteil der Ergebnisse zu achten, die extrem, d. h. um mehr als den fünffachen Absolutbetrag der Zielstandardabweichung vom Bezugswert, dem Median abweichen ($|z| > 5$) und daher von der weiteren Auswertung ausgeschlossen werden. In der Tabelle unterscheiden sich bei Auftreten solcher Laborergebnisse die Werte in den Spalten „Alle Werte“ und „Gültige Werte“. Die für die Bewertung des Gesamterfolges der Laborvergleichsuntersuchung maßgebliche Auswertungsalternative wurde in der Regel auch für die Bewertung der Leistung der einzelnen Laboratorien verwendet. Auf der Basis der jeweils maßgeblichen Auswertungsalternative wich bei 22 von 26[1] ausgewerteten Parametern, nicht mehr als ein Ergebnis um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median ab. Hierbei blieben die von vornherein von den statistischen Berechnungen ausgeschlossenen Ergebnisse unberücksichtigt. Ein Ausschluss von jeweils zwei Laborergebnissen ergab sich bei den Parametern Relative Dichte, Vorhandener Alkohol und Extinktion/cm bei 420 nm. Die Ausschlussquote lag in der

[1] Die Varianten bei der Auswertung einzelner Parameter werden hierbei nicht als eigenständige Parameter gewertet.

Regel deutlich unter 10 % aller Laborergebnisse. Bei dem Parameter Reduktone wurden nach dem Ausschluss von 10 Laborergebnissen wegen mehr als 50 % Abweichung vom Median noch weitere 5 Laborergebnisse wegen einer Abweichung von mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median ausgeschlossen. Der höchstzulässige Anteil von 22,2 % wurde selbst bei Berücksichtigung aller ausgeschlossenen Ergebnisse bei dem Parameter Reduktone nicht erreicht.

Als weiteres Kriterium für eine gültige Bewertung der Laborleistung durch die Z-Scores sind die Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien (s_L) geteilt durch die Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H) bzw. geteilt durch die experimentelle Zielstandardabweichung (s_{exp}) (zusammengefasst kurz als s_{Ziel} bezeichnet) von besonderer Bedeutung. Der Wert dieses Quotienten soll unter der Voraussetzung der Verwendung einer geeigneten Zielstandardabweichung in der Regel unter 1,5 liegen und den Wert 2,0 nicht überschreiten, wenn die angewendeten Analysenverfahren beherrscht werden und im gegebenen Konzentrationsbereich für die Bestimmung der Parameter geeignet sind. Maßgeblich ist der Quotient, der erreicht wird, nachdem extreme Einzelergebnisse ausgeschlossen wurden. Bei Existenz einer experimentellen Zielstandardabweichung hat der mit ihr gebildete Quotient grundsätzlich Vorrang. Nur wenn keine experimentelle Zielstandardabweichung vorliegt oder diese für eine gültige Bewertung der Laborergebnisse ungeeignet ist, wird der Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung nach Horwitz für die Bewertung des Gesamterfolges der Laborvergleichsuntersuchung herangezogen.

Bei Rundung auf eine Nachkommastelle lag der Quotient s_L/s_{Ziel} aus der Laborstandardabweichung und der in der maßgeblichen Auswertungsvariante angewandten Zielstandardabweichung bei 20 der 26 Parameter ggf. nach Ausschluss der extrem abweichenden Ergebnisse unter 1,5 bzw. erreichte diesen Wert. Bei den Parametern Sorbinsäure und jodometrisch bestimmter Freier Schwefliger Säure wurde dieser Wert mit 1,6 geringfügig und bei den Parametern Weinsäure, Gesamte Gesamtäpfelsäure und Acetat mit Beträgen zwischen 1,8 und 2,0 deutlich überschritten. Ein Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} über 1,5 bedeutet eine signifikante Überschreitung der Zielstandardabweichung. Obwohl in dieser Situation bei ausreichend hoher Gesamtzahl an berücksichtigten Ergebnissen noch gültige Z-Scores erhalten werden, gibt dies Anlass zu näheren Prüfungen. Geprüft wird insbesondere auf eine Auswirkung systematischer Ergebnisunterschiede zwischen den Bestimmungsverfahren sowie auf das Vorliegen einzelner stark abweichender aber von den Ausschlussregeln nicht erfasster Laborergebnisse. Als weitere Ursache ist eine Abhängigkeit der Laborstandardabweichung von der Stoffkonzentration in Betracht zu ziehen, wenn die Zielstandardabweichung als Konstante vorgegeben ist.

Ein Betrag des Quotienten s_L/s_{Ziel} von 2,0 wurde nur bei der Bewertung der Ergebnisse für **Reduktone** deutlich überschritten. In diesem Fall ist die Berechnung gültiger Z-Scores nicht möglich. Um dies zu signalisieren werden die Daten für diesen Parameter in Tabelle 5 sowie

die entsprechenden Z-Scores in den Laborergebnistabellen des Abschnittes 5.22.1 in grauer Schrift dargestellt.

Schließlich ist die Zuverlässigkeit des Bezugswertes zu beachten. Sie wird durch den Quotienten aus dem Standardfehler des Mittelwertes (u_M) der bereinigten Daten und der Zielstandardabweichung (siehe Spalte 'Quotienten', Unterspalten 'u_M/s_H' und 'u_M/s_{exp}' der Tabelle 5) beschrieben. Liegt dessen auf eine Ziffer gerundeter Wert nicht über 0,3 ist nach den Aussagen der Norm ISO 13528 keine zu beachtende Auswirkung der Unsicherheit des Bezugswertes auf die Bewertung der Laborergebnisse durch die Z-Scores gegeben. Diese Bedingung war bei 23 von 26 Parametern erfüllt. Mäßig erhöht, d.h. gerundet nicht über 0,5 ist der Quotient bei den Parametern **Citronensäure** und **Sorbinsäure**. Dies zeigt eine **eingeschränkte Zuverlässigkeit** des Bezugswertes an, die bei der Bewertung der Z-Scores zu beachten ist. Der Höchstwert 0,5, bei dessen Überschreiten keine ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben ist, wird nur bei dem Parameter **Gesamtäpfelsäure** überschritten.

Liegt der Quotient s_L/s_{Ziel} unter 1,5 und der Quotient u_M/s_{Ziel} nicht über 0,3 wird die Laborleistung durch den Z-Score uneingeschränkt zutreffend bewertet. Mit Ausnahme der vorstehend angesprochenen Ergebnisgruppen ist **die Bewertung der Leistung der einzelnen Laboratorien durch den Z-Score auf der Basis der jeweils einbezogenen Laborergebnisse und eingesetzten Zielstandardabweichung ohne weitere Erwägungen aussagekräftig**.

4 Anmerkungen zu einzelnen Parametern und Methoden

4.1 Vorhandener Alkohol

Der Parameter Vorhandener Alkohol wurde nach verschiedenen Destillationsverfahren, refraktometrisch, hochleistungsflüssigkeitschromatographisch sowie mittels Nahinfrarotspektroskopie (NIR) und Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) im mittleren Infrarot bestimmt. Eine Berechnung der deskriptiv-statistischen Kennzahlen auf der Grundlage der Ergebnisse aller herkömmlichen Methoden führt häufig zu einem merklich erhöhten Wert des Quotienten aus Laborstandardabweichung (s_L) und experimenteller Zielstandardabweichung (s_{exp}). Da der "wahre Alkoholgehalt" in der Weinanalytik durch die Destillationsmethoden definiert ist, erfolgte die Bewertung der Laborergebnisse auf der Basis der Ergebnisse mit Destillationsverfahren, bei denen sich ein sehr guter Wert des Quotienten s_L/s_{exp} von 0,89 und eine uneingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes ergab.

4.2 Vergärbare Zucker

Auch bei dem Parameter Vergärbare Zucker sind grundsätzlich methodenbedingte Unterschiede zwischen den Ergebnissen reduktometrischer und spezifischer, der gültigen Definition des Zuckerbegriffes genügender Untersuchungsmethoden, d. h. der Ergebnisse enzyma-

tischer und hochleistungsflüssigkeitschromatographischer Verfahren zu erwarten. Daher wurden, wie seit der Laborvergleichsuntersuchung 2010 gehandhabt, bei der Bewertung der Laborergebnisse und damit der Laborleistung ausschließlich die Ergebnisse spezifischer Methoden zugrunde gelegt. Wie bei Rotweinen zu erwarten fielen die Laborergebnisse mit dem Verfahren nach Rebelein signifikant höher aus. Eine Ursache dafür ist das Fehlen einer Vorbehandlung zur Entfernung von Gerbstoffen bei diesem Schnellverfahren. Es liegt in der Verantwortung des Labors bei der Analyse diesen systematischen Effekt zu berücksichtigen.

4.3 Weinsäure

In der Tabelle 5 ist für den Parameter Weinsäure nach Ausschluss eines Laborergebnisses ein erhöhter Quotient s_L/s_{Ziel} von 1,8 ausgewiesen. Weitere auffällig von der Gesamtheit abweichende Laborergebnisse liegen nicht vor. Eine wesentliche Abhängigkeit der Laborergebnisse (siehe Abschnitt 5.13.3) vom Bestimmungsverfahren ist nicht gegeben. Die robusten Standardabweichungen der zumeist eingesetzten Bestimmungsmethoden HPLC und automatisierte Photometrie zeigen aber gegenüber der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung deutlich erhöhte Werte. Da das Gesamtergebnis für diesen Parameter daher deutlich ungünstiger als bei der Untersuchung eines Schaumweines im Vorjahr ausgefallen ist, liegt es nahe einen Einfluß des Prüfgutes Rotwein anzunehmen. Infolge der relativ hohen Anzahl von 39 Laborergebnissen wird trotz der großen Streuung der Laborergebnisse eine voll befriedigende Zuverlässigkeit des Bezugswertes erreicht. Somit sind die **Z-Scores** als **uneingeschränkt gültige** Bewertung der Laborleistung zu betrachten.

4.4 Gesamtäpfelsäure

Zur Bewertung der Laborergebnisse zum Parameter **Gesamtäpfelsäure** wird eine für **L-Äpfelsäure** für die enzymatische Bestimmungsmethode OIV-MA-AS313-11 angegebene, von der Konzentration des Analyten linear abhängige Vergleichsstandardabweichung als Zielstandardabweichung verwendet. Nach zwei Ausschlüssen ist das Gesamtergebnis für den Parameter **Gesamtäpfelsäure** mit einem Wert des Quotienten s_L/s_{Ziel} von 2,02 unbefriedigend, da der Höchstwert für diesen Quotienten erreicht ist. Zugleich überschreitet wegen der geringen Anzahl von 13 verbleibenden Laborergebnissen der Quotient u_M/s_{Ziel} mit 0,56 den Höchwert für die Ermittlung gültiger Z-Scores, da die Unsicherheit des Bezugswertes zu groß ist. Die nähere Betrachtung der vorliegenden Daten zeigt (siehe die Graphiken im Abschnitt 5.14), dass neben den ausgeschlossenen Werten zwei weitere auffällig von den übrigen Laborergebnissen abweichende Werte mit Z-Scores im Absolubetrag über 4 vorliegen. Ein Grubbs-Test belegt, dass beide Werte als Ausreißer zu betrachten sind. Bei unverändertem Bezugswert ergeben sich nach deren Ausschluss unauffällige Werte sowohl für den Quotienten s_L/s_{Ziel} als auch für den Quotienten u_M/s_{Ziel}. Weiterhin hat die Untersuchung desselben Prüfgutes in einer weiteren Laborvergleichsuntersuchung mit einem Median von 1,235 g/L bei einem Quotienten u_M/s_{Ziel} von 0,2 einen zuverlässigen Wert ergeben,

der praktisch mit dem hier gefundenen Bezugswert von 1,210 g/L übereinstimmt. Die erhaltenen **Z-Scores** werden daher als **uneingeschränkt gültig** bewertet.

4.5 Acetat

Bei Einbeziehen aller 27 automatisiert enzymatisch und 6 mittels HPLC ermittelten Laborergebnisse weist der Quotient s_L/s_{Ziel} mit 1,87 einen deutlich erhöhten Wert bei nicht eingeschränkter Zuverlässigkeit des Bezugswertes auf. Die automatisiert enzymatisch bestimmten Laborergebnisse prägen das Gesamtergebnis. Die Ergebnisse mit dieser Methode sind, wie stets in Laborvergleichsuntersuchungen beobachtet, jedoch höher (Median 0,650 g/L) als die Ergebnisse mittels HPLC (Median 0,575 g/L). Der beobachtete Unterschied ist charakteristisch, jedoch nicht statistisch gesichert. Daher wurde anders als im Vorjahr eine gemeinsame Bewertung für die Ergebnisse beider Verfahrensgruppen durchgeführt. Bestimmungen, die zur Zeit der Durchführung dieser Laborvergleichsuntersuchung mittels ^{1}H-Kernresonanzspektroskopie (0,580 g/L; 0,627 g/L) sowie nach Neutralisation enzymatisch automatisiert (0,622 g/L; 0,535 g/L) durchgeführt wurden, blieben hierbei unberücksichtigt, weisen aber ebenfalls einen charakteristischen Unterschied zu den Ergebnissen der automatisiert enzymatischen Bestimmung auf. Es ergeben sich **gültige Z-Scores**. Bei deren laborinterner Würdigung sind jedoch die charakteristischen Einflüsse des Untersuchungsverfahrens zu berücksichtigen, weil eine analytische Richtigkeit der die Auswertung prägenden Laborergebnisse nicht belegt ist.

4.6 Flüchtige Säure

Die Flüchtige Säure ist ein konventioneller, d. h. durch die Bestimmung unter Einhaltung der Untersuchungsbedingungen der Methode OIV-MA-AS313-2 (Methode des Typs I) definierter Parameter. Das Prinzip des Verfahrens ist eine Abtrennung flüchtiger Stoffe aus dem Probematerial durch Destillation und anschließende acidimetrische Titration. Die Berechnung der Konzentration erfolgt als Essigsäure, die den Hauptbestandteil der sauren flüchtigen Stoffe darstellt. Wegen der Miterfassung weiterer sauer reagierender, flüchtiger Bestandteile ist der Ergebniswert grundsätzlich höher als der mit spezifischen Methoden bestimmte Gehalt an Essigsäure. Durch den Sorbinsäuregehalt im vorliegenden Prüfgut wird dieser Sachverhalt beim Vergleich der Gesamtergebnisse für Acetat (berechnet als Essigsäure) und Flüchtige Säure besonders deutlich. Die Empfehlungen des Verbandes zur Durchführung der Bestimmung dieses Parameters waren in der Exceldatei zur Ergebnismitteilung enthalten.

Das Ergebnis der Bestimmung der Flüchtigen Säure sollte unter Korrektur des Einflusses der Schwefligen Säure mitgeteilt werden und wurde auf dieser Grundlage bewertet, weil diese Vorgehensweise verbindlicher Bestandteil der OIV-Methode ist. Da die Korrektur differenziert nach der im Destillat enthaltenen Freien und Gebundenen Schwefligen Säure durchzuführen ist, wurden in die oben genannten Empfehlungen neu gefasste Formeln zur Berech-

nung der Korrektur als Essigsäure in der Einheit g/L aufgenommen. Abweichend von der OIV-Methode wurde keine Korrektur des Einflusses der in das Destillat übergegangenen Sorbinsäure gefordert, da dieser Stoff von der Mehrzahl der teilnehmenden Labortorien nicht routinemäßig bestimmt wird. Die Mitteilung der Korrekturbeträge im Falle der Berücksichtigung eines erhöhten Blindwertes und für den Einfluss der Schwefligen Säure wurde – berechnet als Essigsäure im Prüfgut – in der Einheit g/L erbeten.

Einer besonderen Tabelle im Datenbereich (Abschnitt 5.20.2) kann entnommen werden, dass die zusätzlichen Angaben erheblich unvollständig waren. Nur zu 16 von 27 Ergebnissen aus Destillationsverfahren erfolgte eine Angabe zur Wiederfindung. Auch die weiteren erbetenen Angaben waren unvollständig und z. T. widersprüchlich. Schließlich erfolgten die Angaben zum Blindwert nach den mitgeteilten Zahlenwerten augenscheinlich mehrfach als Laugenverbrauch in der Einheit mL und nicht, wie erbeten, als Essigsäure in der Einheit g/L.

Von insgesamt 27 Laborergebnissen mit anderen Methoden als der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie wurde nur bei zwei Laborergebnissen der Einfluss der Schwefligen Säure entgegen den Vorgaben nicht berücksichtigt. Unter Einhalten der vorgeschriebenen Arbeitsbedingungen erstellt wurden 25 Laborergebnisse. Den Ergebnissen aus gemeinschaftlichen Untersuchungen der Verbandsmitglieder folgend wurden diese bei dem vorliegenden Median von 0,820 g/L auf der Basis der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung von ± 0,0478 g/L als Zielstandardabweichung bewertet. Abgesehen von zwei um mehr als 50 % vom Median abweichenden Ausreißern ergab sich kein Ausschluss von Laborergebnissen. Der Quotient s_L/s_{Ziel} von 1,1 war sehr unauffällig und der Wert des Quotienten u_M/s_{Ziel} von 0,22 zeigt die Zuverlässigkeit des Bezugswertes an. Anders als im Vorjahr wurden somit ein sehr zufriedenstellendes Gesamtergebnis und **gültige Z-Scores** erhalten.

4.7 Sorbinsäure

Für den Parameter Sorbinsäure ergab die Auswertung der Laborergebnisse mit herkömmlichen Methoden einen geringfügig über dem Richtwert 1,5 liegenden Quotienten s_L/s_{Ziel} von 1,6. Der Quotient u_M/s_{Ziel} von 0,49 zeigt eine zu beachtende Unsicherheit des Bezugswertes an. Eine nähere Betrachtung der 11 Laborergebnisse läßt keine Ausreißer und keine systematischen Unterschiede zwischen den Ergebnissen der eingesetzten Methoden erkennen. Der erhöhte Wert des Quotient u_M/s_{Ziel} ist daher bei der gegebenen erhöhten Streuung der Laborergebnisse primär auf deren geringe Anzahl zurückzuführen. Bei Berücksichtigung dieses Sachverhaltes sind die **Z-Scores** als nur geringfügig eingeschränkt **zuverlässig** zu betrachten.

4.8 Schweflige Säure und Reduktone

Die **jodometrische** Bestimmung der Schwefligen Säure ist in der Praxis das überwiegend eingesetzte Bestimmungsprinzip. Allerdings werden hierbei auch andere Stoffe, die Reduktone und insbesondere zugesetzte Ascorbinsäure, erfasst, die unter den Bedingungen des

Untersuchungsverfahrens durch Jod oxidiert werden. Die Reduktone werden daher bei Weinen mit erhöhtem Gehalt gesondert bestimmt und in Abzug gebracht, um zutreffendere Ergebnisse für den wahren Gehalt an Schwefliger Säure zu erhalten. Zugleich ist aus Laborvergleichsuntersuchungen und anderen Ringversuchen bekannt, dass die Bestimmung der Reduktone eine große Streuung der Ergebnisse aufweist. Je nach dem Anteil der Reduktone am Gesamtwert, dem Vorgehen bei der Ergebnismitteilung und Berechnung der Zielstandardabweichung kann eine mangelnde Beherrschung der jodometrischen Bestimmung vorgetäuscht werden. Daher wird den Teilnehmern bei Zusendung der Proben mitgeteilt, ob der Gehalt an Reduktonen zu bestimmen und vom Ergebnis jodometrischer Bestimmungen abzuziehen ist oder nicht.

Für die Ergebnismitteilung galt im dritten Jahr die Vorgabe, die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen der Schwefligen Säure so mitzuteilen, wie dies gegenüber den Kunden nach guter fachlicher Praxis und/oder den Vorgaben des Qualitätsmanagementsystems des Labors geschieht.

4.8.1 Reduktone

Da bei Rotweinen von einem bestimmbaren Gehalt an Reduktonen auszugehen ist, wurde im Begleitschreiben zu den Proben für den Fall jodometrischer Bestimmung der Schwefligen Säure die Bestimmung der Reduktone aufgegeben. Es wurde eine Reaktionszeit von 20 Minuten zur Bindung der Freien Schwefligen Säure empfohlen. Dieser Empfehlung wurde nur bei 39 von 69 Laborergebnissen gefolgt. Bei 18 Ergebnissen wurde eine kürzere Reaktionszeit und bei 5 eine längere Reaktionszeit verwendet. Bei 7 Ergebnissen fehlte die Angabe. Die mangelhafte Befolgung der Empfehlung ist unbefriedigend. 10 Laborergebnisse wichen um mehr als 50 % vom Median bei 12 mg/L ab und weitere 5 Laborergebnisse waren wegen eines Z Scores >|5| auszuschließen. Ihr Anteil betrug somit insgesamt 21,7 % und erreichte fast den für die Ermittlung gültiger Z-Scores zulässigen Maximalanteil von 22,2 %. Die Standardabweichung der verbleibenden Laborergebnisse war um den Faktor 2,23 höher als die nach Horwitz berechnete Zielstandardabweichung. Es konnten daher **keine gültigen Z-Scores** ermittelt werden.

4.8.2 Freie Schweflige Säure

Die Mittelwerte der Laborergebnisse für **Freie Schweflige Säure** sind zwischen den drei Ergebnisgruppen Verfahren ohne Reduktoneinfluss (Destillation, Photometrie, FTIR), jodometrisch bestimmte Laborergebnisse ohne Reduktonabzug bzw. mit Reduktonabzug signifikant verschieden. Die Laborergebnisse jeder Gruppe wurden daher getrennt bewertet. Das Leistungskriterium (Zielstandardabweichung) wurde für die **beiden ersten Gruppen nach Horwitz** berechnet. Die Bewertung der **jodometrisch unter Reduktonabzug** erhaltenen Laborergebnisse erfolgte aufgrund der Erfahrungen aus den Vorjahren auf der Grundlage der Zielstandardabweichung, die auf der Basis der Laborergebnisse einschließlich der Reduktone berechnet wurde. Die gegenüber der Gruppe der jodometrischen Laborergebnisse ohne Reduktonabzug leicht erhöhten Werte der Quotienten s_L/s_{Ziel} und u_M/s_{Ziel} sind als Folge

der unbefriedigenden Vergleichbarkeit der ermittelten Reduktonwerte zu sehen. Für jede Gruppe sind die erhaltenen **Z-Scores gültig.**

4.8.3 Gesamte Schweflige Säure

Referenzverfahren für die Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure sind die Destillationsverfahren. Ungeachtet der im Einzelfalle angewendeten Bestimmungsmethode wurden alle Ergebnisse der Bestimmung der **Gesamten Schweflige Säure** wie mitgeteilt mit dem Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren und der Vergleichsstandardabweichung des Referenzverfahrens als Zielstandardabweichung bewertet. Diese Bewertung **ist als verbindlich** zu betrachten, da die Erwartung an die Richtigkeit und Vergleichbarkeit der Laborergebnisse durch das Referenzverfahren OIV-MA-AS323-04A geprägt wird. Es ergaben sich keine signifikanten Unterschiede für die Laborergebnisse aus Destillationsverfahren bzw. jodometrischer Bestimmung einschließlich oder unter Abzug der Reduktone. Bei einem noch unauffälligen Quotienten s_L/s_{Ziel} von 1,50 und einem Quotienten u_M/s_{Ziel} von 0,30 sind die ausgewiesenen **Z-Scores gültig**.

4.9 Farbcharakteristik

Erstmals wurde in dieser Laborvergleichsuntersuchung die Möglichkeit zur Bestimmung der Farbwerte bzw. der Farbcharakteristik angeboten. Nach zuvor eingezogenen Auskünften bei den Mitgliedern des Verbandes, die die Aufnahme dieser Bestimmungen unter die Parameter der Laborvergleichsuntersuchung angeregt haben, wird in der Praxis vor allem das Verfahren zur Bestimmung der Farbcharakteristik nach der Methode OIV-MA-AS2-07B, ein Typ IV- und damit ein gebräuchliches Verfahren angewendet, das auch in die VO (EG) Nr. 2676/90, Anhang Nr. 40 aufgenommen wurde. Hierbei erfolgt die Messung der Extinktion mit einem Photometer bei den drei Wellenlängen 420 nm, 520 nm und 620 nm unter Verwendung einer Küvette mit einer Schichtdicke, bei der sich eine Extinktion zwischen 0,3 und 0,7 ergibt. Das Messergebnis wird auf eine Schichtdicke von 1 cm umgerechnet. Hieraus werden zwei abgeleitete Werte zur Beschreibung der Farbcharakteristik berechnet.

In dieser Laborvergleichsuntersuchung wurden die Messergebnisse für eine Schichtdicke von 1 cm für die drei Wellenlängen abgefragt. Zur Bewertung der Laborergebnisse mittels Z-Scores ist neben der Ermittlung des Median der Laborergebnisse als Leistungskriterium eine Zielstandardabweichung erforderlich. Diese soll grundsätzlich unabhängig von den vorliegenden Laborergebnissen sein. Ergebnisse eines Methoden prüfenden Ringversuchs mit Ermittlung einer Vergleichsstandardabweichung, die in dieser Laborvergleichsuntersuchung bevorzugt als Leistungskriterium verwendet werden könnte, sind nicht bekannt. Die daneben hilfsweise verwendete Berechnung einer zu erwartenden Vergleichsstandardabweichung nach dem Verfahren von Horwitz ist nicht möglich, da die Messgröße nicht als Konzentrationseinheit ermittelt wird. Es musste daher auch die Zielstandardabweichung aus den eingesandten Laborergebnissen ermittelt werden. Hierfür empfiehlt die Norm DIN/ISO 13528 die Berechnung einer robusten Standardabweichung nach einem in der Norm DIN/ISO 5725

beschriebenen und als 'Algorithmus A' bezeichneten Verfahren. Der Einfluss in praktisch jeder Laborvergleichsuntersuchung auftretender extrem abweichender Laborergebnisse (Ausreißer) auf den Wert der Standardabweichung wird hierbei vermindert, aber nicht ausgeschlossen. Das Berechnungsverfahren enthält einen Zuschlag für die bei chemisch-physikalischen Untersuchungsergebnissen häufig auftretenden Abweichungen von der Normalverteilung nach Gauß. Ein Verfahren zur Identifizierung von Ausreißern nach statistischen Kriterien ist der Ausreißertest nach Grubbs, der insbesondere auf die Ergebnisse in Methoden prüfenden Ringversuchen angewendet wird. Da die graphischen Darstellungen, insbesondere der Abweichungen der Laborergebnisse vom Median, bei allen drei Wellenlängen auffällig stark abweichende Laborergebnisse zeigten, wurde wie in Methoden prüfenden Ringversuchen der Test nach Grubbs gemäß Empfehlung der AOAC bei einer statistischen Sicherheit von 97,5 % zur Prüfung eingesetzt, ob die stark abweichenden Ergebnisse als Ausreißer zu charakterisieren sind. Der Test wurde wiederholt bis keine Ausreißer mehr nachweisbar waren. Für die verbleibenden Laborergebnisse wurde die robuste Standardabweichung nach dem Algorithmus A berechnet. Die Werte der so erhaltenen Zielstandardabweichungen sowie der Quotienten s_L/s_{Ziel} zeigt die nachstehende Tabelle. Für alle drei Parameter wurden **gültige Z Scores** erhalten.

Tabelle 6: Zielstandardabweichungen für die Farbcharakteristik

Parameter	Ausreißer n. Grubbs	Zielstandardabweichung (s_{Ziel})	Quotient s_L/s_{Ziel}
Extinktion pro cm bei 420 nm	3	± 0,1026	0,98
Extinktion pro cm bei 520 nm	2	± 0,1408	1,26
Extinktion pro cm bei 620 nm	1	± 0,0499	1,48

4.10 Ergebnisse der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie

Wie im Abschnitt 2.2 mitgeteilt, wurde Laboratorien, die das Verfahren der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im Bereich des mittleren Infrarot, hier kurz als FTIR-Verfahren bezeichnet, anwenden, die Möglichkeit eingeräumt, einen zusätzlichen Befund mit diesem Verfahren unter Verwendung einer freigestellten Kalibrierung zu erstellen und einzusenden. Dies ermöglicht den Teilnehmern aktuell den Stand dieser Analytik zu überprüfen. Insgesamt wurden von 24 Teilnehmern Ergebnisreihen der FTIR-Untersuchung eingesandt. Vereinzelt wurden auch einzelne FTIR-Ergebnisse als Bestandteil der mit herkömmlichen Verfahren erstellten Ergebnisreihen mitgeteilt, ohne eine eigenständige FTIR-Ergebnisreihe zu übermitteln. Außerdem war der Umfang der in den FTIR-Befunden mitgeteilten Parameterliste nach der Entscheidung des einzelnen Labors unterschiedlich. Daher schwankt die Gesamtzahl der FTIR-Untersuchungsergebnisse zwischen den Parametern.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen (Produktkalibrierungen der Teilnehmer)

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Zielstdabw exp. FTIR s_{FTIR}	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	23	1,00461	1,00460	0,000325		0,000146		2,23	0,46
Vorhandener Alkohol (g/L)	26	90,169	90,255	1,227	2,592	0,739	0,47	1,66	0,33
Gesamtextrakt (g/L)	7	51,757	51,600	0,973	1,612	0,415	0,60	2,34	0,89
Vergärbare Zucker(r) (g/L)	20	23,516	23,500	0,544	0,827	0,354	0,66	1,54	0,34
Glucose (g/L)	23	11,604	11,750	0,486	0,459	0,288	1,06	1,69	0,35
Fructose (g/L)	23	11,509	11,500	0,441	0,450	0,222	0,98	1,99	0,41
Glycerin (g/L)	15	7,096	7,000	0,523	0,295	0,265	1,77	1,97	0,51
pH-Wert	25	3,500	3,500	0,0501		0,0188		2,66	0,53
Gesamtsäure (g/L)	25	6,750	6,730	0,187	0,286	0,0816	0,66	2,30	0,46
Weinsäure (g/L)	24	2,145	2,130	0,220	0,108	0,132	2,05	1,67	0,34
Gesamtäpfelsäure (g/L)	23	1,026	1,070	0,343	0,0599	0,0975	5,73	3,52	0,73
Gesamtmilchsäure (g/L)	24	1,905	1,870	0,240	0,0963	0,0805	2,50	2,99	0,61
Acetat (als Essigsäure) (g/L)	4	0,7593	0,7650	0,0635	0,0451	0,0451	1,41	1,41	0,70
Flüchtige Säure (g/L)	18	0,7268	0,7150	0,0769	0,0425	0,0427	1,81	1,80	0,42
Freie Schweflige Säure (mg/L)	3	28,36	30,00	3,21	2,88	2,88	1,12	1,12	0,65
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	2	107,50	107,50	13,63	8,51	8,51	1,60	1,60	1,13

Zu Beginn des Abschnitts 3 wurde begründet, warum alle FTIR-Ergebnisse bei der Auswertung der Laborvergleichsuntersuchung insoweit unberücksichtigt blieben, als sie nicht zur Ermittlung des Bezugswertes und der Laborstandardabweichung sowie der darauf beruhenden Bewertungsgrößen für den Gesamterfolg der Laborvergleichsuntersuchung herangezogen wurden. Es erfolgt aber eine Bewertung der Laborergebnisse. Für die Parameter Relative Dichte, Vorhandener Alkohol, Gesamtextrakt, Vergärbare Zucker, Gesamtsäure, Glucose, Fructose, Glycerin, pH-Wert, Weinsäure, Gesamtäpfelsäure, Gesamtmilchsäure und Flüchtige Säure hat der Wissenschaftliche Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung Zielstandardabweichungen ($s_Ü$) empfohlen, die den bei der FTIR-Untersuchung möglichen Matrixeinfluss berücksichtigen. Eine Tabelle dieser Zielstandardabweichungen ist veröffentlicht[2]. Sie wurden mit Ausnahme der Parameters Gesamtextrakt, Vergärbare Zucker und Fructose zur Bewertung der Laborergebnisse verwendet. Für diese Parameter ist die zur Bewertung der Untersuchungsmethoden mit herkömmlichen Methoden verwendete Zielstandardabweichung größer als die Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung. Daher wurden diese Parameter mit den Zielstandardabweichungen für die Ergebnisse herkömmlicher Methoden bewertet.

Obwohl die Kalibrierungen zur Ermittlung des Vergärbaren Zuckers ursprünglich auf der Grundlage reduktometrischer Bestimmungen erstellt wurden, wurden diese Laborergebnisse entsprechend den geltenden Definitionen unter Bezug auf den Median der Ergebnisse spezifischer Zuckerbestimmungsmethoden bewertet. Einzelne FTIR-Messergebnisse für oben nicht genannte Parameter, insbesondere zuckerfreier Extrakt, Acetat und Freie Schweflige Säure wurden mit derselben Zielstandardabweichung wie die Ergebnisse herkömmlicher Verfahren bewertet, weil für diese Parameter keine Matrixeffekte berücksichtigenden Standardabweichungen bekannt sind bzw. im Fall der Freien Schwefligen Säure nicht erforderlich sind. Die FTIR-Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure wurden gemäß einer Empfehlung des Wissenschaftlichen Arbeitsausschusses FTIR-Kalibrierung vom 07.03.2018 aufgrund der Ergebnisse des methodenprüfenden Ringversuches und unter Berücksichtigung der inzwischen mehrjährigen Erfahrungen bei Laborvergleichsuntersuchungen mit der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung bewertet.

Wenn einzelne FTIR-Ergebnisse als Bestandteil von Ergebnisreihen herkömmlicher Verfahren, d. h. Ergebnisreihen mit Auswertenummern unter 200, mitgeteilt wurden, wurde angenommen, dass der Einsender die Bewertung mit der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse herkömmlicher Methoden wünscht. Außerdem ist die Sonderbewertung derartiger "eingestreuter" Laborergebnisse mit der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichung sehr aufwendig.

Die Zuverlässigkeit der Bezugswerte und die Einhaltung des Höchstwertes für den Quotienten s_L/s_{Ziel} ist bei Vergleich mit den Ergebnissen der herkömmlichen Analytik auf der Grund-

[2] Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz, Bericht über die Laborvergleichsuntersuchung Wein 2010, Teil 1, Seite 15 (anzufordern beim Auswerter oder der Landwirtschaftskammer)

lage der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen ($s_Ü$) für alle genannten Parameter gegeben. Die **Z-Scores** stellen daher eine **gültige Bewertung** der Laborleistung dar.

Die Abweichungen der FTIR-Laborergebnisse vom Median der herkömmlichen Untersuchungsergebnisse und die wie beschrieben berechneten Z-Scores sind in den Ergebnistabellen des Abschnittes 5 aufgeführt aber in der Regel in den Graphiken nicht dargestellt. Die Teilnahmebescheinigungen für die Laboratorien stellen das mittels FTIR-Verfahren erhaltene Laborergebnis im Vergleich zum Median der Ergebnisse herkömmlicher Analytik dar. Es wurde in der Regel mit der Zielstandardabweichung ($s_Ü$) als Leistungskriterium bewertet.

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

In der Tabelle 7 werden daher die wesentlichen beschreibenden Daten einer ausschließlich die FTIR-Ergebnisse berücksichtigenden Auswertung der von den Labors eingesandten, mit deren Produktkalibrierungen erhaltenen FTIR-Messergebnisse zusammengefasst.

Diese wurden, wie bereits bei der Auswertung der beiden vorausgegangenen Laborvergleichsuntersuchungen und anders als bei den Ergebnissen der herkömmlichen Untersuchungsmethoden nicht unter Ausschluss stark abweichender Laborergebnisse, sondern durch ein robustes Verfahren zur Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung erhalten. Der Median aller FTIR-Messergebnisse einschließlich der Ausreißer bleibt Bezugswert. Ausreißer werden aber nicht ausgeschlossen, sondern ihr Einfluss auf Mittelwert und Standardabweichung 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 deutlicher erkennbar, ohne die Ermittlung zutreffender Z-Scores für einzelne Laborergebnisse zu beeinträchtigen, sofern genügend Laborergebnisse für eine ausreichende Sicherheit des

Bezugswertes vorliegen. Dies ist für die Parameter Gesamtextrakt, Acetat, Freie und Gesamte Schweflige Säure nicht der Fall, weil die Anzahl der Laborergebnisse zu diesen Parametern 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 den nach Horwitz berechneten, im Allgemeinen von geeigneten analytischen und beherrschten Verfahren erreichten Vergleichsstandardabweichungen 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, kann jeder Teilnehmer selbst mit den Medianwerten und den experimentellen Zielstandardabweichungen (s_{FTIR}) Z-Scores für den Vergleich der FTIR-Ergebnisse untereinander nach der Formel „Z-Score = (Messwert – Medianwert)/s_{FTIR}“ berechnen. Diese werden daher im Abschnitt 5 in den Tabellen der Laborergebnisse für die einzelnen Parameter nicht wiedergeben und sind in den Ergebnismitteilungen für die einzelnen Laboratorien ebenfalls nicht enthalten. Die Streuung dieser Messergebnisse wird neben dem Pflegezustand der Geräte von den unterschiedlichen eingesetzten Produktkalibrierungen und den ggf. durchgeführten Slope-Interzept-Korrekturen geprägt.

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.

Ein Vergleich der in dieser Laborvergleichsuntersuchung gefundenen Standardabweichungen der Laborergebnisse (Spalte "Labor-Stdabw. s_L") in der Tabelle 7 mit den Vergleichsstandardabweichungen (Spalte "Zielstdabw, s_{FTIR}"), die in die FTIR-Methode prüfenden Ringversuchen erhalten wurden, zeigt wie an den Daten in der Spalte "Quotient s_L/s_{FTIR}" ablesbar ist, dass der Wert 1,5 nur bei drei Parametern eingehalten wird. Bei weiteren sieben der 16 Parameter liegt der Quotient zwischen 1,5 und dem Höchstwert von 2,0. Insgesamt zeigen diese Befunde eine gewisse Verbesserung gegenüber dem Vorjahr. Dennoch wird wiederum sehr deutlich, dass bei den FTIR-Untersuchungen die Leistungsfähigkeit des Verfahrens nicht erreicht wurde bzw. zumindest ein Teil der eingesetzten Produktkalibrierungen in hohem Maße gegenüber den vorliegenden Matrixveränderungen empfindlich ist. Darüber hinaus ist zu beachten, dass – vor allem infolge der im Verhältnis zu den großen Standardabweichungen der Laborergebnisse geringen Ergebnisanzahl – die Daten der Spalte

Quotient u_M/s_{FTIR}" nur in drei Fällen eine uneingeschränkte und in 6 Fällen eine unzureichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes (Mittelwert/Median) anzeigen.

Nur 7 Teilnehmer haben außer ihren FTIR-Messergebnissen die spektralen Rohdaten als CSV- oder FSS-Dateien eingesandt. Daher wurde auf eine Auswertung unter Neuberechnung der Laborergebnisse mit einer empfohlenen Produktkalibrierung verzichtet.

Schließlich ist von Interesse, inwieweit die Zentralwerte (Mittelwerte bzw. Mediane) der Ergebnisse der Vergleichsverfahren und des FTIR-Verfahrens übereinstimmen respektive voneinander abweichen. Anhaltspunkte für das Auftreten und Ausmaß von Matrixeinflüssen liefert die Abweichung des Median der FTIR-Ergebnisse vom Median der Ergebnisse der Vergleichsmethoden sowie der Z-Score, der nach Division dieser Abweichung durch den Wert der jeweiligen Zielstandardabweichung, in der Regel der Matrixeffekte berücksichtigenden Übereinstimmungsstandardabweichung ($s_{Ü\ FTIR}$) erhalten wird. Diese Daten enthält die Tabelle 8.

Tabelle 8: Vergleich der Mediane der Untersuchungsergebnisse mit FTIR und herkömmlichen Verfahren (Produktkalibrierungen der Teilnehmer)

Parameter [Einheit]	Median FTIR	Median herk. Verf.	Abweichung	ZielStdAbw	Z-Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,00460	1,00440	0,000200	0,000190	1,05
Vorhandener Alkohol [g/L]	90,255	90,100	0,155	0,886	0,17
Gesamtextrakt [g/L]	51,600	50,600	1,000	0,594	1,68
Vergärbare Zucker, wie mitgeteilt	23,500	23,200	0,300	0,584	0,51
Vergärbare Zucker (red.) [g/L]	23,500	23,95000	-0,450	0,584	-0,77
Glucose [g/L]	11,750	11,400	0,350	0,408	0,86
Fructose [g/L]	11,500	11,700	-0,200	0,330	-0,61
Glycerin [g/L]	7,000	7,300	-0,300	0,348	-0,86
pH-Wert	3,500	3,520	-0,020	0,049	-0,41
Gesamtsäure [g/L]	6,730	6,805	-0,075	0,145	-0,52
Weinsäure [g/L]	2,130	2,200	-0,070	0,227	-0,31
Gesamtäpfelsäure [g/L]	1,070	1,210	-0,140	0,218	-0,64
Gesamtmilchsäure [g/L]	1,870	2,140	-0,270	0,209	-1,29
Flüchtige Säure [g/L]	0,7150	0,8200	-0,105	0,089	-1,18
Freie Schweflige Säure [mg/L]	30,00	26,20	3,80	2,564	1,48
Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	107,50	120,50	-13,00	9,373	-1,39

Die absoluten Werte der Z-Scores betragen bei 9 der 15 Parameter bis zu 1,0. Sie zeigen damit an, dass bei diesen Parametern kein wesentlicher Matrixeffekt vorgelegen hat. Derartige Differenzen werden auch zwischen den mittleren Ergebnissen herkömmlicher Verfahren beobachtet. Sie sind nicht ungewöhnlich bzw. für die praktische Nutzung der Untersuchungsergebnisse nicht relevant. Damit eignen sich die Z-Scores für diese Parameter zur Prüfung auf die Eignung und Pflege der eingesetzten Kalibrierung. Die Z-Score-Beträge für Relative Dichte, Gesamtmilchsäure und Flüchtige Säure sind mäßig erhöht. Die erhöhten absoluten Z-Scores für Freie und Gesamte Schweflige Säure sind in Anbetracht der geringen Anzahl an Laborergebnissen, die zu diesen Parametern vorliegen, nicht allgemein aussagekräftig. Ein zu beachtender Matrixeffekt wird jedoch für den Parameter Gesamtextrakt angezeigt. Bei dem Parameter Gesamtmilchsäure ist der negative Wert des Z-Scores charakteristisch für die Tatsache, dass in den Laborvergleichsuntersuchungen der letzten Jahre

in der Regel die mittels FTIR erhaltenen Werte geringer als die Ergebnisse herkömmlicher Methoden gefunden wurden. Bei dem Parameter Flüchtige Säure dürfte der negative Z-Score dahingegen darauf zurückzuführen sein, dass der Wert für Flüchtige Säure bei den herkömmlichen Untersuchungsergebnissen infolge der unterlassenen Korrektur für mitdestillierte Sorbinsäure, die mit etwa 0,1 g/L angesetzt werden kann, zu hoch liegt und somit die FTIR-Messergebnisse den wahren Gehalt in diesem Fall zutreffender wiedergeben.

5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern

5.1 Darstellung der analytischen Ergebnisse

Die analytischen Ergebnisse werden jeweils in Form von drei Tabellen und zwei Graphiken dargestellt.

Die Laborergebnistabelle enthält anonymisiert alle Angaben, die einzelne Laboratorien betreffen. Auswertenummern ohne Ergebnisse werden nicht aufgeführt, weil dies die Übersichtlichkeit des Berichtes verbessert.

5.1.1 Aufbau der Laborergebnistabelle

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

In der Tabelle der deskriptiven Ergebnisse werden die beschreibenden statistischen Werte angegeben, die aus allen einbezogenen Laborwerten (Spalte: alle Daten) bzw. den nach Ausschluss stark abweichender Ergebnisse verbleibenden, berücksichtigten Daten (Spalte: ber. Daten) berechnet wurden. Falls es zweckmäßig ist, können in dieser Tabelle eine Spalte oder Zeilen entfallen oder die Tabelle um zusätzliche Spalten erweitert werden.

Die Tabelle der Angaben zu den Analyseverfahren verbindet einen Überblick über die zur Bestimmung des jeweiligen Parameters eingesetzten Analyseverfahren und die Häufigkeit ihrer Anwendung mit einer orientierenden Information über eventuell verfahrensbedingte Ergebnisunterschiede und Ergebnisstreuungen. Hierzu dient eine Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung nach robusten statistischen Methoden, wodurch der Einfluss einzelner stärker abweichender Laborergebnisse vermindert wird.

5.1.2 Aufbau der Tabelle der deskriptiven Ergebnisse

Titelzeile:	Ergebnisse für [den bestimmten Analysenparameter];	alle Daten;	ber. Daten
Zeile 1	Anzahl der Laboratorien, die diesen Parameter bearbeitet haben		
Zeile 2:	Minimum: kleinster einbezogener Ergebniswert		
Zeile 3:	Mittelwert aus allen einbezogenen Ergebniswerten		
Zeile 4:	Median aller einbezogenen Ergebniswerte		
Zeile 5:	Maximum: größter einbezogener Ergebniswert		
Zeile 6:	Standardabweichung aus allen einbezogenen Laborergebniswerten (s_L)		
Zeile 7:	Standardfehler des Mittelwertes (einfache Unsicherheit) der einbezogenen Laborergebniswerte (u_M)		
Zeile 8:	Zielstandardabweichung: berechnet nach Horwitz (s_H)		
Zeile 9:	Zielstandardabweichung: experimentelle Vergleichsstandardabweichung ($s_{exp\ herk.}$)		
Zeile 10:	Zielstandardabweichung: experimentelle Matrixeffekte berücksichtigende Standardabweichung für Ergebnisse des FTIR-Verfahrens ($s_{Ü\ FTIR}$)		
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 ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$): 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 ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$): Quotient der Werte in Zeile 7 und Zeile 10		

5.1.3 Aufbau der Tabelle Methodenübersicht

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

5.1.4 Aufbau der Graphiken

Zur Veranschaulichung und zum optischen Vergleich werden für jeden Parameter sowohl die Abweichungen vom Median als auch die Z-Scores dargestellt. Beide Graphiken geben einen Eindruck über die Verteilung der Analysendaten. Die Darstellungsmaßstäbe wurden so gewählt, dass die Graphiken möglichst übersichtlich sind. Sie sind für die Darstellung der Abweichungen und der Z-Scores für alle Parameter im Prinzip gleich aufgebaut. In der Regel wurden nur die vorliegenden Laborergebnisse herkömmlicher Methoden dargestellt. Soweit nur ein Teil dieser Ergebnisse als Grundlage der Auswertung, d. h. zur Ermittlung des Median als Bezugswert und zur Ermittlung der Standardabweichung der Laborergebnisse herangezogen wurde, sind die berücksichtigten Ergebnisse als blaue und die anderen Ergebnisse als andersfarbige Balken dargestellt.

In der ersten Graphik werden die Abweichungen der Laborergebnisse vom Median in der Reihenfolge der Auswertenummern dargestellt. Der „0-Wert" entspricht exakt dem Median, dessen Betrag in der Graphik-Überschrift aufgeführt wird. Die Skala wurde so gewählt, dass die Abweichungsbeträge in der Regel vollständig dargestellt sind. Es wird dabei in Kauf ge-

nommen, dass bei erheblichen Abweichungen einzelner Laboratorien die geringen Abweichungen vom Median nicht bestmöglich dargestellt werden. Die Säulendarstellungen können unmittelbar mit den gewohnten analytischen Maßstäben verglichen werden. Die bei absoluten Z-Werten von 2 eingetragenen grünen Linien kennzeichnen das Verlassen des Normalbereiches und die bei absoluten Z-Werten von 3 eingetragenen roten Linien das Verlassen des Bereiches, der als richtig bzw. noch richtig zu bewertenden Ergebnisse.

Bei der zweiten Graphik wurden die aufsteigend sortierten Z-Score-Werte der Labors dargestellt. Der Wert „-1“ bedeutet, dass das Labor ein Ergebnis gemeldet hat, welches genau um die Zielstandardabweichung niedriger als der Median ist. Die bei absoluten Z-Werten von 2 bzw. 3 eingetragenen Linien kennzeichnen dieselben Bewertungsbereiche wie in der ersten Graphik. Die Skala zur Darstellung der Z-Scores wurde einheitlich für alle Graphiken auf den Bereich von -5 bis +5 festgelegt, so dass größere Z-Scores, die in der Regel nur bei einzelnen, stark abweichenden Ergebnissen erhalten werden, nicht vollständig dargestellt werden.

5.2 Relative Dichte 20 °C/20 °C

5.2.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
2	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
3	LwK 8.4	1,00435	-0,000050	-0,38	
4	LwK 8.4	1,00436	-0,000040	-0,30	
5	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
6	LwK 8.4	1,00445	0,000050	0,38	
7	LwK 8.4	1,00457	0,000170	1,29	
8	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
9	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
10	LwK 8.4	1,00450	0,000100	0,76	
11	LwK 8.4	1,00454	0,000140	1,06	
12	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
13	LwK 8.4	1,00452	0,000120	0,91	
15	LwK 8.4	1,00400	-0,000400	-3,03	
16	LwK 8.4	1,00436	-0,000040	-0,30	
17	LwK 8.4	1,00450	0,000100	0,76	
18	LwK 8.4	1,00434	-0,000060	-0,45	
19	LwK 8.4	1,00442	0,000020	0,15	
20	LwK 8.4	1,00246	-0,001940	-14,70	(**)
21	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
22	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
23	LwK 8.4	1,00460	0,000200	1,52	
24	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
25	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
26	LwK 8.4	1,00444	0,000040	0,30	
27	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
28	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
29	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
30	LwK 8.4	1,00430	-0,000100	-0,76	
31	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
32	LwK 8.4	1,00442	0,000020	0,15	
33	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
34	LwK 8.4	1,00430	-0,000100	-0,76	
35	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
36	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
37	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
38	LwK 8.4	0,98308	-0,021320	-161,52	(**)
39	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
40	LwK 8.4	1,00431	-0,000090	-0,68	
41	LwK 8.4	1,00430	-0,000100	-0,76	
42	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
43	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
44	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
45	LwK 8.4	1,00436	-0,000040	-0,30	
46	LwK 8.4	1,00435	-0,000050	-0,38	
48	LwK 8.4	1,00445	0,000050	0,38	
49	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
50	LwK 8.4	1,00437	-0,000030	-0,23	
51	LwK 8.4	1,00436	-0,000040	-0,30	
52	LwK 8.4	1,00450	0,000100	0,76	
53	LwK 8.4	1,00450	0,000100	0,76	
54	LwK 8.4	1,00435	-0,000050	-0,38	
55	LwK 8.4	1,00430	-0,000100	-0,76	
56	LwK 8.4	1,00445	0,000050	0,38	
57	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
58	LwK 8.4	1,00448	0,000080	0,61	
59	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
60	LwK 8.4	1,00435	-0,000050	-0,38	
61	LwK 8.4	1,00430	-0,000100	-0,76	

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

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
62	LwK 8.1	1,00440	0,000000	0,00	
63	LwK 8.4	1,00460	0,000200	1,52	
64	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
65	LwK 8.4	1,00439	-0,000010	-0,08	
66	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
67	LwK 8.4	1,00444	0,000040	0,30	
68	LwK 8.4	1,00433	-0,000070	-0,53	
69	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
70	LwK 8.4	1,00436	-0,000040	-0,30	
71	LwK 8.4	1,00464	0,000240	1,82	
72	LwK 8.4	1,00438	-0,000020	-0,15	
73	LwK 8.4	1,00442	0,000020	0,15	
74	LwK 8.4	1,00440	0,000000	0,00	
76	LwK 8.1	1,00460	0,000200	1,52	
201	FTIR	1,00490	0,000500	2,63	
203	FTIR	1,00453	0,000130	0,68	
210	FTIR	1,00490	0,000500	2,63	
211	FTIR	1,00421	-0,000190	-1,00	
216	FTIR	1,00470	0,000300	1,58	
217	FTIR	1,00470	0,000300	1,58	
219	FTIR	1,00420	-0,000200	-1,05	
229	FTIR	1,00454	0,000140	0,74	
232	FTIR	1,00481	0,000410	2,16	
241	FTIR	1,00430	-0,000100	-0,53	
242	FTIR	1,00450	0,000100	0,53	
244	FTIR	1,00497	0,000570	3,00	
246	FTIR	1,00420	-0,000200	-1,05	
247	FTIR	1,00450	0,000100	0,53	
250	FTIR	1,00470	0,000300	1,58	
251	FTIR	1,00470	0,000300	1,58	
253	FTIR	1,00520	0,000800	4,21	
254	FTIR	1,00460	0,000200	1,05	
260	FTIR	1,00446	0,000060	0,32	
270	FTIR	1,00440	0,000000	0,00	
272	FTIR	1,00480	0,000400	2,11	
273	FTIR	1,00523	0,000830	4,37	
274	FTIR	1,00400	-0,000400	-2,11	

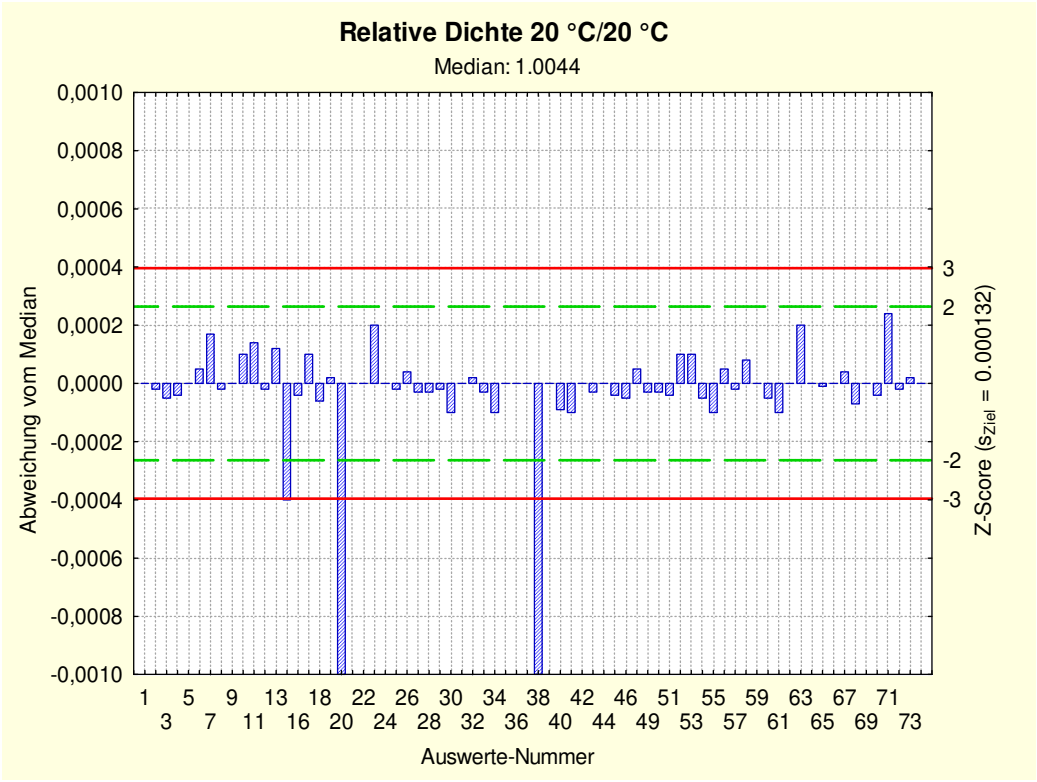
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.

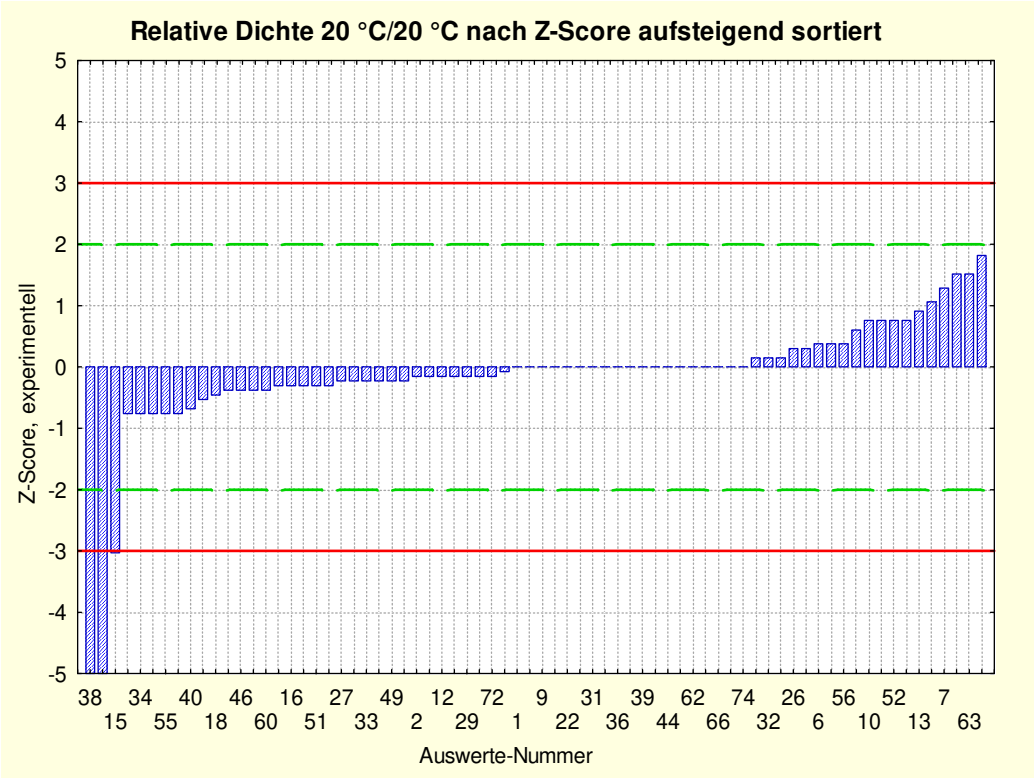
5.2.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Relative Dichte 20°C/20°C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	72	70
Minimalwert	0,98308	1,00400
Mittelwert	1,004077	1,004400
Median	1,004400	1,004400
Maximalwert	1,00464	1,00464
Standardabweichung (s_L)	0,002521	0,000086
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000297	0,000010
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Quotient (s_L/s_{exp})	19,10	0,65
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	13,27	0,45
Quotient (u_M/s_{exp})	2,25	0,08
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	1,56	0,05

5.2.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	1	1,00440	
LwK 8.4	Biegeschwinger-Methode, OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2b	71	1,00439	0,000062
	herkömmliche Verfahren	72	1,00439	0,000061
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	23	1,00461	0,000325





5.3 Gesamtalkohol [g/L]

5.3.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,00	-0,200	-0,07	-0,19	
2	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,35	0,150	0,05	0,14	
4	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,100	0,03	0,09	
5	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,42	0,220	0,08	0,21	
6	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,50	0,300	0,10	0,28	
7	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	104,30	3,100	1,08	2,92	
8	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	98,14	-3,060	-1,07	-2,88	
10	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,200	0,07	0,19	
11	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,25	-0,950	-0,33	-0,89	
12	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,200	0,07	0,19	
13	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,12	-0,080	-0,03	-0,08	
15	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	103,20	2,000	0,70	1,88	
16	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,00	-1,200	-0,42	-1,13	
17	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,400	-0,14	-0,38	
18	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,50	0,300	0,10	0,28	
19	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,20	0,000	0,00	0,00	
20	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	102,10	0,900	0,31	0,85	
21	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
22	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,16	-0,040	-0,01	-0,04	
23	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,30	0,100	0,03	0,09	
25	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,20	0,000	0,00	0,00	
26	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,10	-1,100	-0,38	-1,03	
27	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,20	0,000	0,00	0,00	
28	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,43	0,230	0,08	0,22	
30	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,40	0,200	0,07	0,19	
31	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,50	0,300	0,10	0,28	
32	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,90	-0,300	-0,10	-0,28	
33	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,400	-0,14	-0,38	
34	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,48	0,280	0,10	0,26	
35	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,55	-0,650	-0,23	-0,61	
36	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,90	-0,300	-0,10	-0,28	
37	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	108,00	6,800	2,38	6,40	(**)
38	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	22,80	-78,400	-27,44	-73,75	(*)
39	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,200	0,07	0,19	
40	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	96,30	-4,900	-1,71	-4,61	
41	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	102,14	0,940	0,33	0,88	
42	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,100	0,03	0,09	
43	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,90	0,700	0,24	0,66	
44	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,10	-1,100	-0,38	-1,03	
45	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,00	-1,200	-0,42	-1,13	
46	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,00	-1,200	-0,42	-1,13	
48	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	103,99	2,790	0,98	2,62	
49	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,00	-0,200	-0,07	-0,19	
50	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
51	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,50	0,300	0,10	0,28	
52	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
53	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,20	0,000	0,00	0,00	
54	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,60	0,400	0,14	0,38	
55	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,40	0,200	0,07	0,19	
56	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
57	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,400	-0,14	-0,38	
58	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,49	-0,710	-0,25	-0,67	
59	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,50	0,300	0,10	0,28	
60	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
61	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	102,63	1,430	0,50	1,35	
62	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,100	0,03	0,09	

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.
(**) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
63	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,60	-0,600	-0,21	-0,56	
64	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	102,70	1,500	0,52	1,41	
65	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
66	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,93	-0,270	-0,09	-0,25	
67	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,10	-1,100	-0,38	-1,03	
68	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,10	-0,100	-0,03	-0,09	
69	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,50	-0,700	-0,24	-0,66	
70	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,50	0,300	0,10	0,28	
71	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,100	0,03	0,09	
72	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,20	0,000	0,00	0,00	
73	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	101,30	0,100	0,03	0,09	
74	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	103,43	2,230	0,78	2,10	
76	LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	101,80	0,600	0,21	0,56	
144	LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	100,80	-0,400	-0,14	-0,38	
201	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,50	-0,700	-0,24	-0,66	
203	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,30	1,100	0,38	1,03	
211	k. A.	101,04	-0,160	-0,06	-0,15	
216	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,13	-0,070	-0,02	-0,07	
219	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,20	1,000	0,35	0,94	
232	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	102,89	1,690	0,59	1,59	
241	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,15	-0,050	-0,02	-0,05	
242	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	101,00	-0,200	-0,07	-0,19	
246	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	100,27	-0,930	-0,33	-0,87	
247	LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	96,30	-4,900	-1,71	-4,61	

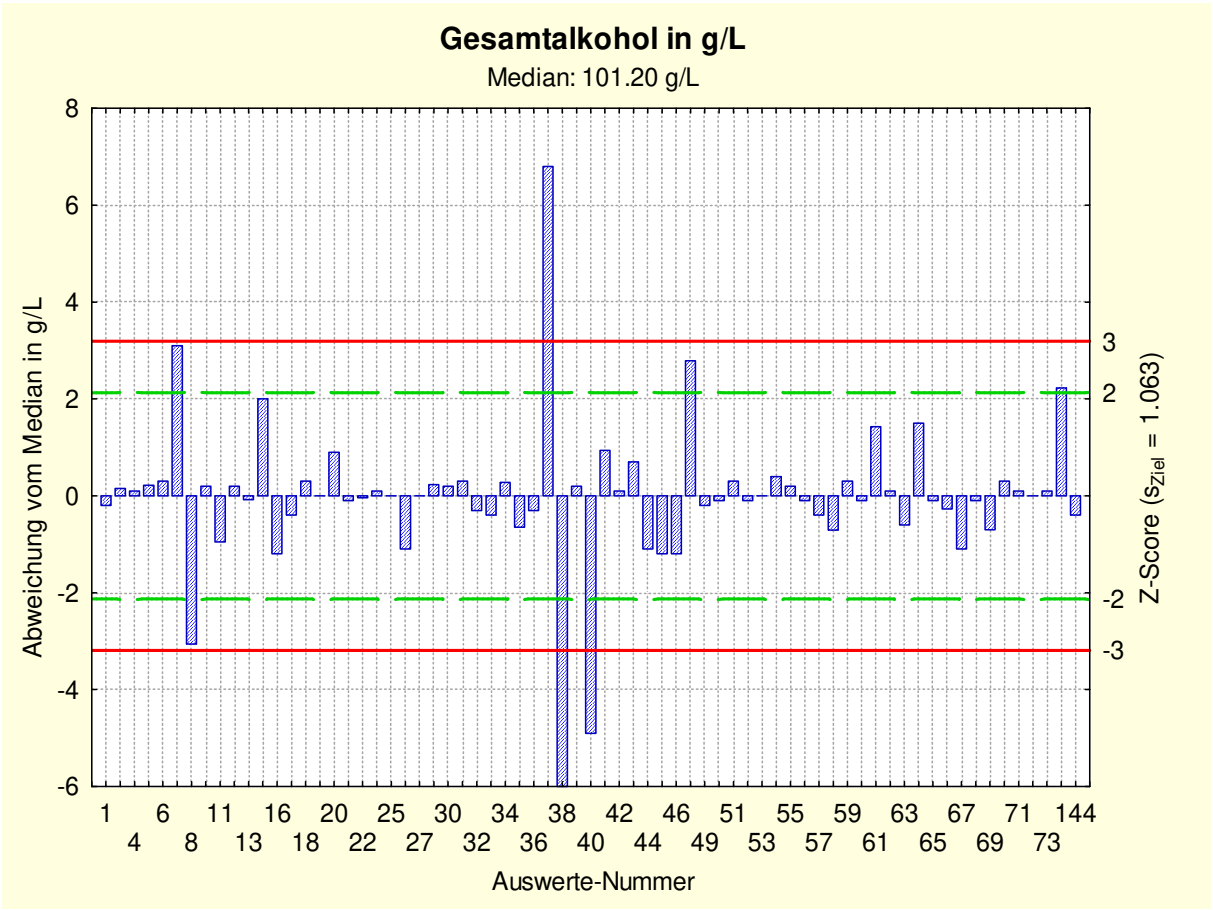
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp} berechnet.

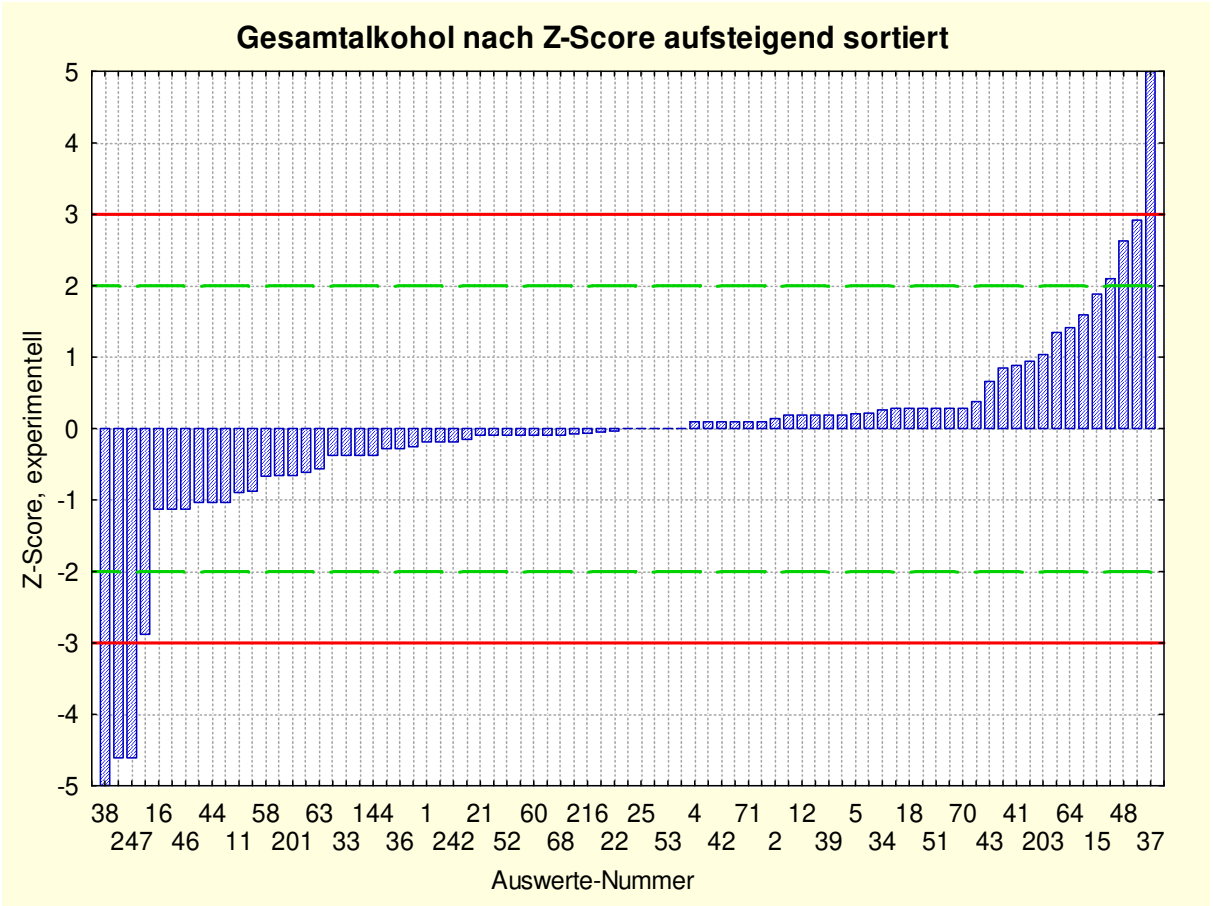
5.3.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtalkohol [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	67	66
Minimalwert	96,30	96,30
Mittelwert	101,269	101,167
Median	101,200	101,200
Maximalwert	108,00	104,30
Standardabweichung (s_L)	1,376	1,102
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,168	0,136
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	2,857	2,857
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	1,063	1,063
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,48	0,39
Quotient (s_L/s_{exp})	1,29	1,04
Quotient (u_M/s_H)	0,06	0,05
Quotient (u_M/s_{exp})	0,16	0,13

5.3.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 1.1 (Zucker enz/HPLC)	(Gesamtzucker [Glucose + Fructose]*0,47) + Vorh. Alkohol[g/L]	55	101,06	0,626
LwK 1.1 (Zucker reduktom.)	((Gesamtzucker[reduktometrisch]-1)*0,47) + Vorh. Alkohol[g/L]	13	101,69	1,041
	herkömmliche Verfahren	68	101,16	0,652
LwK 1.1 (FTIR Alkohol+Zucker)	(Gesamtzucker [FTIR]*0,47) + Vorh. Alkohol[g/L]	10	101,24	1,141
k. A.	keine Angabe	1	101,04	


Gesamtalkohol in g/L
Median: 101.20 g/L
Abweichung vom Median in g/L
Z-Score (s_{Ziel} = 1.063)
Auswerte-Nummer


Gesamtalkohol nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer

5.4 Vorhandener Alkohol [g/L]

5.4.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 2.9	90,10	0,000	0,00	0,00	
2	LwK 2.4	90,13	0,030	0,01	0,06	
4	LwK 2.7	90,33	0,230	0,09	0,43	
5	LwK 2.9	90,45	0,350	0,14	0,65	
6	LwK 2.1	90,80	0,700	0,27	1,31	
7	LwK 2.4	89,11	-0,990	-0,38	-1,85	
8	LwK 2.5	87,86	-2,240	-0,87	-4,19	
9	LwK 2.9	90,60	0,500	0,19	0,93	
10	LwK 2.5	91,10	1,000	0,39	1,87	
11	LwK 2.1	90,58	0,480	0,19	0,90	
12	LwK 2.1	90,40	0,300	0,12	0,56	
13	LwK 2.9	90,07	-0,030	-0,01	-0,06	
15	LwK 2.9	91,80	1,700	0,66	3,18	
16	LwK 2.9	89,60	-0,500	-0,19	-0,93	
17	LwK 2.9	90,21	0,110	0,04	0,21	
18	LwK 2.5	90,60	0,500	0,19	0,93	
19	LwK 2.4	90,20	0,100	0,04	0,19	
20	LwK 2.4	90,21	0,110	0,04	0,21	
21	LwK 2.9	90,20	0,100	0,04	0,19	
22	LwK 2.4	90,10	0,000	0,00	0,00	
23	LwK 2.5	90,80	0,700	0,27	1,31	
24	LwK 2.4	91,03	0,930	0,36	1,74	
25	LwK 2.5	89,95	-0,150	-0,06	-0,28	
26	LwK 2.9	89,30	-0,800	-0,31	-1,50	
27	LwK 2.1	90,10	0,000	0,00	0,00	
28	LwK 2.7	90,25	0,150	0,06	0,28	
29	LwK 2.1	89,73	-0,370	-0,14	-0,69	
30	LwK 2.4	90,60	0,500	0,19	0,93	
31	LwK 2.9	90,60	0,500	0,19	0,93	
32	LwK 2.9	90,00	-0,100	-0,04	-0,19	
33	LwK 2.1	89,70	-0,400	-0,15	-0,75	
34	LwK 2.9	90,88	0,780	0,30	1,46	
35	LwK 2.4	89,66	-0,440	-0,17	-0,82	
36	LwK 2.9	89,90	-0,200	-0,08	-0,37	
37	LwK 2.9	89,90	-0,200	-0,08	-0,37	
38	LwK 2.1	89,82	-0,280	-0,11	-0,52	
39	LwK 2.9	90,60	0,500	0,19	0,93	
40	LwK 2.4	93,20	3,100	1,20	5,79	(**)
41	LwK 2.7	91,00	0,900	0,35	1,68	
42	LwK 2.5	90,00	-0,100	-0,04	-0,19	
43	LwK 2.7	91,00	0,900	0,35	1,68	
44	LwK 2.9	89,20	-0,900	-0,35	-1,68	
45	LwK 2.1	89,30	-0,800	-0,31	-1,50	
46	LwK 2.5	89,10	-1,000	-0,39	-1,87	
48	LwK 2.5	91,44	1,340	0,52	2,50	
49	LwK 2.9	89,37	-0,730	-0,28	-1,36	
50	LwK 2.9	90,20	0,100	0,04	0,19	
51	LwK 2.4	90,30	0,200	0,08	0,37	
52	LwK 2.1	90,00	-0,100	-0,04	-0,19	
53	LwK 2.8	90,60	0,500	0,19	0,93	
54	LwK 2.9	90,60	0,500	0,19	0,93	
55	LwK 2.7	90,50	0,400	0,15	0,75	
56	LwK 2.9	90,40	0,300	0,12	0,56	
57	LwK 2.4	90,00	-0,100	-0,04	-0,19	
58	LwK 2.8	89,50	-0,600	-0,23	-1,12	
59	LwK 2.9	90,50	0,400	0,15	0,75	
60	LwK 2.9	90,30	0,200	0,08	0,37	
61	LwK 2.1	102,60	12,500	4,83	23,36	(**)
62	LwK 2.1	90,60	0,500	0,19	0,93	
63	LwK 2.9	89,40	-0,700	-0,27	-1,31	

Rot markierte Werte wurden vom Auswerter aus der Einheit %vol mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.
(**) Diese Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
64	LwK 2.5	89,82	-0,280	-0,11	-0,52	
65	LwK 2.5	89,30	-0,800	-0,31	-1,50	
66	LwK 2.9	89,92	-0,180	-0,07	-0,34	
67	LwK 2.4	89,42	-0,680	-0,26	-1,27	
68	LwK 2.4	90,20	0,100	0,04	0,19	
69	LwK 2.4	89,50	-0,600	-0,23	-1,12	
70	LwK 2.9	90,80	0,700	0,27	1,31	
71	LwK 2.9	90,80	0,700	0,27	1,31	
72	LwK 2.4	89,70	-0,400	-0,15	-0,75	
73	LwK 2.4	90,60	0,500	0,19	0,93	
74	LwK 2.9	90,69	0,590	0,23	1,10	
76	LwK 2.3	90,40	0,300	0,12	0,56	
129	LwK 2.9	90,08	-0,020	-0,01	-0,04	
144	LwK 2.1	89,90	-0,200	-0,08	-0,37	
167	NMR	85,84	-4,261	-1,65	-7,96	
201	LwK 2.8	89,50	-0,600	-0,23	-0,68	
203	LwK 2.8	90,40	0,300	0,12	0,34	
210	LwK 2.8	91,60	1,500	0,58	1,69	
211	LwK 2.8	89,68	-0,420	-0,16	-0,47	
214	LwK 2.8	82,95	-7,150	-2,76	-8,07	(**)
216	LwK 2.8	90,70	0,600	0,23	0,68	
217	LwK 2.8	87,60	-2,500	-0,97	-2,82	
219	LwK 2.8	91,20	1,100	0,42	1,24	
229	LwK 2.8	88,47	-1,630	-0,63	-1,84	
232	LwK 2.8	91,89	1,790	0,69	2,02	
241	LwK 2.8	90,10	0,000	0,00	0,00	
242	LwK 2.8	89,70	-0,400	-0,15	-0,45	
244	LwK 2.8	90,56	0,460	0,18	0,52	
246	LwK 2.8	88,90	-1,200	-0,46	-1,35	
247	LwK 2.8	86,00	-4,100	-1,58	-4,63	
250	LwK 2.8	91,90	1,800	0,70	2,03	
251	LwK 2.8	89,90	-0,200	-0,08	-0,23	
253	LwK 2.8	91,60	1,500	0,58	1,69	
254	LwK 2.8	90,43	0,330	0,13	0,37	
260	LwK 2.8	90,10	0,000	0,00	0,00	
270	LwK 2.8	90,31	0,210	0,08	0,24	
272	LwK 2.8	90,20	0,100	0,04	0,11	
273	LwK 2.8	90,70	0,600	0,23	0,68	
274	LwK 2.8	91,71	1,610	0,62	1,82	

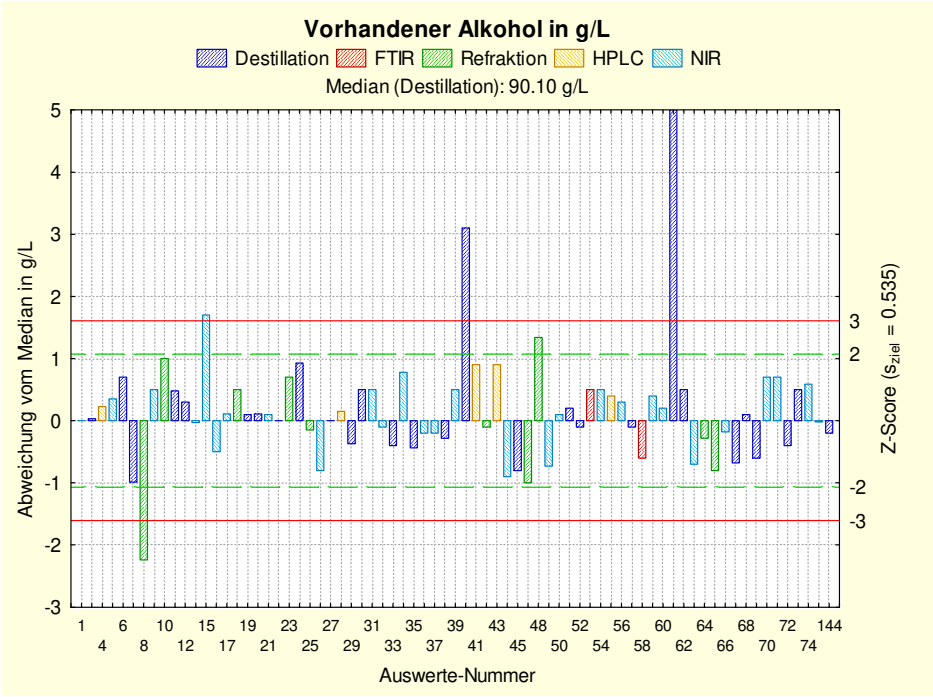
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Diese Ergebnisse waren für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Rot markierte Werte wurden vom Auswerter aus der Einheit %vol mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert aus Destillationsverfahren ab.

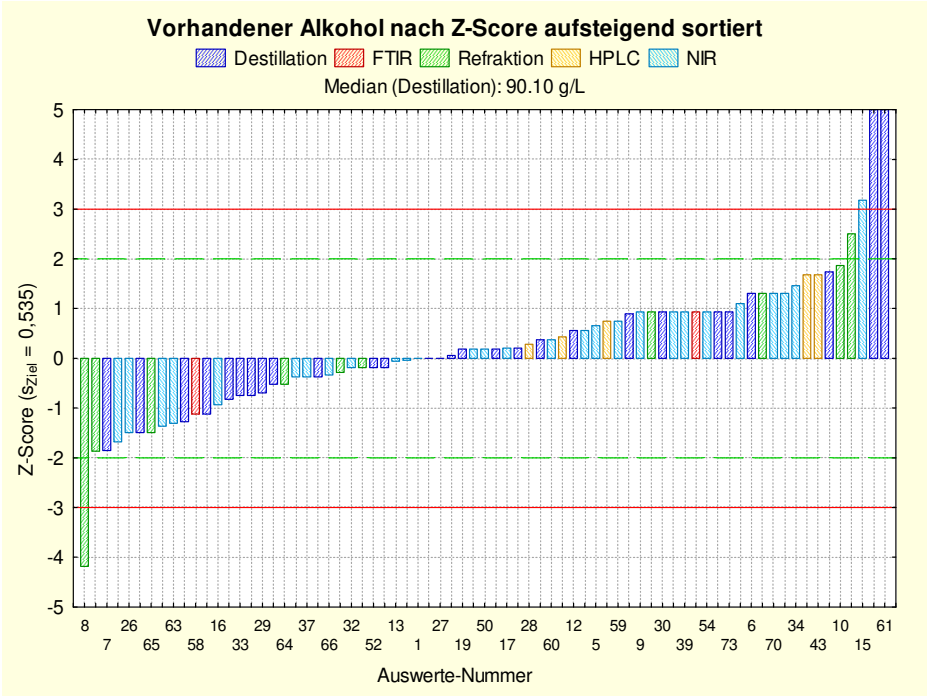
5.4.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	28	26
Minimalwert	89,11	89,11
Mittelwert	90,625	90,065
Median	90,115	90,100
Maximalwert	102,60	91,03
Standardabweichung (s_L)	2,464	0,477
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,466	0,094
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	2,589	2,589
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ FTIR}$)	0,886	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,95	0,18
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	4,61	0,89
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	2,78	0,54
Quotient (u_M/s_H)	0,18	0,04
Quotient (u_M/s_{exp})	0,87	0,18
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,53	0,11

5.4.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	12	90,17	0,587
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	16	90,12	0,604
	Destillationsverfahren	28	90,14	0,576
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	10	90,06	1,068
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	90,62	0,410
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	26	90,17	1,227
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	28	90,22	0,543





5.5 Gesamtextrakt [g/L]

5.5.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
2	LwK 3.2	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
4	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
5	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
6	LwK 3.2	51,0	0,40	0,25	0,67	
7	LwK 3.3	52,2	1,60	1,01	2,69	
10	LwK 3.3	51,2	0,60	0,38	1,01	
11	LwK 3.2	51,2	0,60	0,38	1,01	
12	LwK 3.2	50,6	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 3.3	50,8	0,20	0,13	0,34	
15	LwK 3.3	50,1	-0,50	-0,32	-0,84	
16	LwK 3.3	50,3	-0,30	-0,19	-0,51	
17	LwK 3.3	51,0	0,40	0,25	0,67	
18	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
19	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
20	LwK 3.2	50,1	-0,50	-0,32	-0,84	
21	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.2	51,4	0,80	0,50	1,35	
25	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
26	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
27	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
28	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
29	LwK 3.2	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
30	LwK 3.3	50,2	-0,40	-0,25	-0,67	
31	LwK 3.3	50,8	0,20	0,13	0,34	
32	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
33	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
34	LwK 3.3	59,0	8,40	5,30	14,14	(**)
35	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
36	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
37	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
39	LwK 3.2	50,8	0,20	0,13	0,34	
40	LwK 3.1	51,1	0,50	0,32	0,84	
41	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 3.2	51,1	0,50	0,32	0,84	
44	LwK 3.3	50,2	-0,40	-0,25	-0,67	
45	LwK 3.2	50,3	-0,30	-0,19	-0,51	
46	LwK 3.3	49,9	-0,70	-0,44	-1,18	
48	LwK 3.3	51,2	0,60	0,38	1,01	
49	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
50	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
51	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
52	LwK 3.3	50,8	0,20	0,13	0,34	
53	LwK 3.3	51,2	0,60	0,38	1,01	
54	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
55	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
56	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
57	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
58	LwK 3.3	50,6	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 3.3	50,7	0,10	0,06	0,17	
60	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
61	LwK 3.2	50,7	0,10	0,06	0,17	
62	LwK 3.2	50,7	0,10	0,06	0,17	
63	LwK 3.3	50,8	0,20	0,13	0,34	
64	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
65	LwK 3.2	50,3	-0,30	-0,19	-0,51	
66	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	

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

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
67	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
68	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
69	LwK 3.3	50,3	-0,30	-0,19	-0,51	
70	LwK 3.2	50,6	0,00	0,00	0,00	
71	LwK 3.3	51,4	0,80	0,50	1,35	
72	LwK 3.3	50,4	-0,20	-0,13	-0,34	
73	LwK 3.3	50,8	0,20	0,13	0,34	
74	LwK 3.3	51,1	0,50	0,32	0,84	
76	LwK 3.3	51,2	0,60	0,38	1,01	
144	LwK 3.3	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
201	FTIR (gemessen)	51,6	1,00	0,63	1,68	
203	berechn.FTIR-Basis	50,6	0,00	0,00	0,00	
211	berechn.FTIR-Basis	50,1	-0,50	-0,32	-0,84	
216	LwK 3.3	50,3	-0,30	-0,19	-0,51	
217	FTIR (gemessen)	51,4	0,80	0,50	1,35	
219	berechn.FTIR-Basis	50,5	-0,10	-0,06	-0,17	
232	LwK 3.3	52,3	1,70	1,07	2,86	
241	FTIR (gemessen)	52,1	1,50	0,95	2,53	
247	FTIR (gemessen)	50,0	-0,60	-0,38	-1,01	
253	FTIR (gemessen)	52,4	1,80	1,14	3,03	
272	FTIR (gemessen)	51,5	0,90	0,57	1,52	
273	FTIR (gemessen)	53,0	2,40	1,51	4,04	

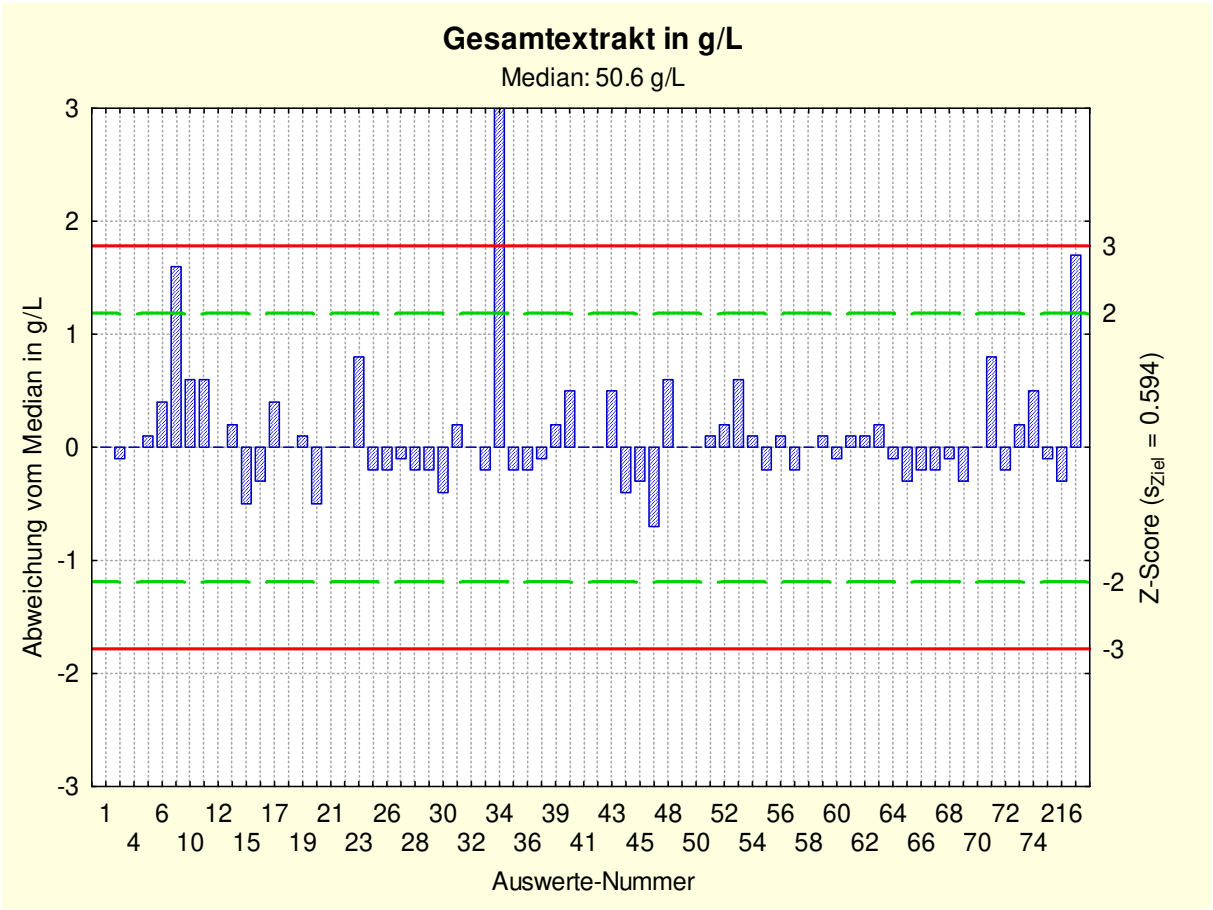
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp} berechnet.

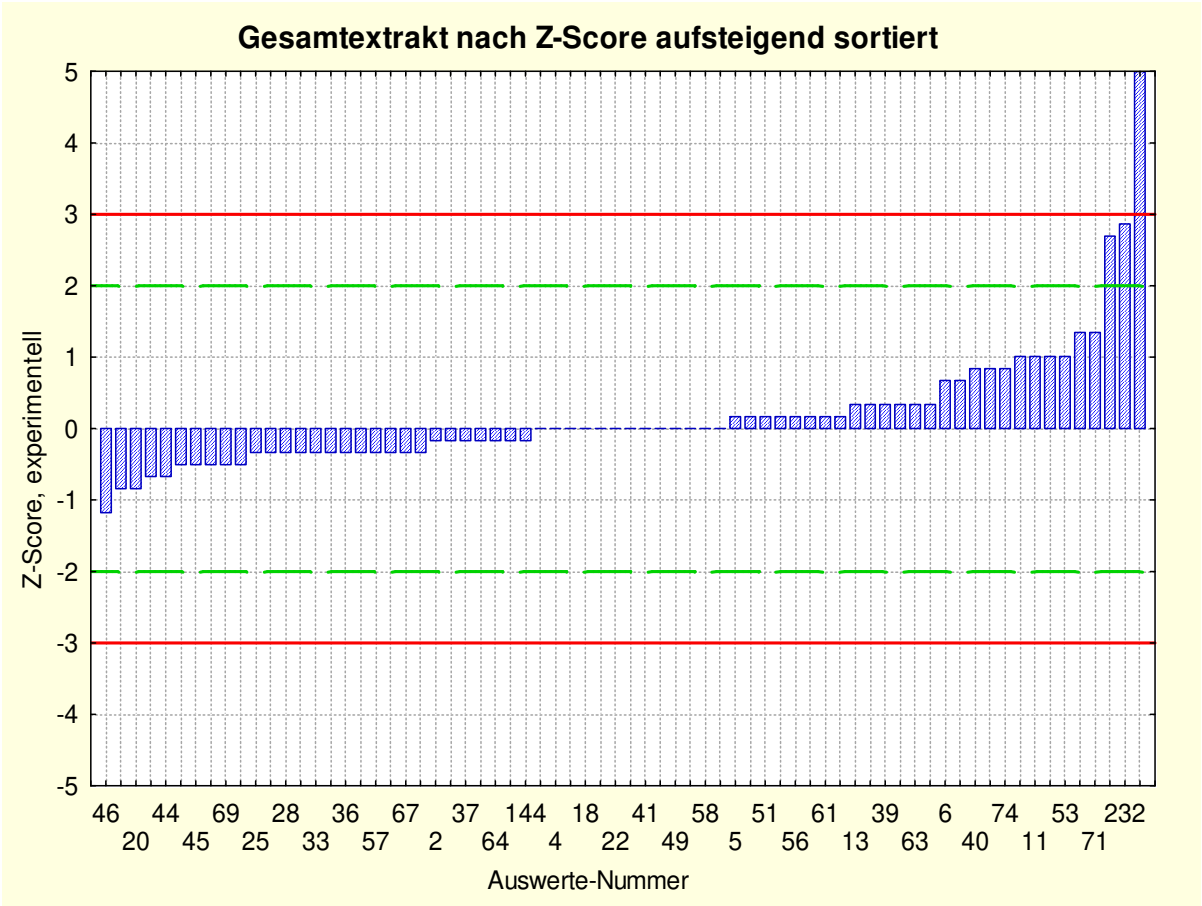
5.5.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	70	69
Minimalwert	49,9	49,9
Mittelwert	50,78	50,67
Median	50,60	50,60
Maximalwert	59,0	52,3
Standardabweichung (s_L)	1,077	0,413
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,129	0,050
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	1,586	1,586
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,594	0,594
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,68	0,26
Quotient (s_L/s_{exp})	1,81	0,69
Quotient (u_M/s_H)	0,08	0,03
Quotient (u_M/s_{exp})	0,22	0,08

5.5.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekte pyknometrische Bestimmung (Alkohol nach LwK 2.4)	1	51,10	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie (Basis: Alkohol nach LwK 2.1); OIV-MA-AS2-03B	14	50,69	0,410
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie (Basis: Dichte und Alkohol nach der jeweils angegebene Methode)	55	50,60	0,279
	herkömmliche Verfahren	70	50,63	0,324
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (nur bei Ermittlung aus Infrarotspektrum)	7	51,76	0,973
berechn. FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf Basis FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	3	50,43	0,250


Gesamtextrakt in g/L
Median: 50.6 g/L
Abweichung vom Median in g/L
Z-Score (s_{Ziel} = 0.594)
Auswerte-Nummer


Gesamtextrakt nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer

5.6 Zuckerfreier Extrakt [g/L]

5.6.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
2	LwK 3.3	26,7	-0,60	-0,64	-0,57	
4	LwK 3.3	27,2	-0,10	-0,11	-0,10	
5	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
6	LwK 3.2	28,2	0,90	0,96	0,86	
7	LwK 3.3	28,3	1,00	1,07	0,95	
10	LwK 3.3	29,2	1,90	2,02	1,81	
11	LwK 3.2	30,0	2,70	2,88	2,58	
12	LwK 3.2	27,3	0,00	0,00	0,00	
13	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
15	LwK 3.3	25,8	-1,50	-1,60	-1,43	
16	LwK 3.3	28,4	1,10	1,17	1,05	
17	LwK 3.3	28,3	1,00	1,07	0,95	
18	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
19	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 3.2	26,8	-0,50	-0,53	-0,48	
21	LwK 3.3	27,5	0,20	0,21	0,19	
22	LwK 3.3	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
23	LwK 3.3	29,0	1,70	1,81	1,62	
25	LwK 3.3	26,5	-0,80	-0,85	-0,76	
26	LwK 3.3	27,6	0,30	0,32	0,29	
27	LwK 3.3	26,9	-0,40	-0,43	-0,38	
28	LwK 3.3	26,6	-0,70	-0,75	-0,67	
29	LwK 3.2	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
30	LwK 3.3	26,9	-0,40	-0,43	-0,38	
31	LwK 3.3	27,7	0,40	0,43	0,38	
32	LwK 3.3	26,9	-0,40	-0,43	-0,38	
33	LwK 3.3	26,7	-0,60	-0,64	-0,57	
34	LwK 3.3	36,4	9,10	9,69	8,68	(**)
35	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
36	LwK 3.3	27,0	-0,30	-0,32	-0,29	
37	k. A.	27,2	-0,10	-0,11	-0,10	
39	LwK 3.2	27,8	0,50	0,53	0,48	
40	LwK 3.1	28,1	0,80	0,85	0,76	
41	LwK 3.3	26,9	-0,40	-0,43	-0,38	
42	LwK 3.3	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
43	LwK 3.2	28,0	0,70	0,75	0,67	
44	LwK 3.3	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
45	LwK 3.2	27,4	0,10	0,11	0,10	
46	LwK 3.3	26,7	-0,60	-0,64	-0,57	
48	LwK 3.3	24,5	-2,80	-2,98	-2,67	
49	LwK 3.3	27,8	0,50	0,53	0,48	
50	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
51	LwK 3.3	26,8	-0,50	-0,53	-0,48	
52	LwK 3.3	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
53	LwK 3.3	28,7	1,40	1,49	1,34	
54	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
55	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
56	LwK 3.3	27,9	0,60	0,64	0,57	
57	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
58	LwK 3.3	27,0	-0,30	-0,32	-0,29	
59	LwK 3.3	27,2	-0,10	-0,11	-0,10	
60	LwK 3.3	27,7	0,40	0,43	0,38	
61	LwK 3.2	26,0	-1,30	-1,38	-1,24	
62	LwK 3.2	28,0	0,70	0,75	0,67	
63	LwK 3.3	27,1	-0,20	-0,21	-0,19	
64	LwK 3.3	23,1	-4,20	-4,47	-4,01	
65	LwK 3.2	25,3	-2,00	-2,13	-1,91	
66	LwK 3.3	27,0	-0,30	-0,32	-0,29	

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

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
67	LwK 3.3	27,6	0,30	0,32	0,29	
68	LwK 3.3	27,3	0,00	0,00	0,00	
69	LwK 3.3	27,0	-0,30	-0,32	-0,29	
70	LwK 3.3	27,9	0,60	0,64	0,57	
71	LwK 3.3	29,0	1,70	1,81	1,62	
72	LwK 3.3	26,0	-1,30	-1,38	-1,24	
73	LwK 3.3	28,1	0,80	0,85	0,76	
74	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
76	LwK 3.3	26,6	-0,70	-0,75	-0,67	
144	LwK 3.3	27,4	0,10	0,11	0,10	
201	FTIR (gemessen)	28,2	0,90	0,96	0,86	
203	FTIR-Basis	25,2	-2,10	-2,24	-2,00	
211	FTIR-Basis	26,6	-0,70	-0,75	-0,67	
216	LwK 3.3	28,4	1,10	1,17	1,05	
219	FTIR(Gextr – Zucker)	26,7	-0,60	-0,64	-0,57	
232	LwK 3.3	28,4	1,10	1,17	1,05	
241	FTIR(Gextr – Zucker)	28,6	1,30	1,38	1,24	
242	FTIR-Basis	26,6	-0,70	-0,75	-0,67	
247	FTIR(Gextr - Zucker)	27,0	-0,30	-0,32	-0,29	

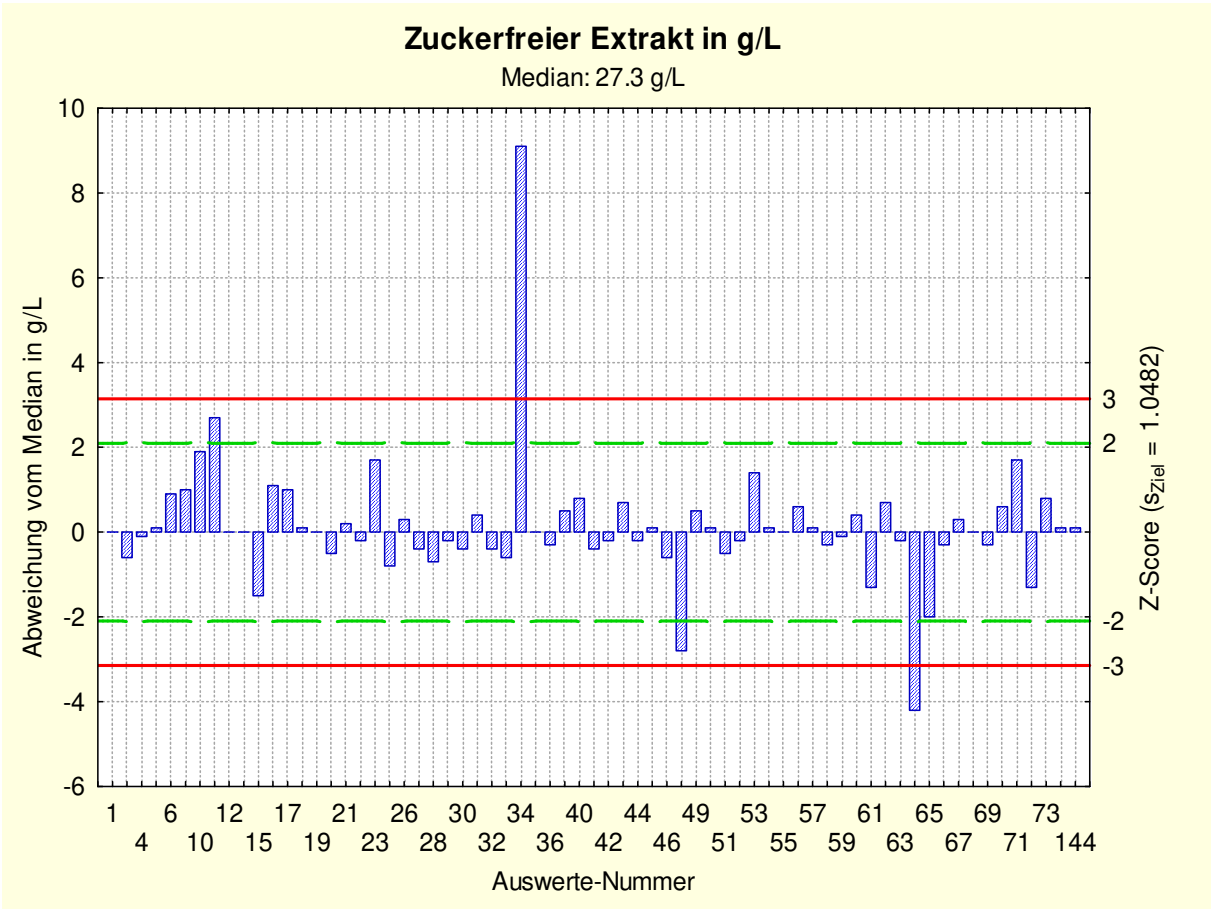
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp} berechnet.

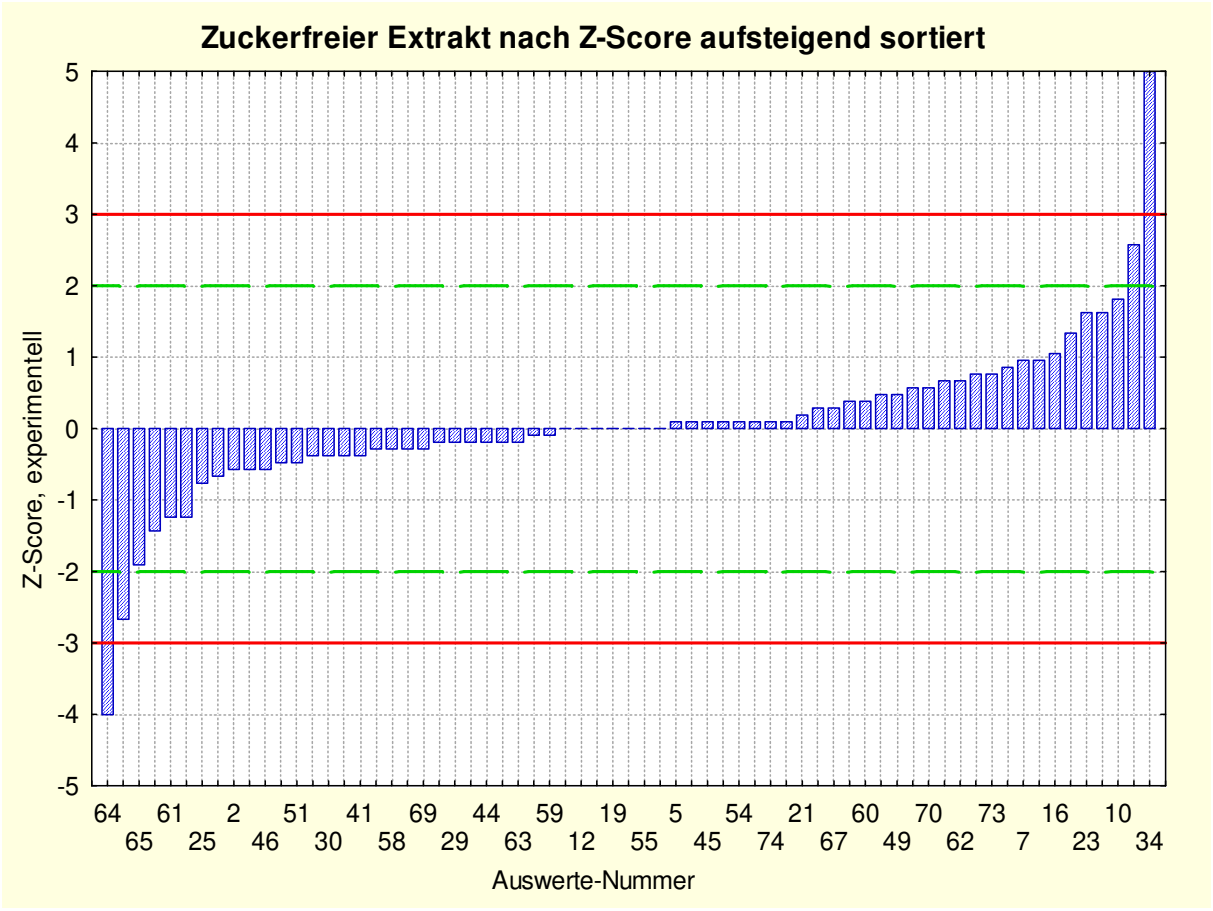
5.6.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Zuckerfreien Extrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	67	66
Minimalwert	23,1	23,1
Mittelwert	27,43	27,29
Median	27,30	27,30
Maximalwert	36,4	30,0
Standardabweichung (s_L)	1,495	1,006
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,183	0,124
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,939	0,939
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	1,048	1,048
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,59	1,07
Quotient (s_L/s_{exp})	1,43	0,96
Quotient (u_M/s_H)	0,19	0,13
Quotient (u_M/s_{exp})	0,17	0,12

5.6.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekte pyknometrische Bestimmung (Alkohol nach LwK 2.4)	1	28,10	
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie (Basis: Alkohol nach LwK 2.1); OIV-MA-AS2-03B	11	27,41	1,070
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie (Basis: Dichte, Alkohol und Zucker nach der jeweils angegebene Methode)	55	27,37	0,697
	herkömmliche Verfahren	67	27,36	0,698
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (nur bei Ermittlung aus Infrarotspektrum)	1	28,20	
FTIR(Gextr – Zucker)	Gesamtextrakt aus Infrarotspektrum – FTIR-Zucker	3	27,35	0,994
FTIR-Basis	Berechnung auf der Basis von FTIR-Werten für Relative Dichte, Vorhandenen Alkohol und Zucker	3	26,14	0,900
k. A.	keine Angabe	1	27,20	


Zuckerfreier Extrakt in g/L
Median: 27.3 g/L
Abweichung vom Median in g/L
Z-Score (s_{Ziel} = 1.0482)
Auswerte-Nummer


Zuckerfreier Extrakt nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer

5.7 Vergärbare Zucker [g/L]

5.7.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus enzymatischen und HPLC-Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 4.5	23,30	0,100	0,12	0,15	
2	LwK 4.5	23,85	0,650	0,80	0,97	
4	LwK 4.7	23,40	0,200	0,24	0,30	
5	LwK 4.5	23,30	0,100	0,12	0,15	
6	LwK 4.5	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
7	LwK 4.7	23,90	0,700	0,86	1,05	
8	LwK 4.5	21,87	-1,330	-1,63	-1,99	
9	LwK 4.5	23,39	0,190	0,23	0,28	
10	LwK 4.5	22,99	-0,210	-0,26	-0,31	
11	LwK 4.5	21,20	-2,000	-2,45	-2,99	
12	LwK 4.5	23,35	0,150	0,18	0,22	
13	LwK 4.5	23,50	0,300	0,37	0,45	
15	LwK 4.4	24,30	1,100	1,35	1,64	
16	LwK 4.5	21,90	-1,300	-1,59	-1,94	
17	LwK 4.5	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
18	LwK 4.5	23,20	0,000	0,00	0,00	
19	LwK 4.4	23,40	0,200	0,24	0,30	
20	LwK 4.7	23,36	0,160	0,20	0,24	
21	LwK 4.5	23,06	-0,140	-0,17	-0,21	
22	LwK 4.5	23,54	0,340	0,42	0,51	
23	LwK 4.6	22,40	-0,800	-0,98	-1,20	
24	LwK 4.5	23,20	0,000	0,00	0,00	
25	LwK 4.7	23,94	0,740	0,91	1,11	
26	LwK 4.7	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
27	LwK 4.5	23,60	0,400	0,49	0,60	
29	LwK 4.5	23,33	0,130	0,16	0,19	
30	LwK 4.4	21,30	-1,900	-2,32	-2,84	
31	LwK 4.7	23,10	-0,100	-0,12	-0,15	
32	LwK 4.7	23,69	0,490	0,60	0,73	
33	LwK 4.5	23,70	0,500	0,61	0,75	
34	LwK 4.7	22,52	-0,680	-0,83	-1,02	
35	LwK 4.5	23,17	-0,030	-0,04	-0,04	
36	LwK 4.7	23,40	0,200	0,24	0,30	
37	LwK 4.5	23,29	0,090	0,11	0,13	
38	LwK 4.4	25,30	2,100	2,57	3,14	
39	LwK 4.5	22,90	-0,300	-0,37	-0,45	
40	LwK 4.4	23,70	0,500	0,61	0,75	
41	LwK 4.5	23,70	0,500	0,61	0,75	
42	LwK 4.4	23,50	0,300	0,37	0,45	
43	LwK 4.7	23,13	-0,070	-0,09	-0,10	
44	LwK 4.5	23,13	-0,070	-0,09	-0,10	
45	LwK 4.7	22,90	-0,300	-0,37	-0,45	
46	LwK 4.5	23,20	0,000	0,00	0,00	
48	LwK 4.4	26,70	3,500	4,28	5,23	(***)
49	LwK 4.7	22,74	-0,460	-0,56	-0,69	
50	LwK 4.5	23,20	0,000	0,00	0,00	
51	LwK 4.4	23,95	0,750	0,92	1,12	
52	LwK 4.4	23,70	0,500	0,61	0,75	
53	LwK 4.5	22,50	-0,700	-0,86	-1,05	
54	LwK 4.5	23,30	0,100	0,12	0,15	
55	LwK 4.7	23,10	-0,100	-0,12	-0,15	
56	LwK 4.5	22,84	-0,360	-0,44	-0,54	
57	LwK 4.7	23,00	-0,200	-0,24	-0,30	
58	LwK 4.5	23,64	0,440	0,54	0,66	
59	LwK 4.5	23,50	0,300	0,37	0,45	
60	LwK 4.5	22,81	-0,390	-0,48	-0,58	
61	LwK 4.4	25,75	2,550	3,12	3,81	
62	LwK 4.5	22,70	-0,500	-0,61	-0,75	
63	LwK 4.5	23,70	0,500	0,61	0,75	
64	LwK 4.4	27,40	4,200	5,14	6,28	(***)

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

Fortsetzung Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Werte aus enzymatischen und HPLC-Verfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
65	LwK 4.4	25,00	1,800	2,20	2,69	
66	LwK 4.5	23,40	0,200	0,24	0,30	
67	LwK 4.5	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
68	LwK 4.5	23,20	0,000	0,00	0,00	
69	LwK 4.5	23,32	0,120	0,15	0,18	
70	LwK 4.4	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
71	LwK 4.5	22,40	-0,800	-0,98	-1,20	
72	LwK 4.5	23,68	0,480	0,59	0,72	
73	LwK 4.5	22,70	-0,500	-0,61	-0,75	
74	LwK 4.7	23,70	0,500	0,61	0,75	
76	LwK 4.4	24,60	1,400	1,71	2,09	
136	NMR	22,80	-0,400	-0,49	-0,60	
144	LwK 4.7	22,83	-0,370	-0,45	-0,55	
167	NMR	22,06	-1,139	-1,39	-1,70	
201	LwK 4.8	23,40	0,200	0,24	0,30	
203	LwK 4.8	25,37	2,170	2,65	3,24	
210	LwK 4.8	23,70	0,500	0,61	0,75	
211	LwK 4.8	23,50	0,300	0,37	0,45	
216	LwK 4.8	22,20	-1,000	-1,22	-1,49	
217	LwK 4.8	23,50	0,300	0,37	0,45	
219	LwK 4.8	23,80	0,600	0,73	0,90	
229	LwK 4.8	23,36	0,160	0,20	0,24	
232	LwK 4.8	23,90	0,700	0,86	1,05	
241	LwK 4.8	23,50	0,300	0,37	0,45	
242	LwK 4.8	24,00	0,800	0,98	1,20	
246	LwK 4.8	24,20	1,000	1,22	1,49	
247	LwK 4.8	23,00	-0,200	-0,24	-0,30	
251	LwK 4.8	25,00	1,800	2,20	2,69	
253	LwK 4.8	23,00	-0,200	-0,24	-0,30	
254	LwK 4.8	23,14	-0,060	-0,07	-0,09	
260	LwK 4.8	23,50	0,300	0,37	0,45	
270	LwK 4.8	23,41	0,210	0,26	0,31	
272	LwK 4.8	22,20	-1,000	-1,22	-1,49	
273	LwK 4.8	23,35	0,150	0,18	0,22	

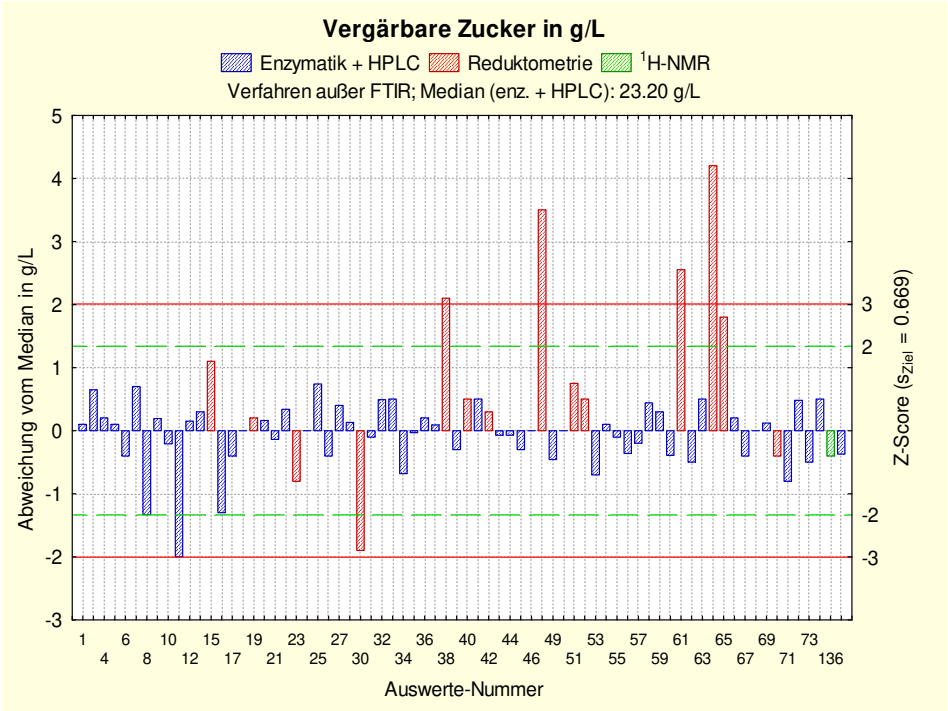
Rot markierte Auswerte-Nummern: Diese Ergebnisse waren für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{exp\ herk}$ berechnet.

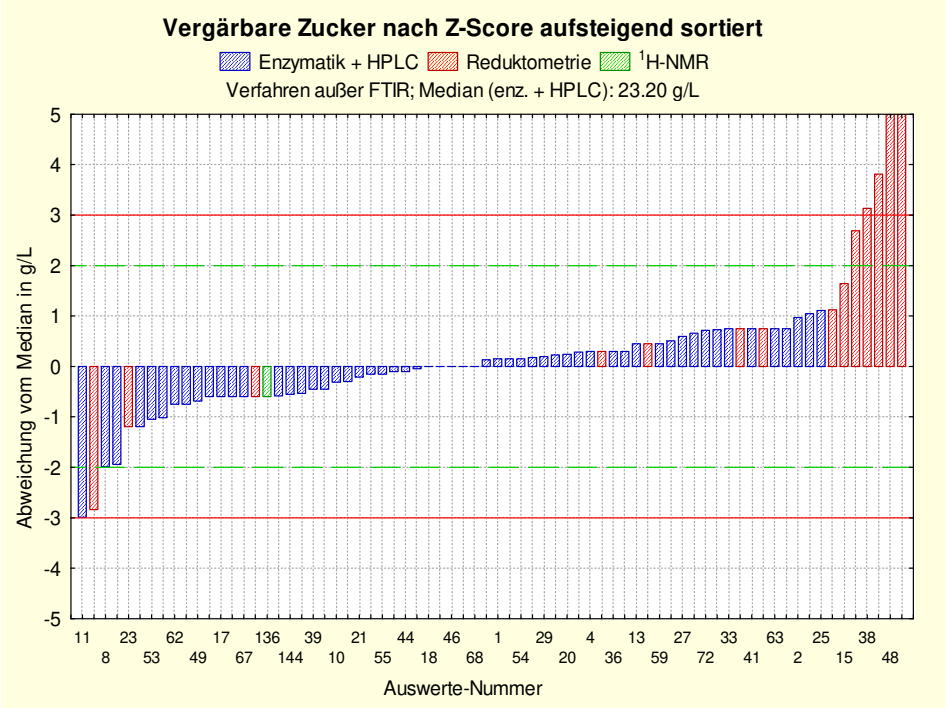
5.7.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L] nur enzymatische + HPLC-Verfahren	alle Daten
Gültige Werte	57
Minimalwert	21,20
Mittelwert	23,131
Median	23,200
Maximalwert	23,94
Standardabweichung (s_L)	0,513
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,068
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,818
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,669
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,584
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,63
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,77
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,88
Quotient (u_M/s_H)	0,08
Quotient (u_M/s_{exp})	0,10
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,12

5.7.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	13	24,37	1,675
LwK 4.6	Neocuproinmethode	1	22,40	
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	41	23,16	0,437
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	16	23,22	0,481
	enzymatische und HPLC-Verfahren	57	23,18	0,440
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	20	23,52	0,544
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	22,80	





5.8 Glucose [g/L]

5.8.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enzymat., autom.	11,20	-0,200	-0,45	-0,57	
4	HPLC	11,40	0,000	0,00	0,00	
5	enzymat., autom.	11,51	0,110	0,25	0,31	
6	enzymat. Hand	11,05	-0,350	-0,78	-1,00	
7	HPLC	11,57	0,170	0,38	0,48	
8	enzymat., autom.	10,94	-0,460	-1,03	-1,31	
9	enzymat., autom.	11,72	0,320	0,72	0,91	
10	enzymat., autom.	11,36	-0,040	-0,09	-0,11	
11	enzymat., autom.	10,50	-0,900	-2,01	-2,57	
12	enzymat., autom.	11,69	0,290	0,65	0,83	
13	enzymat., autom.	11,87	0,470	1,05	1,34	
16	enzymat., autom.	10,90	-0,500	-1,12	-1,43	
17	enzymat., autom.	11,10	-0,300	-0,67	-0,86	
18	enzymat., autom.	11,60	0,200	0,45	0,57	
20	HPLC	11,48	0,080	0,18	0,23	
21	enzymat., autom.	11,51	0,110	0,25	0,31	
24	enzymat., autom.	11,48	0,080	0,18	0,23	
25	HPLC	11,73	0,330	0,74	0,94	
26	HPLC	11,19	-0,210	-0,47	-0,60	
27	enzymat., autom.	11,71	0,310	0,69	0,88	
28	HPLC	11,61	0,210	0,47	0,60	
29	enzymat., autom.	11,28	-0,120	-0,27	-0,34	
32	HPLC	11,57	0,170	0,38	0,48	
33	enzymat., autom.	11,69	0,290	0,65	0,83	
34	HPLC	11,07	-0,330	-0,74	-0,94	
35	enzymat., autom.	11,45	0,050	0,11	0,14	
36	HPLC	11,40	0,000	0,00	0,00	
41	enzymat., autom.	12,00	0,600	1,34	1,71	
43	HPLC	11,40	0,000	0,00	0,00	
44	enzymat., autom.	11,40	0,000	0,00	0,00	
45	HPLC	11,20	-0,200	-0,45	-0,57	
49	HPLC	11,20	-0,200	-0,45	-0,57	
50	enzymat., autom.	11,49	0,090	0,20	0,26	
53	HPLC	11,00	-0,400	-0,89	-1,14	
54	enzymat., autom.	11,44	0,040	0,09	0,11	
55	HPLC	11,42	0,020	0,04	0,06	
56	enzymat., autom.	11,28	-0,120	-0,27	-0,34	
57	HPLC	11,30	-0,100	-0,22	-0,29	
59	enzymat., autom.	11,50	0,100	0,22	0,29	
60	enzymat., autom.	11,35	-0,050	-0,11	-0,14	
62	enzymat. Hand	11,20	-0,200	-0,45	-0,57	
66	enzymat., autom.	11,67	0,270	0,60	0,77	
67	enzymat., autom.	11,30	-0,100	-0,22	-0,29	
68	enzymat., autom.	11,37	-0,030	-0,07	-0,09	
69	enzymat., autom.	11,45	0,050	0,11	0,14	
71	enzymat., autom.	11,10	-0,300	-0,67	-0,86	
72	enzymat., autom.	11,58	0,180	0,40	0,51	
73	enzymat., autom.	11,21	-0,190	-0,42	-0,54	
74	HPLC	12,20	0,800	1,79	2,28	
75	enzymat. Hand	11,56	0,160	0,36	0,46	
136	NMR	11,25	-0,150	-0,34	-0,43	
144	HPLC	11,17	-0,230	-0,51	-0,66	
167	NMR	10,87	-0,525	-1,18	-1,50	
201	FTIR	12,00	0,600	1,34	1,47	
203	FTIR	11,75	0,350	0,78	0,86	
210	FTIR	10,93	-0,470	-1,05	-1,15	
211	FTIR	11,60	0,200	0,45	0,49	
216	FTIR	10,80	-0,600	-1,34	-1,47	
217	FTIR	12,00	0,600	1,34	1,47	
219	FTIR	12,00	0,600	1,34	1,47	

Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	11,53	0,130	0,29	0,32	
232	FTIR	11,90	0,500	1,12	1,23	
241	FTIR	11,80	0,400	0,89	0,98	
242	FTIR	11,90	0,500	1,12	1,23	
244	FTIR	12,26	0,860	1,92	2,11	
246	FTIR	11,40	0,000	0,00	0,00	
247	FTIR	9,90	-1,500	-3,35	-3,68	
250	FTIR	12,00	0,600	1,34	1,47	
251	FTIR	11,70	0,300	0,67	0,74	
253	FTIR	12,00	0,600	1,34	1,47	
254	FTIR	11,77	0,370	0,83	0,91	
260	FTIR	11,20	-0,200	-0,45	-0,49	
270	FTIR	11,87	0,470	1,05	1,15	
272	FTIR	11,00	-0,400	-0,89	-0,98	
273	FTIR	11,60	0,200	0,45	0,49	
274	FTIR	10,93	-0,470	-1,05	-1,15	

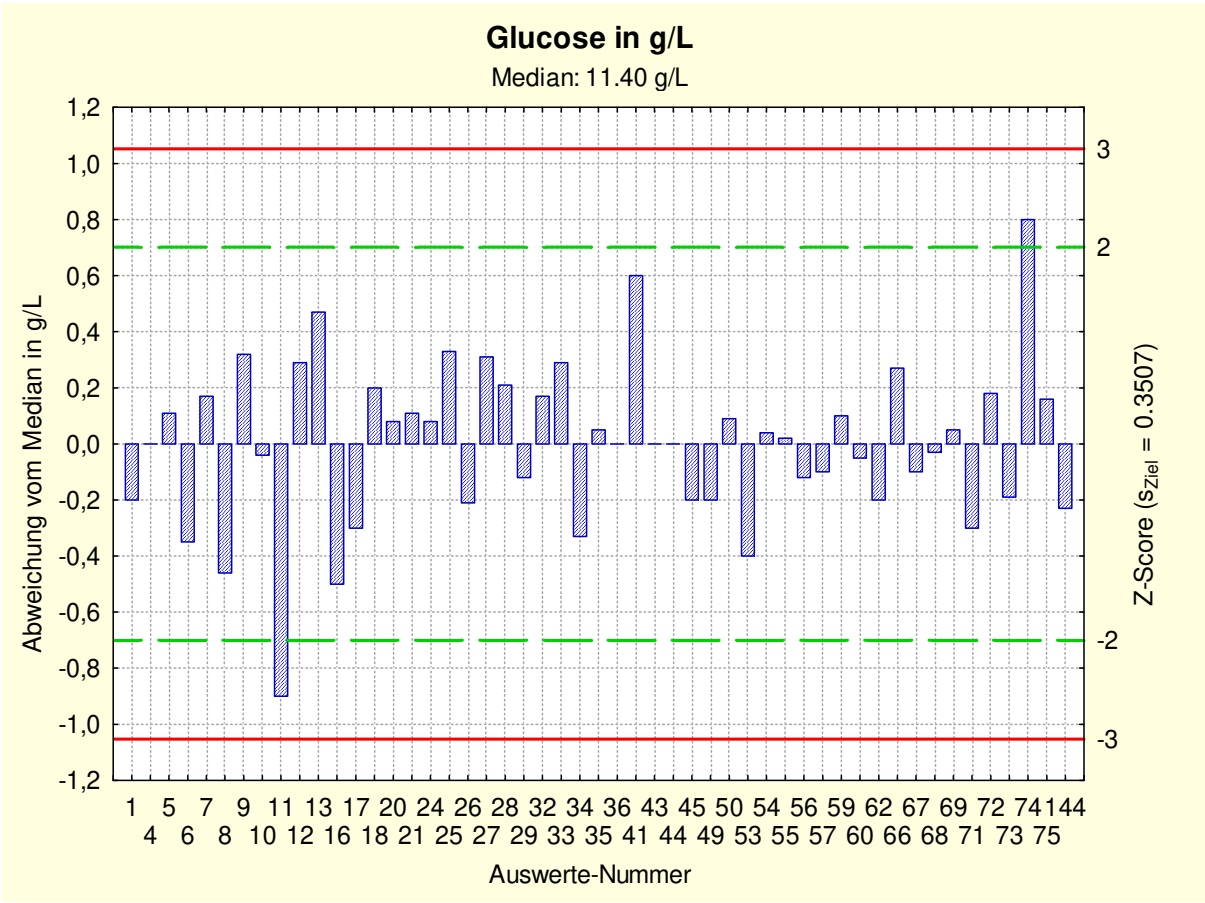
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.

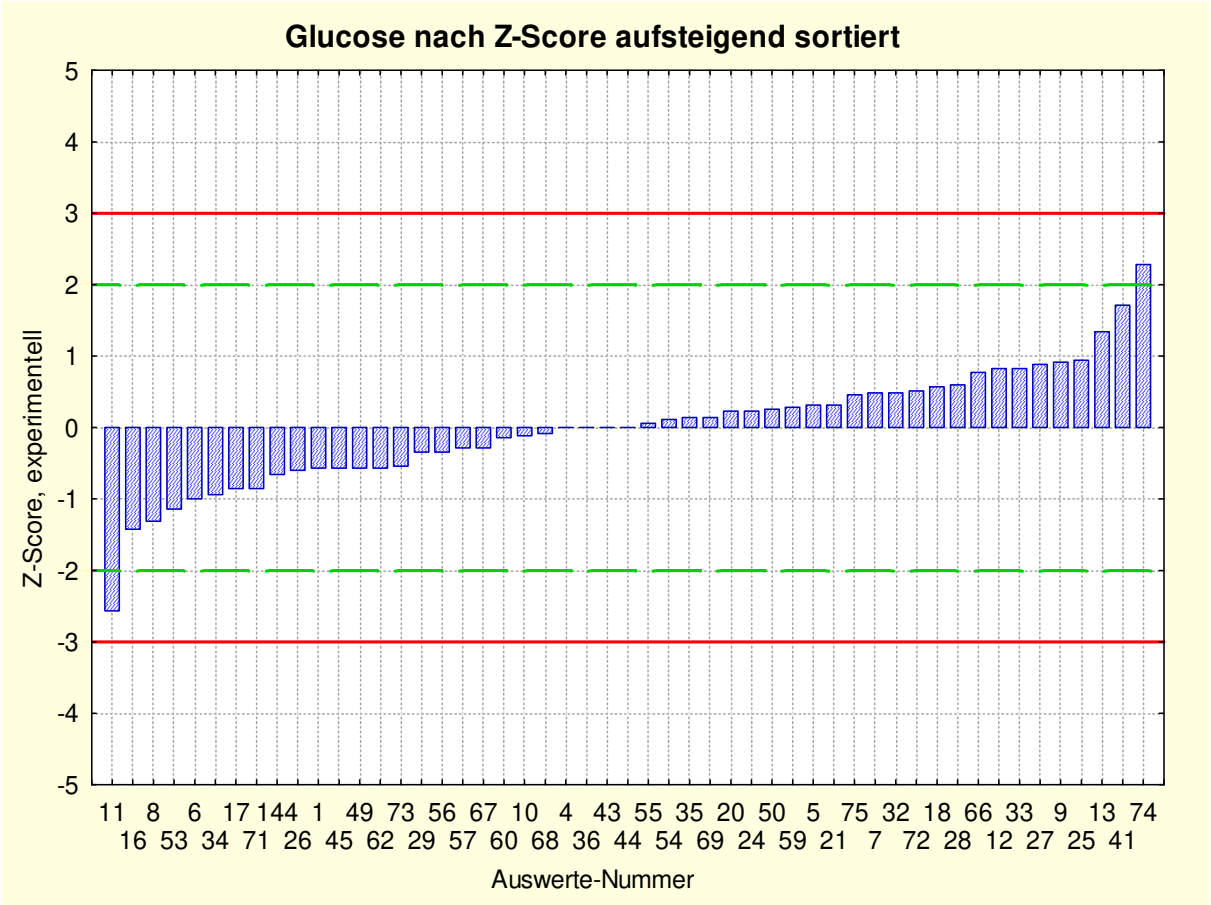
5.8.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	51
Minimalwert	10,50
Mittelwert	11,399
Median	11,400
Maximalwert	12,20
Standardabweichung (s_L)	0,291
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,041
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,447
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,351
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,408
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,65
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,83
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,71
Quotient (u_M/s_H)	0,09
Quotient (u_M/s_{exp})	0,12
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,10

5.8.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	17	11,381	0,253
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiertes Verfahren	31	11,425	0,262
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02 von Hand	3	11,261	0,281
	herkömmliche Verfahren	51	11,399	0,261
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	23	11,604	0,486
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	11,250	


Glucose in g/L
Median: 11.40 g/L
Abweichung vom Median in g/L
Z-Score (sZiel = 0.3507)
1,2
1,0
0,8
0,6
0,4
0,2
0,0
-0,2
-0,4
-0,6
-0,8
-1,0
-1,2
3
2
-2
-3
1 5 7 9 11 13 17 20 24 26 28 32 34 36 43 45 50 54 56 59 62 67 69 72 74 144
4 6 8 10 12 16 18 21 25 27 29 33 35 41 44 49 53 55 57 60 66 68 71 73 75
Auswerte-Nummer


Glucose nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
11 8 6 17 144 1 49 73 56 67 10 4 43 55 35 20 50 5 75 32 18 66 33 9 13 74
16 53 34 71 26 45 62 29 57 60 68 36 44 54 69 24 59 21 7 72 28 12 27 25 41
Auswerte-Nummer

5.9 Fructose [g/L]

5.9.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enzymat. autom.	12,10	0,400	0,88	1,11	
4	HPLC	12,01	0,310	0,68	0,86	
5	enzymat. autom.	11,90	0,200	0,44	0,56	
6	enzymat. Hand	11,73	0,030	0,07	0,08	
7	HPLC	12,29	0,590	1,29	1,64	
8	enzymat. autom.	10,93	-0,770	-1,68	-2,15	
9	enzymat. autom.	11,77	0,070	0,15	0,20	
10	enzymat. autom.	11,63	-0,070	-0,15	-0,20	
11	enzymat. autom.	10,70	-1,000	-2,19	-2,79	
12	enzymat. autom.	11,66	-0,040	-0,09	-0,11	
13	enzymat. autom.	11,63	-0,070	-0,15	-0,20	
16	enzymat. autom.	11,00	-0,700	-1,53	-1,95	
17	enzymat. autom.	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
18	enzymat. autom.	11,60	-0,100	-0,22	-0,28	
20	HPLC	11,88	0,180	0,39	0,50	
21	enzymat. autom.	11,55	-0,150	-0,33	-0,42	
24	enzymat. autom.	11,65	-0,050	-0,11	-0,14	
25	HPLC	12,21	0,510	1,12	1,42	
26	HPLC	11,59	-0,110	-0,24	-0,31	
27	enzymat. autom.	11,89	0,190	0,42	0,53	
28	HPLC	12,17	0,470	1,03	1,31	
29	enzymat. autom.	11,94	0,240	0,53	0,67	
32	HPLC	12,12	0,420	0,92	1,17	
33	enzymat. autom.	11,98	0,280	0,61	0,78	
34	HPLC	11,45	-0,250	-0,55	-0,70	
35	enzymat. autom.	11,72	0,020	0,04	0,06	
36	HPLC	12,00	0,300	0,66	0,84	
41	enzymat. autom.	11,70	0,000	0,00	0,00	
43	HPLC	11,72	0,020	0,04	0,06	
44	enzymat. autom.	11,70	0,000	0,00	0,00	
45	HPLC	11,68	-0,020	-0,04	-0,06	
49	HPLC	11,54	-0,160	-0,35	-0,45	
50	enzymat. autom.	11,67	-0,030	-0,07	-0,08	
53	HPLC	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
54	enzymat. autom.	11,87	0,170	0,37	0,47	
55	HPLC	11,79	0,090	0,20	0,25	
56	enzymat. autom.	11,56	-0,140	-0,31	-0,39	
57	HPLC	11,70	0,000	0,00	0,00	
59	enzymat. autom.	12,00	0,300	0,66	0,84	
60	enzymat. autom.	11,46	-0,240	-0,53	-0,67	
62	enzymat. Hand	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
66	enzymat. autom.	11,76	0,060	0,13	0,17	
67	enzymat. autom.	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
68	enzymat. autom.	11,82	0,120	0,26	0,33	
69	enzymat. autom.	11,87	0,170	0,37	0,47	
71	enzymat. autom.	11,26	-0,440	-0,96	-1,23	
72	enzymat. autom.	11,75	0,050	0,11	0,14	
73	enzymat. autom.	11,47	-0,230	-0,50	-0,64	
74	HPLC	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
75	enzymat. Hand	11,34	-0,360	-0,79	-1,00	
136	NMR	11,59	-0,110	-0,24	-0,31	
144	HPLC	11,66	-0,040	-0,09	-0,11	
167	NMR	11,19	-0,514	-1,12	-1,43	
201	FTIR	8,80	-2,900	-6,34	-8,08	(***)
203	FTIR	11,16	-0,540	-1,18	-1,51	
210	FTIR	11,16	-0,540	-1,18	-1,51	
211	FTIR	11,90	0,200	0,44	0,56	
216	FTIR	11,40	-0,300	-0,66	-0,84	
217	FTIR	11,00	-0,700	-1,53	-1,95	

Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
(***) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	11,70	0,000	0,00	0,00	
229	FTIR	11,34	-0,360	-0,79	-1,00	
232	FTIR	12,20	0,500	1,09	1,39	
241	FTIR	11,70	0,000	0,00	0,00	
242	FTIR	11,60	-0,100	-0,22	-0,28	
244	FTIR	11,47	-0,230	-0,50	-0,64	
246	FTIR	11,30	-0,400	-0,88	-1,11	
247	FTIR	12,00	0,300	0,66	0,84	
250	FTIR	11,50	-0,200	-0,44	-0,56	
251	FTIR	12,00	0,300	0,66	0,84	
253	FTIR	11,80	0,100	0,22	0,28	
254	FTIR	11,52	-0,180	-0,39	-0,50	
260	FTIR	13,70	2,000	4,38	5,57	(***)
270	FTIR	11,26	-0,440	-0,96	-1,23	
272	FTIR	11,20	-0,500	-1,09	-1,39	
273	FTIR	11,67	-0,030	-0,07	-0,08	
274	FTIR	9,82	-1,880	-4,11	-5,24	(***)

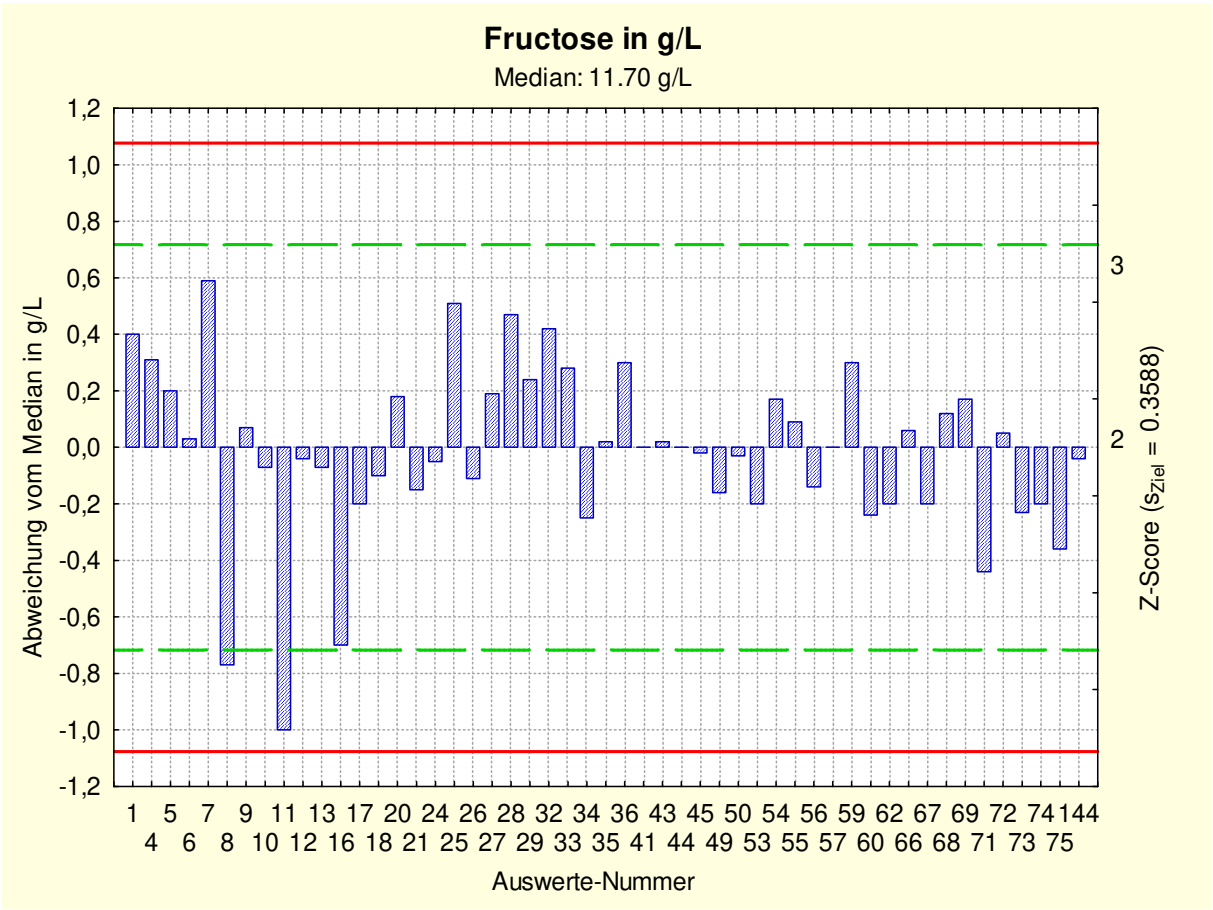
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
(***) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

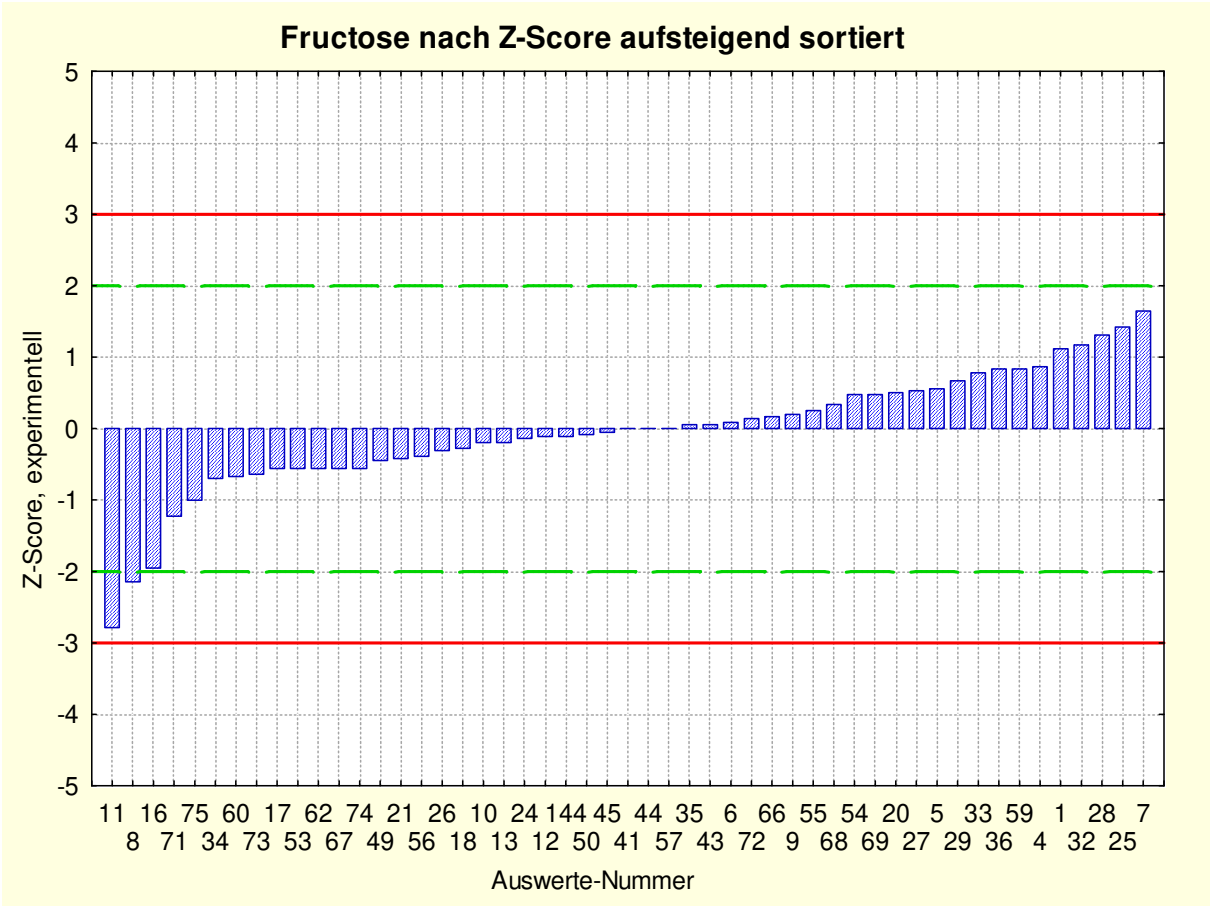
5.9.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	51
Minimalwert	10,70
Mittelwert	11,685
Median	11,700
Maximalwert	12,29
Standardabweichung (s_L)	0,305
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,043
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,457
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,359
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,330
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,67
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,85
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,92
Quotient (u_M/s_H)	0,09
Quotient (u_M/s_{exp})	0,12
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,13

5.9.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	17	11,811	0,309
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiertes Verfahren	31	11,672	0,238
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02 von Hand	3	11,523	0,222
	herkömmliche Verfahren	51	11,703	0,257
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	23	11,509	0,441
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	11,590	


Fructose in g/L
Median: 11.70 g/L
Abweichung vom Median in g/L
Z-Score (s_{Ziel} = 0.3588)
Auswerte-Nummer


Fructose nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer

5.10 Glycerin [g/L]

5.10.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
4	HPLC	7,30	0,000	0,00		
5	enzymat. autom.	7,86	0,560	1,83		
7	HPLC	7,27	-0,030	-0,10		
11	enzymat. autom.	7,88	0,580	1,89		
12	enzymat. autom.	7,30	0,000	0,00		
20	HPLC	6,51	-0,790	-2,58		
25	HPLC	7,38	0,080	0,26		
26	HPLC	7,15	-0,150	-0,49		
28	HPLC	7,37	0,070	0,23		
31	HPLC	7,10	-0,200	-0,65		
32	enzymat. autom.	7,40	0,100	0,33		
34	HPLC	7,34	0,040	0,13		
36	HPLC	7,60	0,300	0,98		
41	enzymat. autom.	7,40	0,100	0,33		
43	HPLC	7,29	-0,010	-0,03		
45	HPLC	7,00	-0,300	-0,98		
49	HPLC	7,28	-0,020	-0,07		
53	HPLC	7,60	0,300	0,98		
55	HPLC	6,23	-1,070	-3,49		
57	HPLC	7,16	-0,140	-0,46		
67	enzymat. autom.	7,49	0,190	0,62		
136	NMR	7,35	0,050	0,16		
144	HPLC	7,30	0,000	0,00		
167	NMR	7,16	-0,141	-0,46		
203	FTIR	7,17	-0,130	-0,42	-0,37	
210	FTIR	7,00	-0,300	-0,98	-0,86	
219	FTIR	6,70	-0,600	-1,96	-1,72	
229	FTIR	8,22	0,920	3,00	2,64	
232	FTIR	6,80	-0,500	-1,63	-1,44	
241	FTIR	7,30	0,000	0,00	0,00	
242	FTIR	6,60	-0,700	-2,29	-2,01	
247	FTIR	7,40	0,100	0,33	0,29	
250	FTIR	6,39	-0,910	-2,97	-2,61	
253	FTIR	8,70	1,400	4,57	4,02	
254	FTIR	7,13	-0,170	-0,56	-0,49	
260	FTIR	7,70	0,400	1,31	1,15	
272	FTIR	6,60	-0,700	-2,29	-2,01	
273	FTIR	6,92	-0,380	-1,24	-1,09	
274	FTIR	7,00	-0,300	-0,98	-0,86	

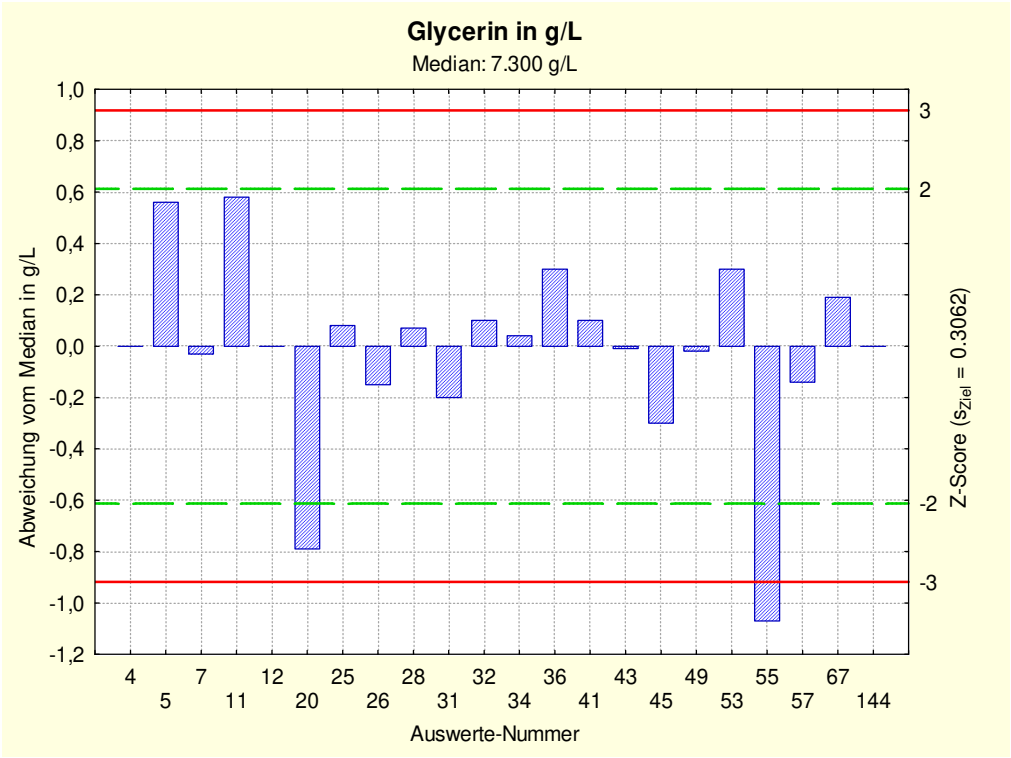
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 203 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.

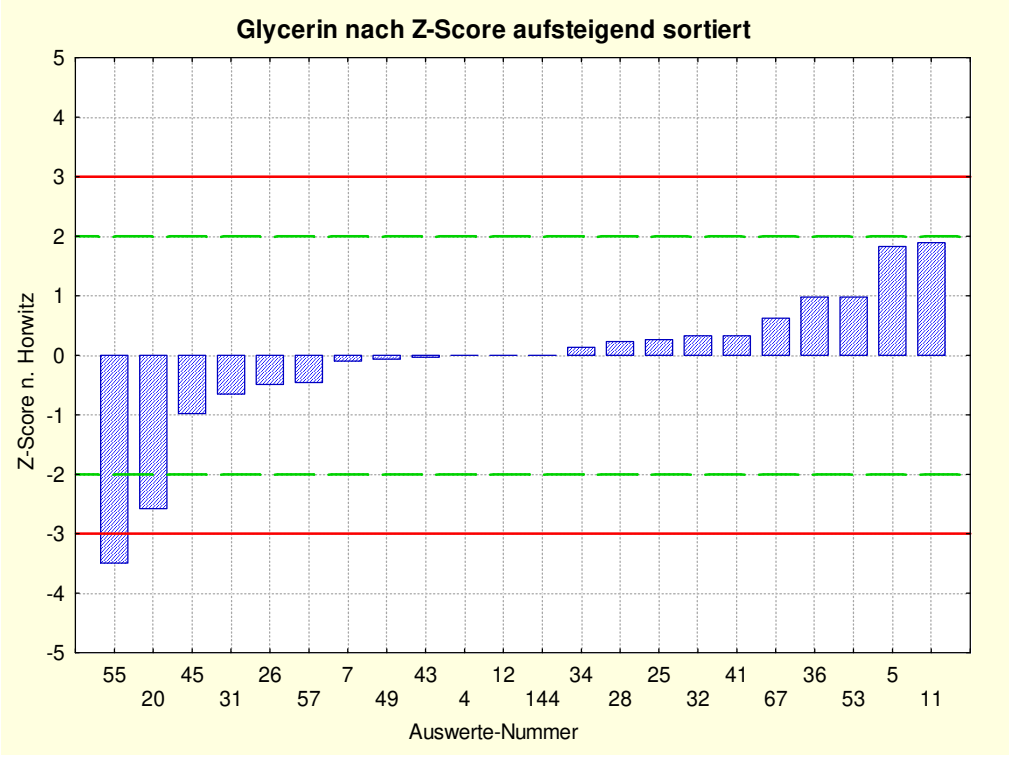
5.10.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	6,23
Mittelwert	7,282
Median	7,300
Maximalwert	7,88
Standardabweichung (s_L)	0,367
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,078
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,306
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,20
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,06
Quotient (u_M/s_H)	0,26
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,23

5.10.1 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigchromatographie	16	7,248	0,222
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	7,539	0,257
	herkömmliche Verfahren	22	7,315	0,225
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	15	7,096	0,523
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	7,350	





5.11 pH-Wert

5.11.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
2	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
4	potentiometr.	3,46	-0,060	-1,26	
5	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
7	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
8	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
9	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
10	potentiometr.	3,67	0,150	3,15	
11	potentiometr.	3,57	0,050	1,05	
12	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
13	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
16	potentiometr.	3,46	-0,060	-1,26	
17	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
18	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
19	potentiometr.	3,47	-0,050	-1,05	
20	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
21	potentiometr.	3,48	-0,040	-0,84	
24	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
25	potentiometr.	3,68	0,160	3,36	
26	potentiometr.	3,47	-0,050	-1,05	
27	potentiometr.	3,46	-0,060	-1,26	
28	potentiometr.	3,48	-0,040	-0,84	
29	potentiometr.	3,56	0,040	0,84	
30	potentiometr.	3,42	-0,100	-2,10	
31	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
32	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
33	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
34	potentiometr.	3,57	0,050	1,05	
35	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
36	potentiometr.	3,47	-0,050	-1,05	
37	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
38	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
39	FTIR	3,60	0,080	1,68	
40	potentiometr.	3,55	0,030	0,63	
41	potentiometr.	3,57	0,050	1,05	
43	potentiometr.	3,51	-0,010	-0,21	
44	potentiometr.	3,59	0,070	1,47	
45	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
48	potentiometr.	3,69	0,170	3,57	
50	potentiometr.	3,60	0,080	1,68	
51	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
52	potentiometr.	3,47	-0,050	-1,05	
53	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
54	potentiometr.	3,56	0,040	0,84	
55	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
56	potentiometr.	3,56	0,040	0,84	
57	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
58	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
59	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
60	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
61	potentiometr.	3,52	0,000	0,00	
62	potentiometr.	3,30	-0,220	-4,62	
64	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
65	potentiometr.	3,51	-0,010	-0,21	
66	potentiometr.	3,45	-0,070	-1,47	
67	potentiometr.	3,55	0,030	0,63	
68	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
69	potentiometr.	3,53	0,010	0,21	
70	potentiometr.	3,54	0,020	0,42	
71	potentiometr.	3,49	-0,030	-0,63	
72	potentiometr.	3,50	-0,020	-0,42	
74	potentiometr.	3,58	0,060	1,26	
75	potentiometr.	3,58	0,060	1,26	

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,57	0,050	1,05	
203	FTIR	3,53	0,010	0,21	
210	FTIR	3,50	-0,020	-0,42	
211	FTIR	3,68	0,160	3,36	
214	FTIR	3,56	0,040	0,84	
216	FTIR	3,51	-0,010	-0,21	
217	FTIR	3,43	-0,090	-1,89	
219	FTIR	3,47	-0,050	-1,05	
229	FTIR	3,53	0,010	0,21	
232	FTIR	3,49	-0,030	-0,63	
241	FTIR	3,55	0,030	0,63	
242	FTIR	3,53	0,010	0,21	
244	FTIR	3,45	-0,070	-1,47	
246	FTIR	3,51	-0,010	-0,21	
247	FTIR	3,30	-0,220	-4,62	
250	FTIR	3,50	-0,020	-0,42	
251	FTIR	3,45	-0,070	-1,47	
253	FTIR	3,50	-0,020	-0,42	
254	FTIR	3,46	-0,060	-1,26	
260	FTIR	3,49	-0,030	-0,63	
270	FTIR	3,47	-0,050	-1,05	
272	FTIR	3,45	-0,070	-1,47	
273	FTIR	3,47	-0,050	-1,05	
274	FTIR	3,50	-0,020	-0,42	

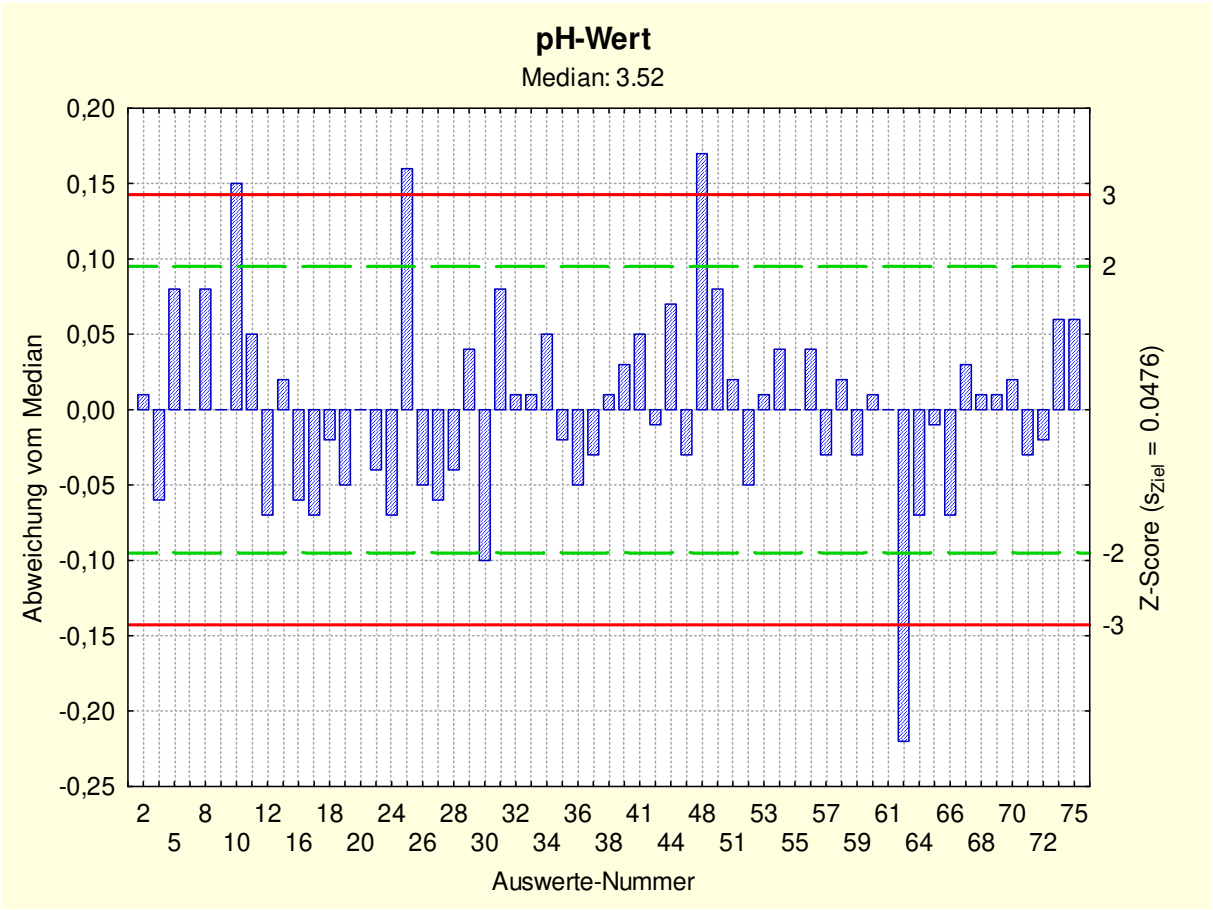
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ exp\ herk}$ berechnet.

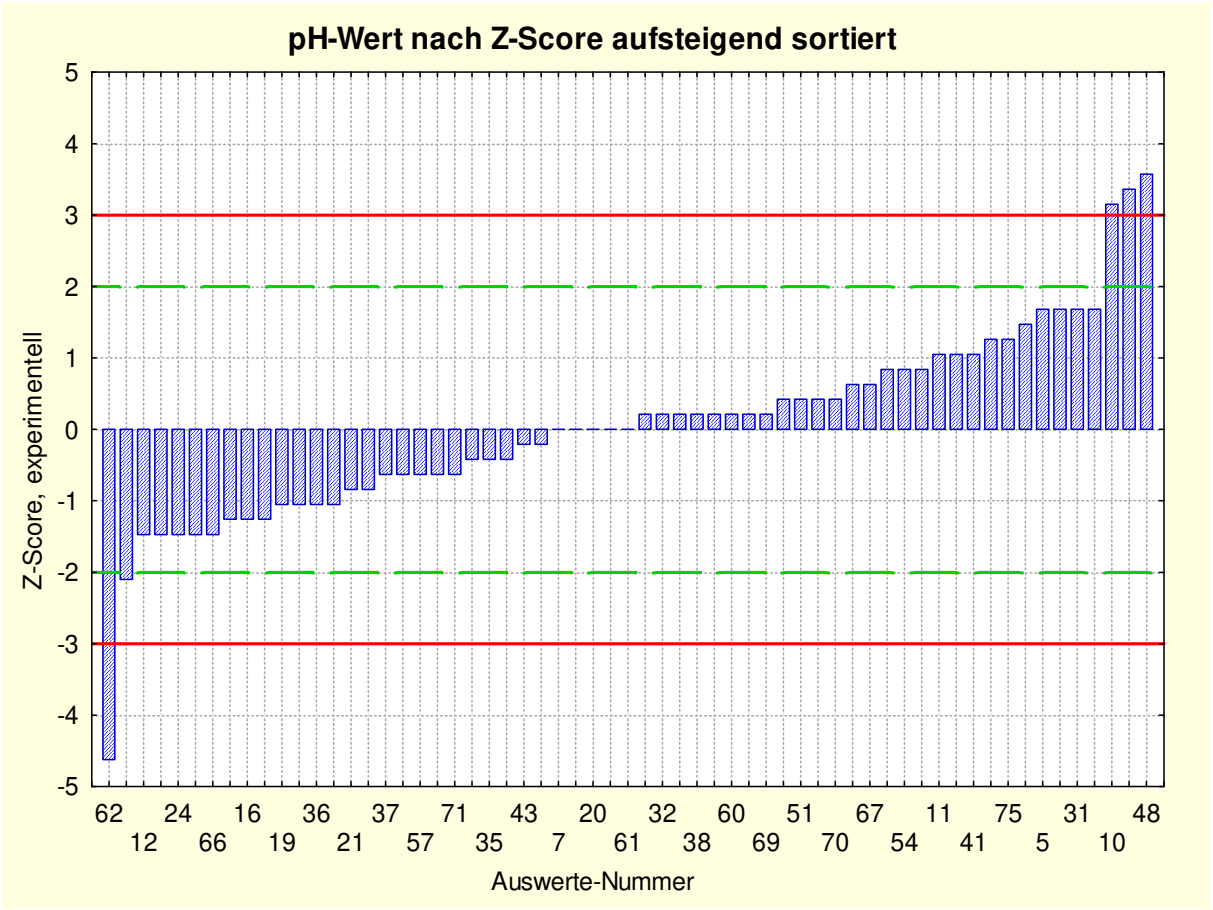
5.11.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	61
Minimalwert	3,30
Mittelwert	3,522
Median	3,520
Maximalwert	3,69
Standardabweichung (s_L)	0,0637
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0082
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,34
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,36
Quotient (u_M/s_H)	1,29
Quotient (u_M/s_{exp})	0,17
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,17

5.11.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	61	3,521	0,0554
FTIR	Fourier-Transform Infrarotspektroskopie	25	3,500	0,0501
	alle Verfahren	86	3,515	0,0550


pH-Wert
Median: 3.52
Abweichung vom Median
Z-Score (sZiel = 0.0476)
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
-0,05
-0,10
-0,15
-0,20
-0,25
3
2
-2
-3
2 5 8 10 12 16 18 20 24 26 28 30 32 34 36 38 41 44 48 51 53 55 57 59 61 64 66 68 70 72 75
Auswerte-Nummer


pH-Wert nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
62 12 24 66 16 19 36 21 37 57 71 35 43 7 20 61 32 38 60 69 51 70 67 54 11 41 75 5 31 10 48
Auswerte-Nummer

5.12 Gesamtsäure [g/L]

5.12.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
2	LwK 5.2.1	7,00	0,195	0,68	1,82	
3	LwK 5.2.1	6,71	-0,095	-0,33	-0,89	
4	LwK 5.2.1	6,81	0,005	0,02	0,05	
5	LwK 5.2.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
6	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
7	LwK 5.1	6,77	-0,035	-0,12	-0,33	
8	LwK 5.1	7,60	0,795	2,76	7,42	(**)
9	LwK 5.2.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
10	LwK 5.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
11	LwK 5.2.1	6,77	-0,035	-0,12	-0,33	
12	LwK 5.1	6,77	-0,035	-0,12	-0,33	
13	LwK 5.1	6,86	0,055	0,19	0,51	
15	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
16	LwK 5.2.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
17	LwK 5.2.1	6,70	-0,105	-0,36	-0,98	
18	LwK 5.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
19	LwK 5.1	6,37	-0,435	-1,51	-4,06	
20	LwK 5.2.2	6,88	0,075	0,26	0,70	
21	LwK 5.1	6,77	-0,035	-0,12	-0,33	
22	LwK 5.2.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
23	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
24	LwK 5.1	6,82	0,015	0,05	0,14	
25	LwK 5.1	6,40	-0,405	-1,40	-3,78	
26	LwK 5.1	6,86	0,055	0,19	0,51	
27	LwK 5.1	6,96	0,155	0,54	1,45	
28	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
29	LwK 5.2.1	6,75	-0,055	-0,19	-0,51	
30	LwK 5.1	6,95	0,145	0,50	1,35	
31	LwK 5.1	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
32	LwK 5.1	6,71	-0,095	-0,33	-0,89	
33	LwK 5.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
34	LwK 5.2.1	6,91	0,105	0,36	0,98	
35	LwK 5.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
36	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
37	k. A.	6,82	0,015	0,05	0,14	
38	LwK 5.1	7,34	0,535	1,85	4,99	
39	LwK 5.3	6,80	-0,005	-0,02	-0,05	
40	LwK 5.1	6,62	-0,185	-0,64	-1,73	
41	LwK 5.1	6,30	-0,505	-1,75	-4,71	
42	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
43	LwK 5.1	6,98	0,175	0,61	1,63	
44	LwK 5.1	6,89	0,085	0,29	0,79	
45	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
46	LwK 5.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
48	LwK 5.1	6,50	-0,305	-1,06	-2,85	
49	LwK 5.1	6,82	0,015	0,05	0,14	
50	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
51	LwK 5.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
52	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
53	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
54	LwK 5.1	6,70	-0,105	-0,36	-0,98	
55	LwK 5.1	6,55	-0,255	-0,88	-2,38	
56	LwK 5.1	6,93	0,125	0,43	1,17	
57	LwK 5.2.1	6,94	0,135	0,47	1,26	
58	LwK 5.1	6,70	-0,105	-0,36	-0,98	
59	LwK 5.1	6,72	-0,085	-0,29	-0,79	
60	LwK 5.2.1	6,79	-0,015	-0,05	-0,14	
61	LwK 5.2.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
62	LwK 5.2.1	6,90	0,095	0,33	0,89	

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

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
63	LwK 5.1	7,00	0,195	0,68	1,82	
64	LwK 5.1	6,95	0,145	0,50	1,35	
65	LwK 5.2.1	6,50	-0,305	-1,06	-2,85	
66	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
67	LwK 5.1	6,69	-0,115	-0,40	-1,07	
68	LwK 5.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
69	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
70	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
71	LwK 5.1	6,60	-0,205	-0,71	-1,91	
72	LwK 5.1	6,67	-0,135	-0,47	-1,26	
73	LwK 5.2.1	6,85	0,045	0,16	0,42	
74	LwK 5.2.1	6,70	-0,105	-0,36	-0,98	
76	LwK 5.1	6,90	0,095	0,33	0,89	
201	LwK 5.3	6,60	-0,205	-0,71	-1,41	
203	LwK 5.3	6,91	0,105	0,36	0,72	
210	LwK 5.3	7,05	0,245	0,85	1,69	
211	LwK 5.3	6,77	-0,035	-0,12	-0,24	
214	LwK 5.3	6,87	0,065	0,23	0,45	
216	LwK 5.3	6,70	-0,105	-0,36	-0,72	
217	LwK 5.3	7,00	0,195	0,68	1,34	
219	LwK 5.3	6,40	-0,405	-1,40	-2,79	
229	LwK 5.3	6,72	-0,085	-0,29	-0,59	
232	LwK 5.3	6,60	-0,205	-0,71	-1,41	
241	LwK 5.3	6,42	-0,385	-1,33	-2,66	
242	LwK 5.3	6,70	-0,105	-0,36	-0,72	
244	LwK 5.3	6,93	0,125	0,43	0,86	
246	LwK 5.3	5,30	-1,505	-5,22	-10,38	(***)
247	LwK 5.3	6,60	-0,205	-0,71	-1,41	
250	LwK 5.3	6,64	-0,165	-0,57	-1,14	
251	LwK 5.3	6,80	-0,005	-0,02	-0,03	
253	LwK 5.3	6,90	0,095	0,33	0,66	
254	LwK 5.3	6,85	0,045	0,16	0,31	
260	LwK 5.3	6,73	-0,075	-0,26	-0,52	
270	LwK 5.3	6,65	-0,155	-0,54	-1,07	
272	LwK 5.3	6,69	-0,115	-0,40	-0,79	
273	LwK 5.3	6,96	0,155	0,54	1,07	
274	LwK 5.3	6,90	0,095	0,33	0,66	

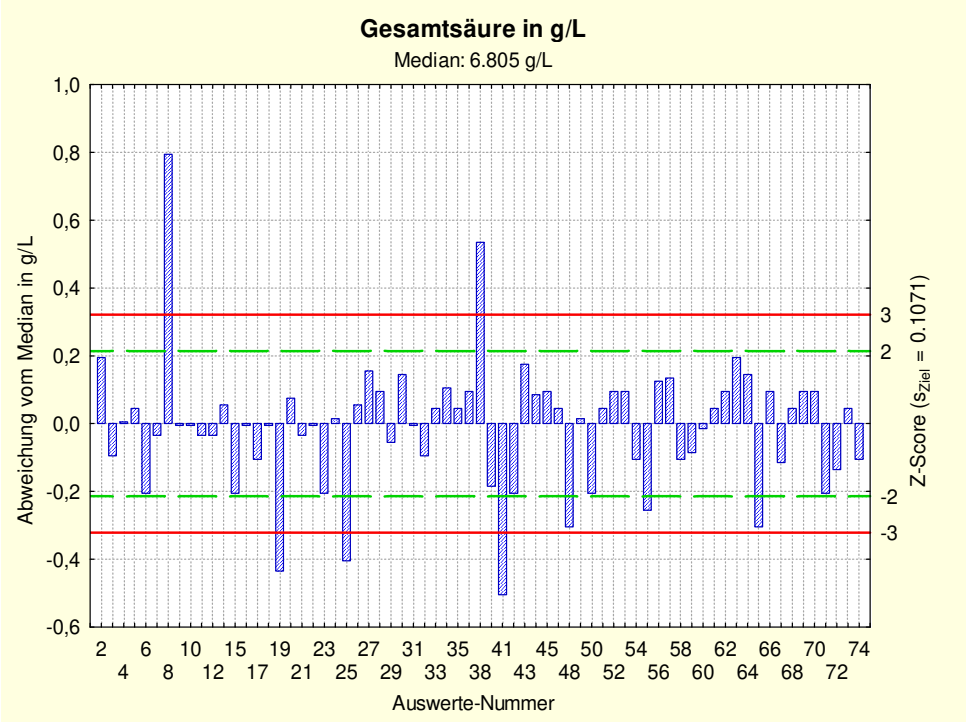
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

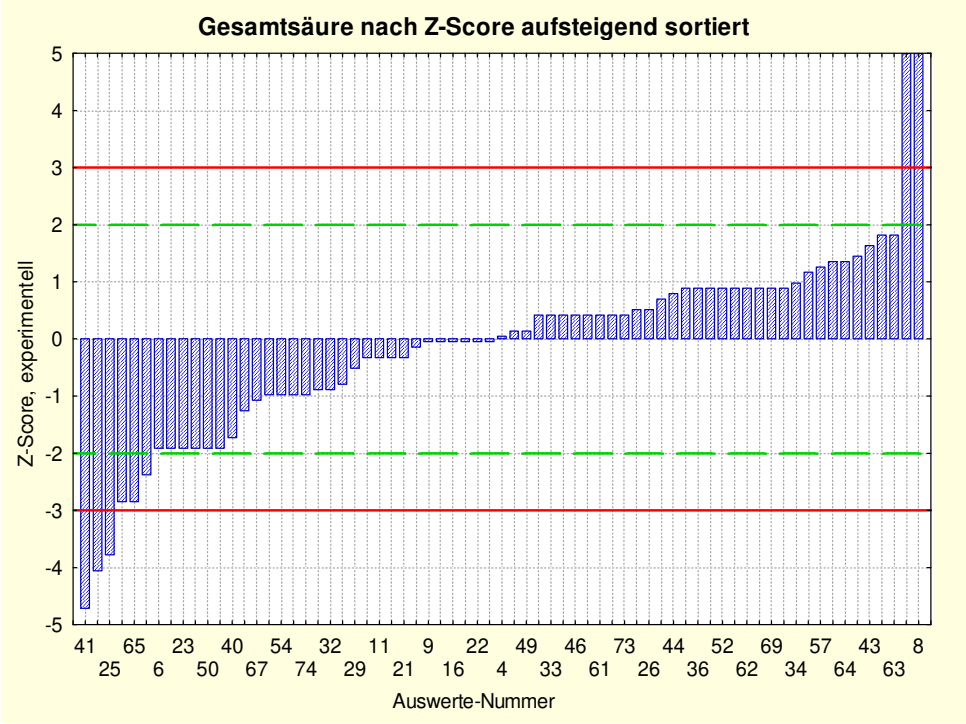
5.12.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	69	68
Minimalwert	6,30	6,30
Mittelwert	6,797	6,785
Median	6,810	6,805
Maximalwert	7,60	7,34
Standardabweichung (s_L)	0,192	0,166
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,023	0,020
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,289	0,288
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,145	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,66	0,58
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,79	1,55
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,32	1,15
Quotient (u_M/s_H)	0,08	0,07
Quotient (u_M/s_{exp})	0,22	0,19
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,16	0,14

5.12.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	50	6,787	0,165
LwK 5.2.1	nach OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.2	18	6,808	0,095
LwK 5.2.2	Endpunktbestimmung mit Indikator; OIV-MA-AS-313-01, Nr. 5.3	1	6,880	
	herkömmliche Verfahren	69	6,797	0,143
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	25	6,750	0,187
k. A.	keine Angabe	1	6,820	





5.13 Weinsäure [g/L]

5.13.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebnis-wert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	phot.autom.	2,40	0,200	1,81		
4	HPLC	1,90	-0,300	-2,71		
5	phot.autom.	2,04	-0,160	-1,45		
6	photometr.	2,00	-0,200	-1,81		
7	photometr.	2,20	0,000	0,00		
10	phot.autom.	2,42	0,220	1,99		
11	phot.autom.	2,02	-0,180	-1,63		
12	phot.autom.	2,32	0,120	1,09		
16	phot.autom.	2,41	0,210	1,90		
17	photometr.	2,10	-0,100	-0,90		
20	HPLC	2,76	0,560	5,07		(**)
21	phot.autom.	2,40	0,200	1,81		
24	phot.autom.	2,05	-0,150	-1,36		
26	HPLC	2,06	-0,140	-1,27		
28	HPLC	2,10	-0,100	-0,90		
29	phot.autom.	2,50	0,300	2,71		
31	HPLC	2,20	0,000	0,00		
32	HPLC	2,39	0,190	1,72		
33	phot.autom.	2,17	-0,030	-0,27		
34	HPLC	1,72	-0,480	-4,34		
35	phot.autom.	2,50	0,300	2,71		
36	HPLC	2,21	0,010	0,09		
37	phot.autom.	2,38	0,180	1,63		
41	HPLC	2,30	0,100	0,90		
43	HPLC	1,85	-0,350	-3,17		
49	HPLC	2,33	0,130	1,18		
50	phot.autom.	1,98	-0,220	-1,99		
53	phot.autom.	2,30	0,100	0,90		
54	phot.autom.	2,41	0,210	1,90		
56	phot.autom.	2,16	-0,040	-0,36		
57	HPLC	2,19	-0,010	-0,09		
58	phot.autom.	3,33	1,130	10,22		(*)
59	phot.autom.	2,33	0,130	1,18		
60	phot.autom.	2,36	0,160	1,45		
67	HPLC	2,10	-0,100	-0,90		
68	phot.autom.	2,44	0,240	2,17		
69	phot.autom.	2,30	0,100	0,90		
72	phot.autom.	1,82	-0,380	-3,44		
74	HPLC	2,20	0,000	0,00		
136	NMR	2,07	-0,130	-1,18		
167	NMR	2,20	-0,002	-0,01		
201	FTIR	2,20	-0,010	-0,09	-0,04	
203	FTIR	2,17	-0,040	-0,36	-0,18	
210	FTIR	2,30	0,090	0,81	0,40	
211	FTIR	1,90	-0,310	-2,79	-1,37	
214	FTIR	1,93	-0,280	-2,52	-1,23	
216	FTIR	2,39	0,180	1,62	0,79	
217	FTIR	1,50	-0,710	-6,40	-3,13	
219	FTIR	2,10	-0,110	-0,99	-0,48	
229	FTIR	2,03	-0,180	-1,62	-0,79	
232	FTIR	2,00	-0,210	-1,89	-0,93	
241	FTIR	2,10	-0,110	-0,99	-0,48	
242	FTIR	1,90	-0,310	-2,79	-1,37	
244	FTIR	2,34	0,130	1,17	0,57	
246	FTIR	2,20	-0,010	-0,09	-0,04	
247	FTIR	2,30	0,090	0,81	0,40	
250	FTIR	1,77	-0,440	-3,97	-1,94	
251	FTIR	2,90	0,690	6,22	3,04	
253	FTIR	2,10	-0,110	-0,99	-0,48	
254	FTIR	2,50	0,290	2,61	1,28	
260	FTIR	2,10	-0,110	-0,99	-0,48	
270	FTIR	2,10	-0,110	-0,99	-0,48	
272	FTIR	2,40	0,190	1,71	0,84	
273	FTIR	2,19	-0,020	-0,18	-0,09	
274	FTIR	2,16	-0,050	-0,45	-0,22	

Anmerkungen zur vorstehenden Tabelle:

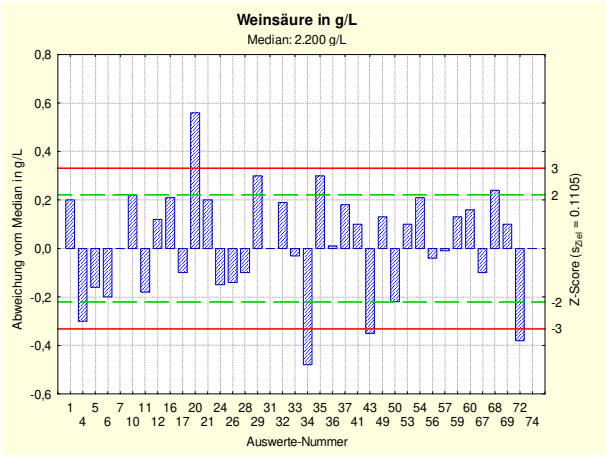
Der mit (*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Bezugswert ab.
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dies Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

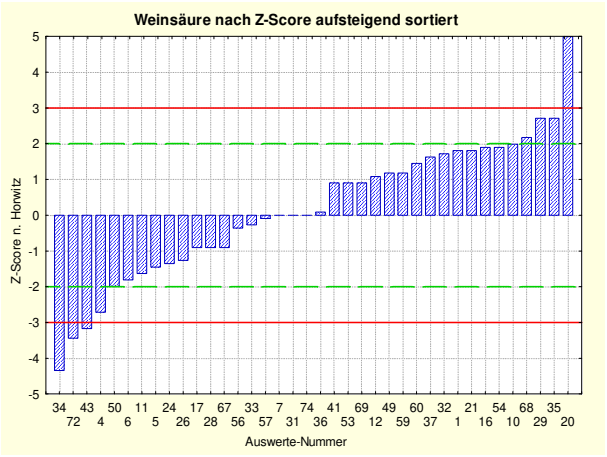
5.13.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	38	37
Minimalwert	1,72	1,72
Mittelwert	2,219	2,204
Median	2,205	2,200
Maximalwert	2,76	2,50
Standardabweichung (s_L)	0,217	0,200
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,035	0,033
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,111	0,111
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,227	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,96	1,81
Quotient (s_L/s_{exp})		
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,89	0,88
Quotient (u_M/s_H)	0,32	0,30
Quotient (u_M/s_{exp})		
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,15	0,15

5.13.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigchromatographie	14	2,157	0,215
photometr.	photometrisch nach Rebelein	3	2,100	0,113
phot. autom.	photometrisch, automatisiert	22	2,297	0,204
	HPLC- und photometrische Verfahren	39	2,231	0,220
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	24	2,145	0,220
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,070	





5.14 Gesamtäpfelsäure [g/L]

5.14.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus HPLC- und Ionenchromatographie-Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
4	HPLC	1,140	-0,070	-1,05	-1,44	
20	HPLC	0,760	-0,450	-6,77	-9,25	(**)
26	HPLC	1,430	0,220	3,31	4,52	
28	HPLC	1,240	0,030	0,45	0,62	
31	HPLC	1,200	-0,010	-0,15	-0,21	
32	HPLC	1,230	0,020	0,30	0,41	
34	HPLC	1,190	-0,020	-0,30	-0,41	
36	HPLC	1,250	0,040	0,60	0,82	
41	HPLC	1,700	0,490	7,37	10,08	(**)
43	HPLC	1,160	-0,050	-0,75	-1,03	
49	HPLC	1,310	0,100	1,50	2,06	
57	IC	1,210	0,000	0,00	0,00	
67	HPLC	1,200	-0,010	-0,15	-0,21	
74	HPLC	1,000	-0,210	-3,16	-4,32	
136	NMR	1,150	-0,060	-0,90	-1,23	
144	HPLC	1,260	0,050	0,75	1,03	
167	NMR	1,336	0,126	1,89	2,59	
201	FTIR	1,400	0,190	2,86	0,87	
203	FTIR	1,070	-0,140	-2,10	-0,64	
210	FTIR	1,450	0,240	3,61	1,10	
214	FTIR	1,200	-0,010	-0,15	-0,05	
216	FTIR	1,200	-0,010	-0,15	-0,05	
217	FTIR	1,100	-0,110	-1,65	-0,50	
219	FTIR	1,300	0,090	1,35	0,41	
229	FTIR	0,550	-0,660	-9,92	-3,03	
232	FTIR	1,000	-0,210	-3,16	-0,96	
241	FTIR	1,100	-0,110	-1,65	-0,50	
242	FTIR	0,900	-0,310	-4,66	-1,42	
244	FTIR	0,270	-0,940	-14,13	-4,31	
246	FTIR	0,900	-0,310	-4,66	-1,42	
247	FTIR	1,200	-0,010	-0,15	-0,05	
250	FTIR	0,540	-0,670	-10,07	-3,07	
251	FTIR	0,800	-0,410	-6,16	-1,88	
253	FTIR	0,700	-0,510	-7,67	-2,34	
254	FTIR	0,710	-0,500	-7,52	-2,29	
260	FTIR	0,790	-0,420	-6,31	-1,93	
270	FTIR	1,300	0,090	1,35	0,41	
272	FTIR	1,400	0,190	2,86	0,87	
273	FTIR	0,920	-0,290	-4,36	-1,33	
274	FTIR	1,520	0,310	4,66	1,42	

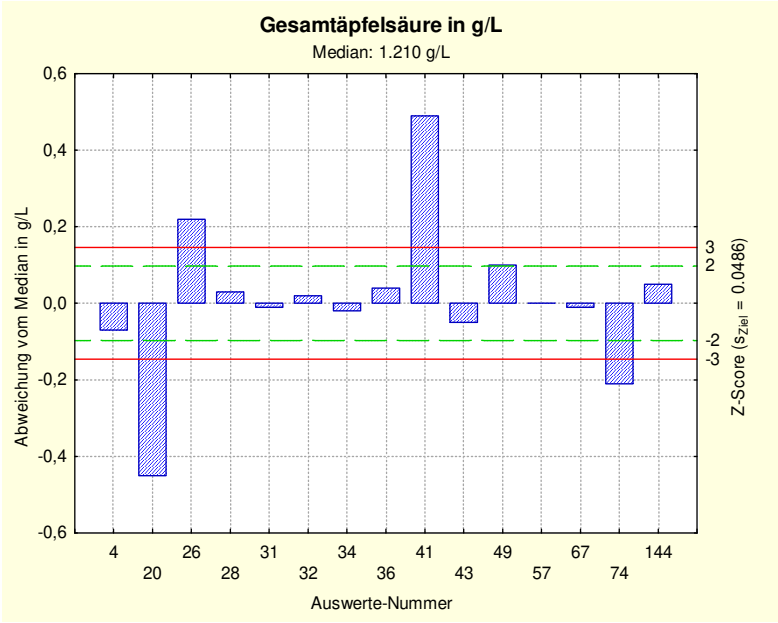
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Mit (**) gekennzeichnete herkömmliche Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

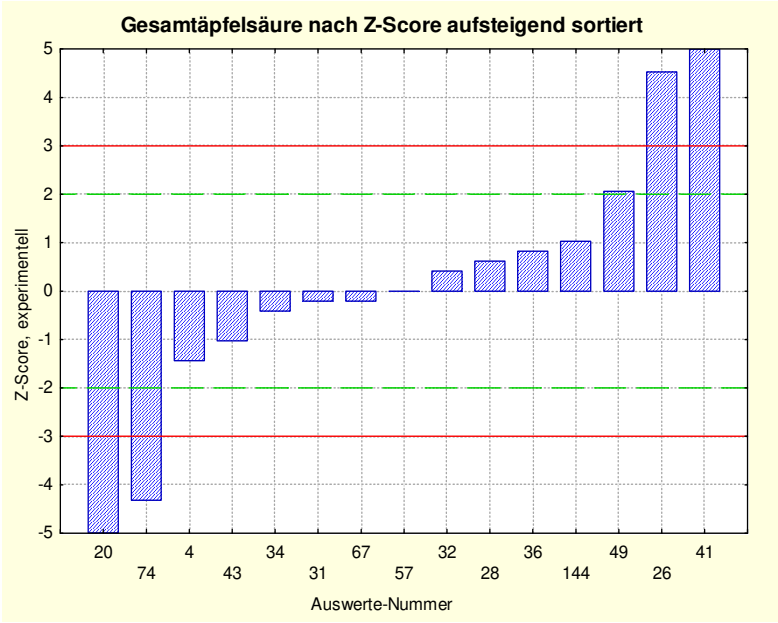
5.14.2 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigchromatographie	14	1,218	0,142
IC	Ionenchromatographie	1	1,210	
	herkömmliche Verfahren	15	1,217	0,110
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	23	1,026	0,343
NMR	1H-Kernresonanzspektroskopie	1	1,150	

5.14.3 Deskriptive Ergebnisse

HPLC- + IC-Ergebnisse für Gesamtäpfelsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten	ohne Ausreißer
Gültige Werte	15	13	11
Minimalwert	0,76	1,00	1,14
Mittelwert	1,219	1,217	1,217
Median	1,210	1,210	1,210
Maximalwert	1,70	1,43	1,31
Standardabweichung (s_L)	0,200	0,098	0,048
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,052	0,027	0,014
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,067	0,067	0,067
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,049	0,049	0,049
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,218	0,218	0,218
Horrat-Wert (s_L/s_H)	3,00	1,47	0,72
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	4,10	2,02	0,98
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,92	0,45	0,22
Quotient (u_M/s_H)	0,77	0,41	0,22
Quotient (u_M/s_{exp})	1,06	0,56	0,30
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,24	0,12	0,06





5.15 L-Äpfelsäure [g/L]

5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebnis-wert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enz.(L-), autom.	0,800	0,010	0,22	0,26	
2	enz.(L-), autom.	1,250	0,460	9,93	12,12	(*)
5	enz.(L-), autom.	0,770	-0,020	-0,43	-0,53	
8	enz.(L-), autom.	0,710	-0,080	-1,73	-2,11	
10	enz.(L-), autom.	0,760	-0,030	-0,65	-0,79	
11	enz.(L-), autom.	0,740	-0,050	-1,08	-1,32	
12	enz.(L-), autom.	0,800	0,010	0,22	0,26	
13	enz.(L-), autom.	0,760	-0,030	-0,65	-0,79	
16	enz.(L-), autom.	0,780	-0,010	-0,22	-0,26	
17	enz.(L-), autom.	0,780	-0,010	-0,22	-0,26	
18	enz.(L-), autom.	0,770	-0,020	-0,43	-0,53	
21	enz.(L-), autom.	0,800	0,010	0,22	0,26	
22	enz.(L-), autom.	0,820	0,030	0,65	0,79	
24	enz.(L-), autom.	0,810	0,020	0,43	0,53	
26	enz.(L-), autom.	0,690	-0,100	-2,16	-2,63	
29	enz.(L-), autom.	0,760	-0,030	-0,65	-0,79	
32	enz.(L-), autom.	0,860	0,070	1,51	1,84	
33	enz.(L-), autom.	0,790	0,000	0,00	0,00	
35	enz.(L-), autom.	0,710	-0,080	-1,73	-2,11	
37	enz.(L-), autom.	0,830	0,040	0,86	1,05	
41	enz.(L-), autom.	0,700	-0,090	-1,94	-2,37	
44	enz.(L-), autom.	0,860	0,070	1,51	1,84	
45	enz.(L-), autom.	0,810	0,020	0,43	0,53	
46	enz.(L-) Hand	1,210	0,420	9,07	11,06	(*)
50	enz.(L-), autom.	0,820	0,030	0,65	0,79	
53	enz.(L-), autom.	0,920	0,130	2,81	3,42	
54	enz.(L-), autom.	0,780	-0,010	-0,22	-0,26	
56	enz.(L-), autom.	0,780	-0,010	-0,22	-0,26	
58	enz.(L-), autom.	0,810	0,020	0,43	0,53	
59	enz.(L-), autom.	0,830	0,040	0,86	1,05	
60	enz.(L-), autom.	0,750	-0,040	-0,86	-1,05	
63	enz.(L-), autom.	0,800	0,010	0,22	0,26	
66	enz.(L-), autom.	0,970	0,180	3,89	4,74	
67	enz.(L-), autom.	1,040	0,250	5,40	6,58	(**)
68	enz.(L-), autom.	0,760	-0,030	-0,65	-0,79	
69	enz.(L-), autom.	0,750	-0,040	-0,86	-1,05	
71	enz.(L-), autom.	0,800	0,010	0,22	0,26	
72	enz.(L-), autom.	0,860	0,070	1,51	1,84	
75	enz.(L-) Hand	1,140	0,350	7,56	9,22	(**)

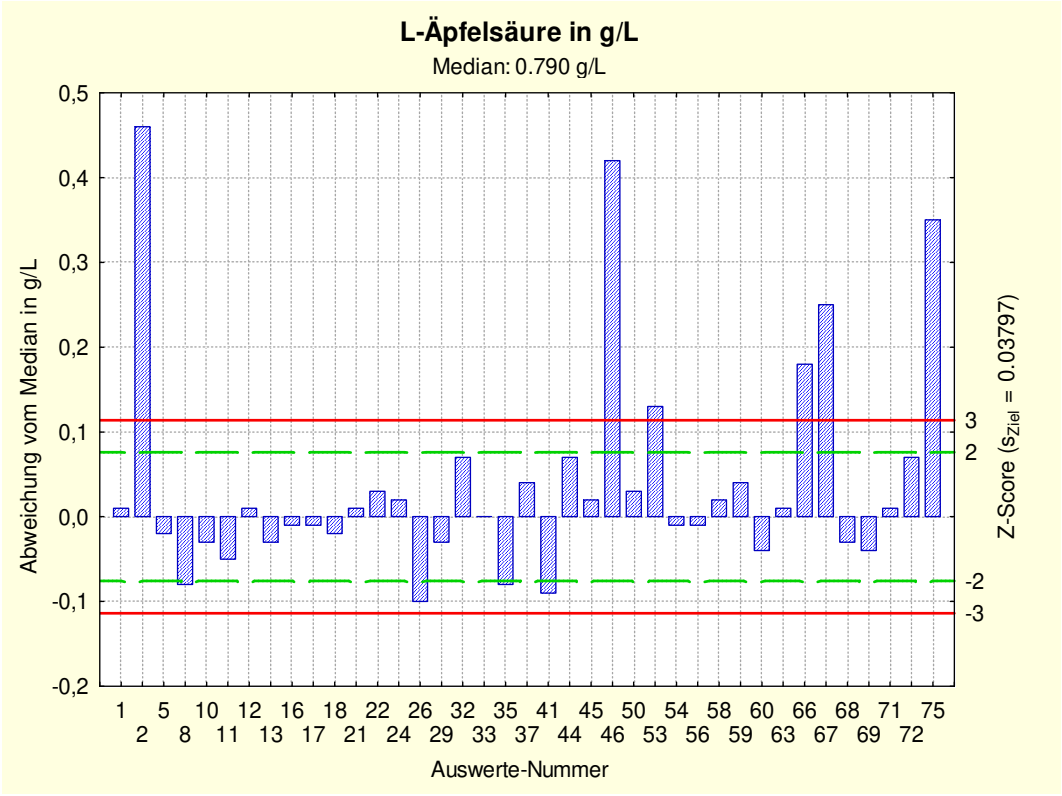
Mit (*) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.
Mit (**) gekennzeichnete Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

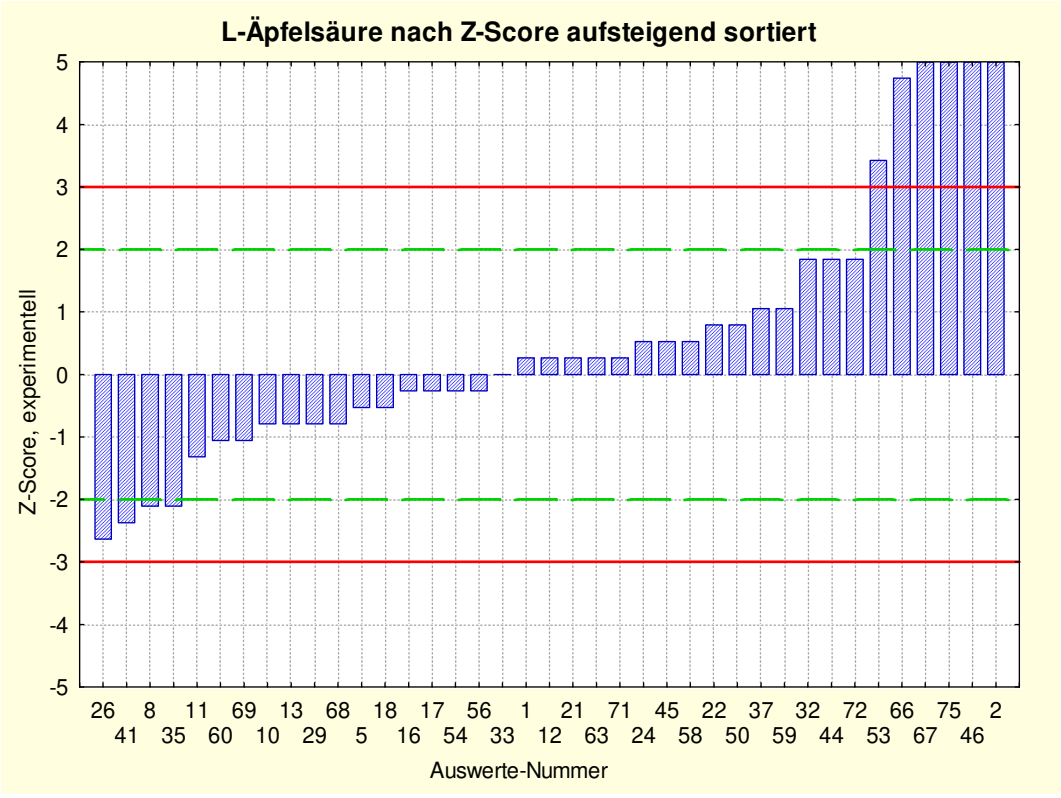
5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für L-Äpfelsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	37	35
Minimalwert	0,69	0,69
Mittelwert	0,809	0,793
Median	0,800	0,790
Maximalwert	1,14	0,97
Standardabweichung (s_L)	0,089	0,057
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,015	0,010
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,047	0,046
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,038	0,038
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,90	1,24
Quotient (s_L/s_{exp})	2,32	1,51
Quotient (u_M/s_H)	0,31	0,21
Quotient (u_M/s_{exp})	0,38	0,26

5.15.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	37	0,794	0,0559
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form n. Boehringer	2	1,175	0,0561
	alle Verfahren	39	0,802	0,0652





5.16 Gesamtmilchsäure [g/L]

5.16.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
4	HPLC	2,17	0,0300	0,28		
11	enzymat. autom.	2,08	-0,0600	-0,56		
12	enzymat. autom.	2,07	-0,0700	-0,65		
20	HPLC	2,26	0,1200	1,11		
21	enzymat. autom.	2,04	-0,1000	-0,93		
24	enzymat. autom.	2,07	-0,0700	-0,65		
26	HPLC	2,25	0,1100	1,02		
28	HPLC	2,14	0,0000	0,00		
31	HPLC	2,20	0,0600	0,56		
32	HPLC	2,15	0,0100	0,09		
34	HPLC	2,16	0,0200	0,19		
36	HPLC	2,09	-0,0500	-0,46		
41	HPLC	1,70	-0,4400	-4,08		
43	HPLC	1,87	-0,2700	-2,50		
49	HPLC	2,21	0,0740	0,69		
57	HPLC	2,11	-0,0300	-0,28		
60	enzymat. autom.	2,06	-0,0800	-0,74		
67	enzymat. autom.	2,44	0,3000	2,78		
74	HPLC	2,20	0,0600	0,56		
136	NMR	2,06	-0,0800	-0,74		
144	HPLC	1,51	-0,6300	-5,84		(**)
167	NMR	1,94	-0,1963	-1,82		
201	FTIR	1,90	-0,2250	-2,10	-1,08	
203	FTIR	2,22	0,0950	0,89	0,45	
210	FTIR	1,88	-0,2450	-2,28	-1,17	
211	FTIR	1,80	-0,3250	-3,03	-1,56	
214	FTIR	1,83	-0,2950	-2,75	-1,41	
216	FTIR	2,10	-0,0250	-0,23	-0,12	
217	FTIR	1,70	-0,4250	-3,96	-2,03	
219	FTIR	2,10	-0,0250	-0,23	-0,12	
229	FTIR	2,11	-0,0150	-0,14	-0,07	
232	FTIR	1,90	-0,2250	-2,10	-1,08	
241	FTIR	2,10	-0,0250	-0,23	-0,12	
242	FTIR	1,80	-0,3250	-3,03	-1,56	
244	FTIR	1,69	-0,4350	-4,05	-2,08	
246	FTIR	2,00	-0,1250	-1,16	-0,60	
247	FTIR	1,30	-0,8250	-7,69	-3,95	
250	FTIR	1,86	-0,2650	-2,47	-1,27	
251	FTIR	2,50	0,3750	3,49	1,79	
253	FTIR	1,70	-0,4250	-3,96	-2,03	
254	FTIR	1,33	-0,7950	-7,41	-3,80	
260	FTIR	2,08	-0,0450	-0,42	-0,22	
270	FTIR	1,80	-0,3250	-3,03	-1,56	
272	FTIR	1,70	-0,4250	-3,96	-2,03	
273	FTIR	1,84	-0,2850	-2,66	-1,36	
274	FTIR	2,58	0,4550	4,24	2,18	

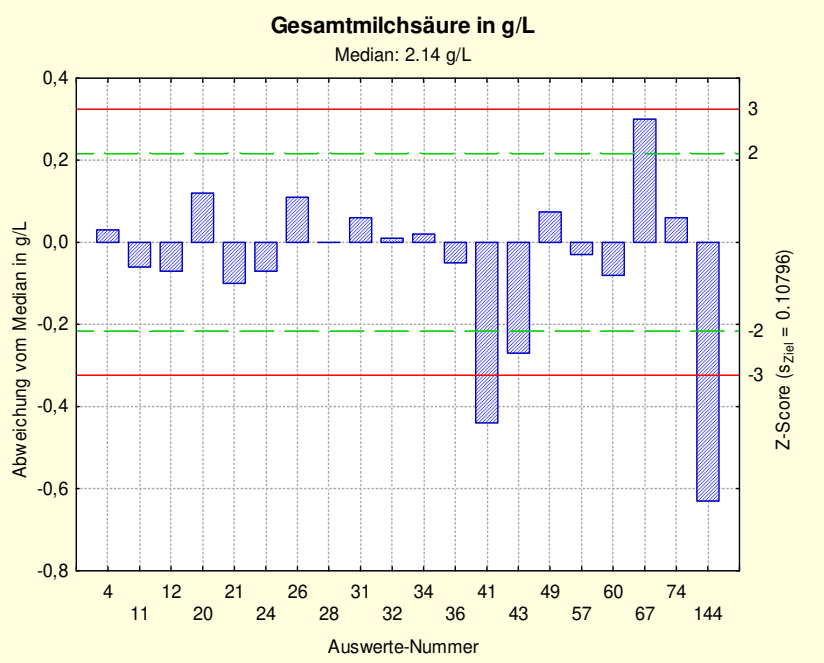
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurdebei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

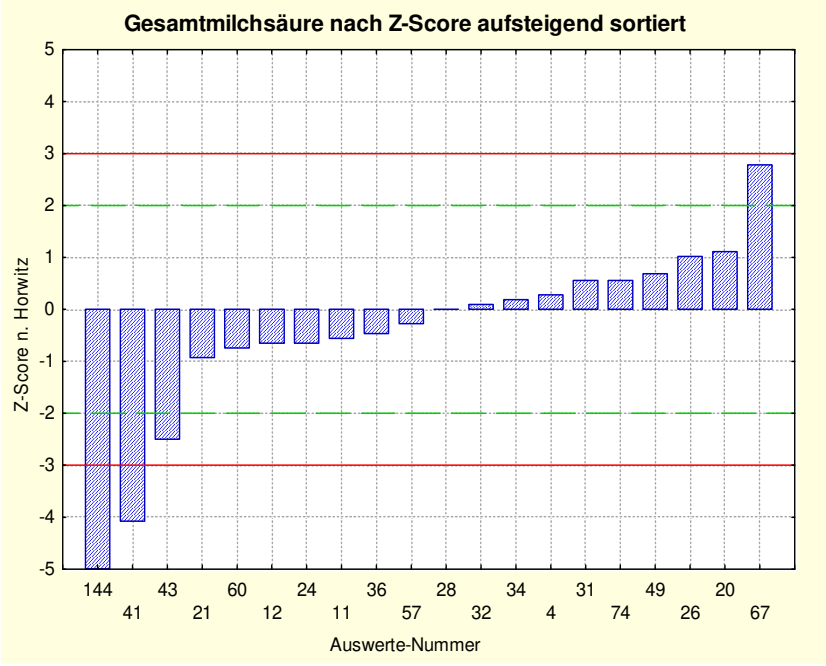
5.16.2 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	14	2,121	0,138
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	2,072	0,025
	herkömmliche Verfahren	20	2,119	0,119
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	24	1,905	0,240
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	2,060	

5.16.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamtmilchsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	20	19
Minimalwert	1,510	1,700
Mittelwert	2,0892	2,1197
Median	2,1250	2,1400
Maximalwert	2,440	2,440
Standardabweichung (s_L)	0,202	0,153
Standardfehler des Mittelwertes	0,045	0,035
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,107	0,108
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,209	0,209
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,88	1,42
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,97	0,73
Quotient (u_M/s_H)	0,42	0,33
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,22	0,17





5.17 L-Milchsäure [g/L]

5.17.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	enz.(L-) autom.	1,50	-0,2000	-2,25	-2,14	
2	enz.(L-) autom.	1,80	0,1000	1,13	1,07	
5	enz.(L-) autom.	1,87	0,1700	1,91	1,82	
8	enz.(L-) autom.	1,58	-0,1200	-1,35	-1,28	
10	enz.(L-) autom.	1,77	0,0700	0,79	0,75	
11	enz.(L-) autom.	1,78	0,0800	0,90	0,86	
12	enz.(L-) autom.	1,67	-0,0300	-0,34	-0,32	
13	enz.(L-) autom.	1,54	-0,1600	-1,80	-1,71	
16	enz.(L-) autom.	1,66	-0,0400	-0,45	-0,43	
17	enz.(L-) autom.	1,51	-0,1900	-2,14	-2,03	
21	enz.(L-) autom.	1,64	-0,0600	-0,68	-0,64	
24	enz.(L-) autom.	1,70	0,0000	0,00	0,00	
29	enz.(L-) autom.	1,93	0,2300	2,59	2,46	
32	enz.(L-) autom.	1,56	-0,1400	-1,58	-1,50	
33	enz.(L-) autom.	1,66	-0,0400	-0,45	-0,43	
35	enz.(L-) autom.	1,79	0,0900	1,01	0,96	
37	enz.(L-) autom.	1,58	-0,1200	-1,35	-1,28	
41	enz.(L-) autom.	1,70	0,0000	0,00	0,00	
44	enz.(L-) autom.	1,35	-0,3500	-3,94	-3,75	
45	enz.(L-) autom.	1,74	0,0400	0,45	0,43	
46	enz.(L-) Hand	1,76	0,0600	0,68	0,64	
50	enz.(L-) autom.	1,73	0,0300	0,34	0,32	
53	enz.(L-) autom.	1,10	-0,6000	-6,76	-6,42	(**)
54	enz.(L-) autom.	1,69	-0,0100	-0,11	-0,11	
56	enz.(L-) autom.	1,67	-0,0300	-0,34	-0,32	
58	enz.(L-) autom.	1,62	-0,0800	-0,90	-0,86	
59	enz.(L-) autom.	1,74	0,0400	0,45	0,43	
60	enz.(L-) autom.	1,68	-0,0200	-0,23	-0,21	
63	enz.(L-) autom.	1,80	0,1000	1,13	1,07	
66	enz.(L-) autom.	1,62	-0,0800	-0,90	-0,86	
67	enz.(L-) autom.	1,81	0,1100	1,24	1,18	
68	enz.(L-) autom.	1,63	-0,0700	-0,79	-0,75	
69	enz.(L-) autom.	1,85	0,1500	1,69	1,61	
71	enz.(L-) autom.	1,70	0,0000	0,00	0,00	
72	enz.(L-) autom.	2,04	0,3400	3,83	3,64	
75	enz.(L-) Hand	1,73	0,0300	0,34	0,32	

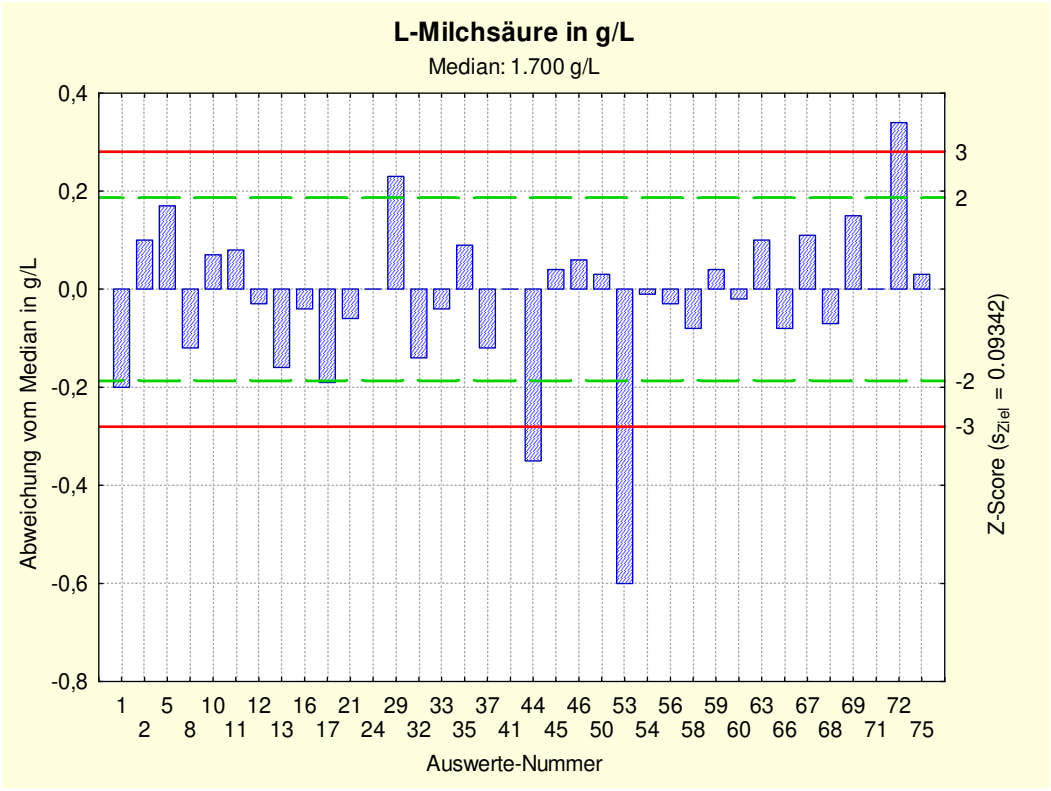
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

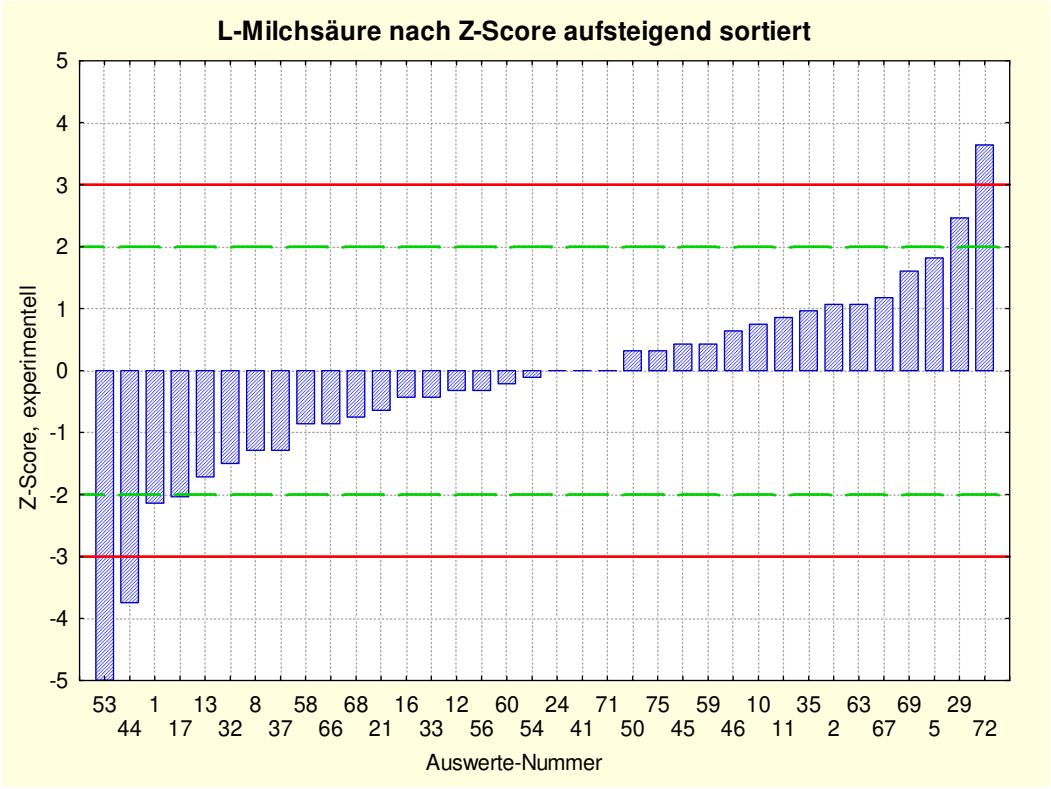
5.17.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für L-Milchsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	36	35
Minimalwert	1,100	1,350
Mittelwert	1,6806	1,6971
Median	1,6950	1,7000
Maximalwert	2,040	2,040
Standardabweichung (s_L)	0,163	0,131
Standardfehler des Mittelwertes	0,027	0,022
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,089	0,089
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,093	0,093
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,84	1,47
Quotient (s_L/s_{exp})	1,75	1,40
Quotient (u_M/s_H)	0,31	0,25
Quotient (u_M/s_{exp})	0,29	0,24

5.17.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	34	1,686	0,129
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	2	1,745	0,024
	alle Verfahren	36	1,690	0,124





5.18 Citronensäure [mg/L]

5.18.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus HPLC- und enzymatischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
4	HPLC	422	-41,00	-1,39	-1,77	
11	enzymat. autom.	449	-14,00	-0,48	-0,60	
12	enzymat. autom.	475	12,00	0,41	0,52	
20	HPLC	1	-462,18	-15,72	-19,91	(*)
26	HPLC	592	129,00	4,39	5,56	(**)
28	HPLC	466	3,00	0,10	0,13	
31	HPLC	400	-63,00	-2,14	-2,71	
32	HPLC	494	31,00	1,05	1,34	
34	HPLC	428	-35,00	-1,19	-1,51	
35	enzymat. autom.	480	17,00	0,58	0,73	
36	HPLC	450	-13,00	-0,44	-0,56	
41	HPLC	489	26,00	0,88	1,12	
43	HPLC	536	73,00	2,48	3,14	
56	enzymat. autom.	444	-19,00	-0,65	-0,82	
57	HPLC	460	-3,00	-0,10	-0,13	
67	enzymat. autom.	474	11,00	0,37	0,47	
136	NMR	475	12,00	0,41	0,52	
167	NMR	481	18,09	0,61	0,78	
232	FTIR	700	237,00	8,06	10,21	(***)
241	FTIR	250	-213,00	-7,24	-9,18	(***)
273	FTIR	26	-437,00	-14,86	-18,82	(***)

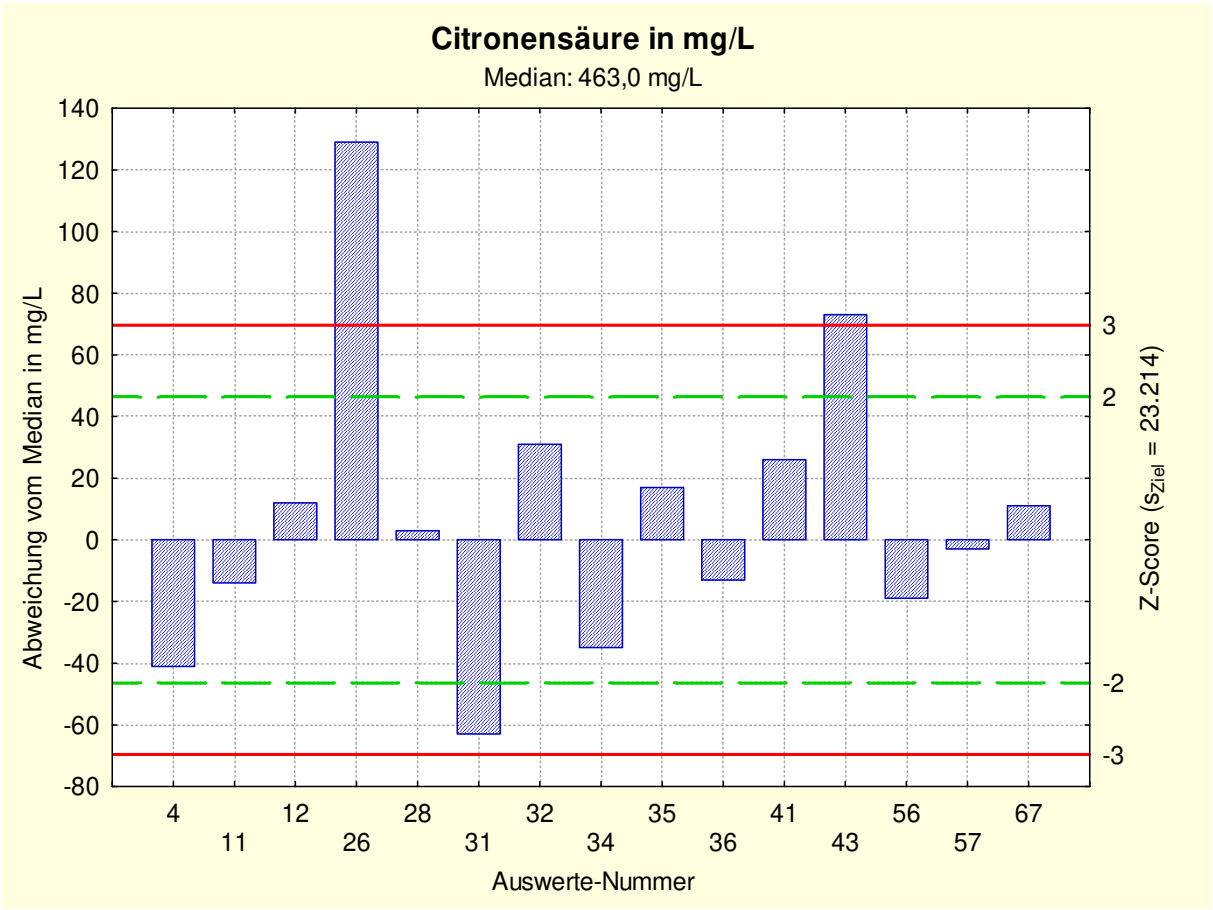
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 232 wurden mit der Zielstandardabweichung s_{exp} berechnet.
Die mit (*) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 50 % vom Bezugswert ab und bleiben unberücksichtigt.
Der mit (**) gekennzeichnete herkömmliche Wert bleibt bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.
Der mit (***) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

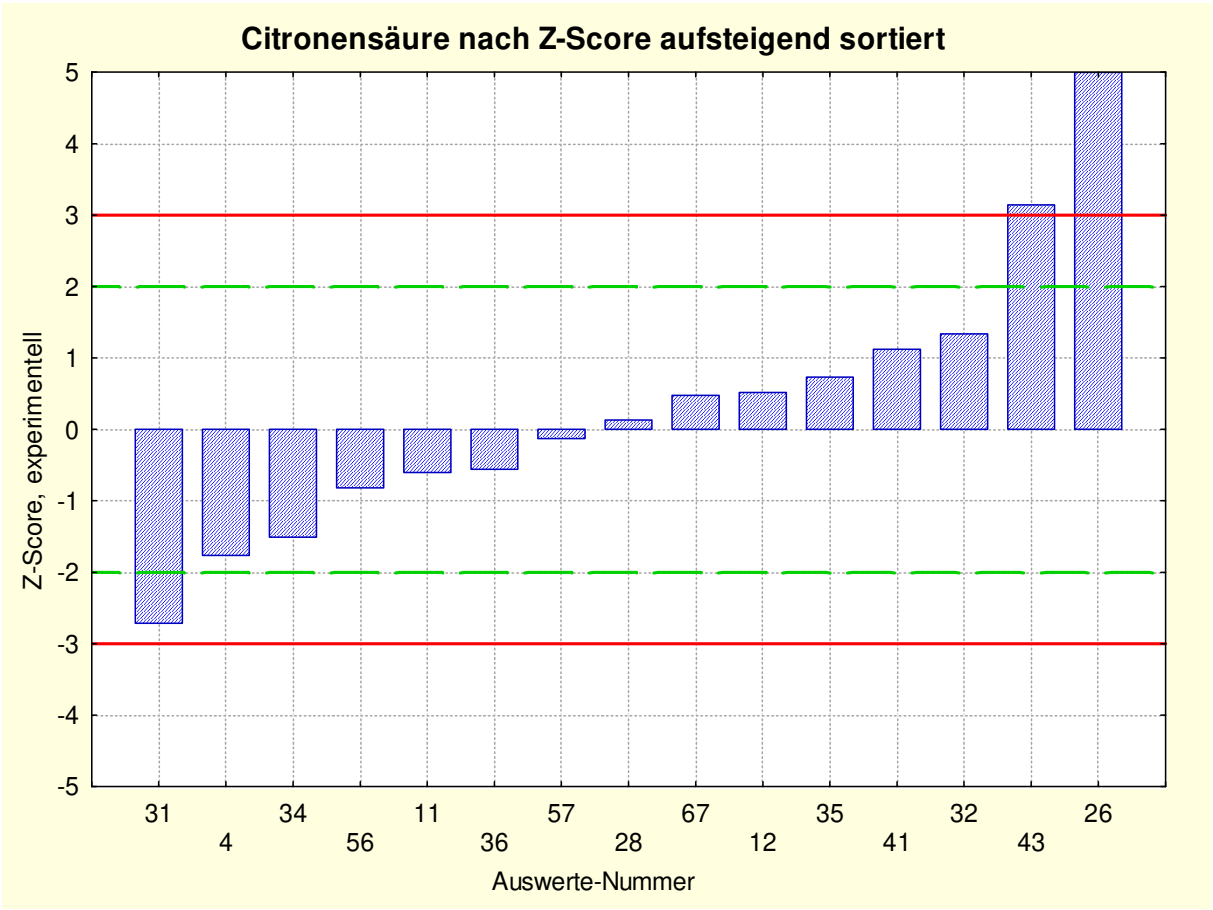
5.18.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Citronensäure [mg/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	15	14
Minimalwert	400,0	400,0
Mittelwert	470,60	461,93
Median	466,00	463,00
Maximalwert	592,0	536,0
Standardabweichung (s_L)	46,99	34,11
Standardfehler des Mittelwertes	12,13	9,12
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	29,57	29,41
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	23,21	23,21
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,59	1,16
Quotient (s_L/s_{exp})	2,02	1,47
Quotient (u_M/s_H)	0,41	0,31
Quotient (u_M/s_{exp})	0,52	0,39

5.18.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	460,51	65,12
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	5	466,29	16,09
	HPLC- und enzymatische Verfahren	16	461,41	43,47
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	3	325,33	389,25
NMR*)	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	475,00	


Citronensäure in mg/L
Median: 463,0 mg/L
Abweichung vom Median in mg/L
Z-Score (s_{Ziel} = 23.214)
Auswerte-Nummer
140
120
100
80
60
40
20
0
-20
-40
-60
-80
3
2
-2
-3
4
11
12
26
28
31
32
34
35
36
41
43
56
57
67


Citronensäure nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
31
4
34
56
11
36
57
28
67
12
35
41
32
43
26

5.19 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

5.19.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus HPLC- und automatisierten enzymatischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	enzymat. autom.	0,500	-0,150	-3,82	
2	enzymat. autom.	0,570	-0,080	-2,04	
4	HPLC	0,760	0,110	2,80	
5	enzymat. autom.	0,540	-0,110	-2,80	
8	enzymat. autom.	0,610	-0,040	-1,02	
12	enzymat. autom.	0,640	-0,010	-0,25	
16	enzymat. autom.	0,690	0,040	1,02	
17	enzymat. autom.	0,750	0,100	2,55	
20	HPLC	0,700	0,050	1,27	
21	enzymat. autom.	0,710	0,060	1,53	
24	enzymat. autom.	0,562	-0,088	-2,24	
26	enzymat. autom.	0,680	0,030	0,76	
29	enzymat. autom.	0,670	0,020	0,51	
31	HPLC	0,500	-0,150	-3,82	
32	enzymat. autom.	0,630	-0,020	-0,51	
33	enzymat. autom.	0,730	0,080	2,04	
34	HPLC	0,570	-0,080	-2,04	
35	enzymat. autom.	0,640	-0,010	-0,25	
36	HPLC	0,580	-0,070	-1,78	
41	enzymat. autom.	0,680	0,030	0,76	
44	enzymat. autom.	0,698	0,048	1,22	
46	RidaCube	0,920	0,270	6,88	(**)
50	enzymat. autom.	0,740	0,090	2,29	
53	enzymat. autom.	0,620	-0,030	-0,76	
54	enzymat. autom.	0,638	-0,012	-0,31	
56	enzymat. autom.	0,630	-0,020	-0,51	
58	enzymat. autom.	0,710	0,060	1,53	
59	enzymat. autom.	0,650	0,000	0,00	
60	enzymat. autom.	0,679	0,029	0,74	
66	enzymat. autom.	0,650	0,000	0,00	
67	enzymat. autom.	0,660	0,010	0,25	
69	enzymat. autom.	0,530	-0,120	-3,06	
71	enzymat. autom.	0,670	0,020	0,51	
74	HPLC	0,500	-0,150	-3,82	
121	enz. autom. neutr.	0,622	-0,028	-0,71	
135	enz. autom. neutr.	0,535	-0,115	-2,93	
136	NMR	0,580	-0,070	-1,78	
167	NMR	0,627	-0,023	-0,59	
214	FTIR	0,675	0,025	0,64	
241	FTIR	0,750	0,100	2,55	
244	FTIR	0,780	0,130	3,31	
273	FTIR	0,820	0,170	4,33	

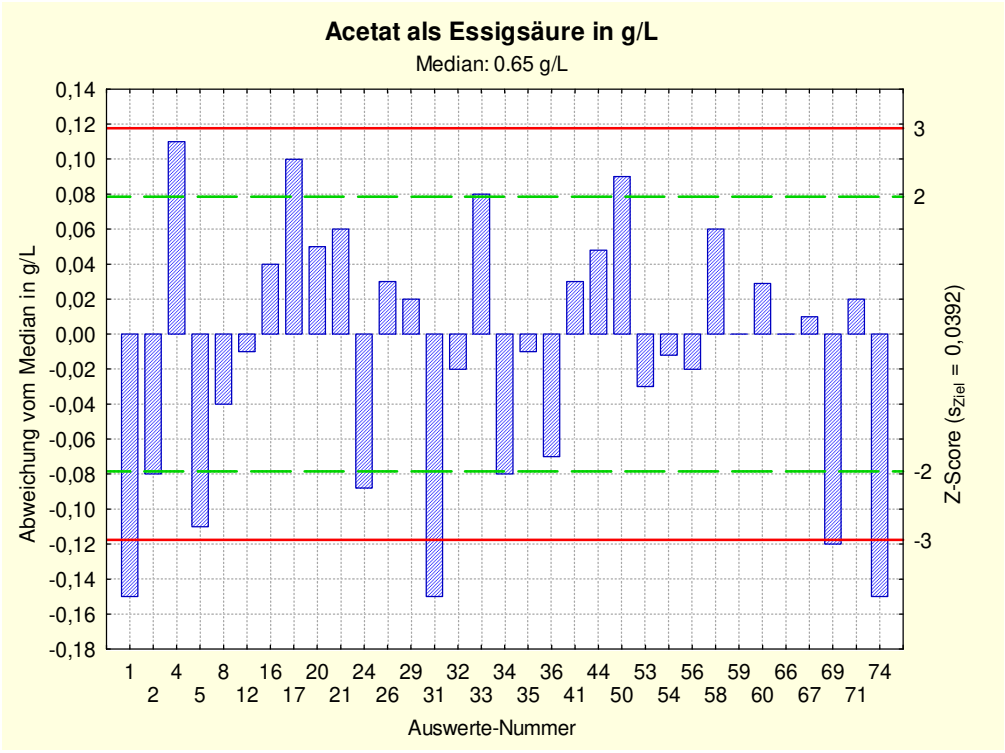
Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 214 wurden mit der Zielstandardabweichung s_H berechnet.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Diese Ergebnisse waren für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
Rot markierte Verfahrensangabe: dieser Wert wurde bei den statistischen Berechnungen nicht berücksichtigt.
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

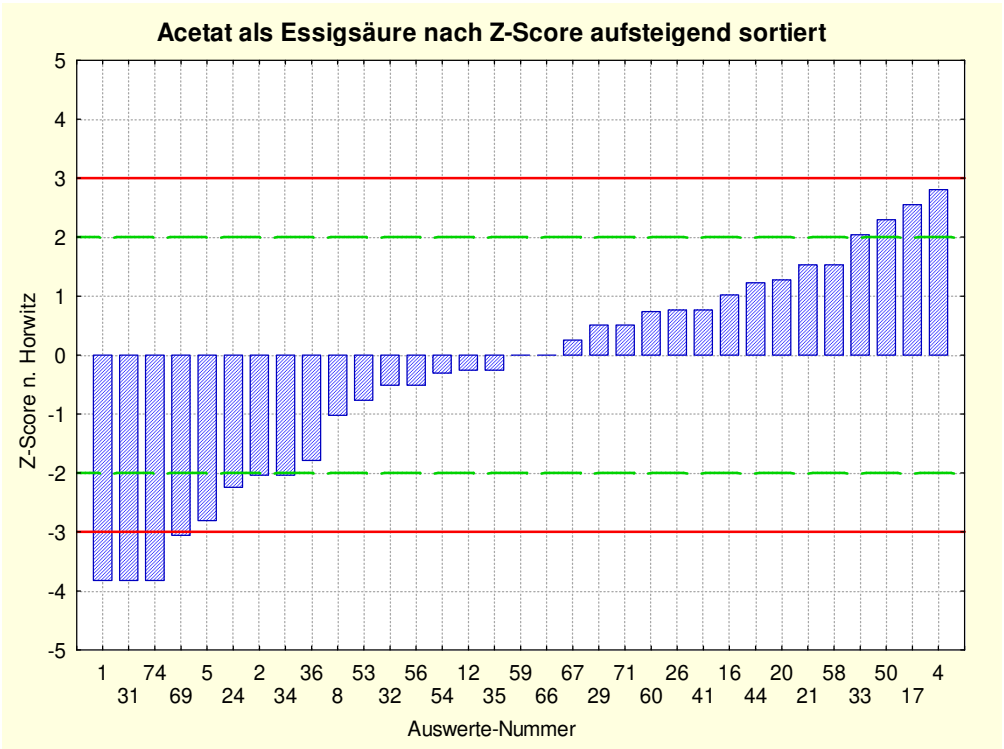
5.19.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Acetat [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	33
Minimalwert	0,500
Mittelwert	0,639
Median	0,650
Maximalwert	0,760
Standardabweichung (s_L)	0,073
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,013
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,039
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,87
Quotient (u_M/s_H)	0,33

5.19.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigchromatographie	6	0,5986	0,115
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	27	0,6509	0,064
	HPLC- und enzymatische Verfahren	33	0,6413	0,0785
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	4	0,7593	0,063
NMR	^{1}H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,5800	
RidaCube	R Biopharm Rida Cube enzymatischer Testkit	1	0,9200	





5.20 Flüchtige Säure [g/L]

5.20.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus Destillationsverfahren mit SO2-Korrektur

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
4	Gerhardt SO2 ausg.	0,780	-0,0400	-0,84		
7	Gerhardt SO2 korr.	0,850	0,0300	0,63		
9	Gerhardt SO2 korr.	0,698	-0,1220	-2,55		
10	Büchi SO2 korr.	0,842	0,0220	0,46		
11	OIV SO2-korr.	0,874	0,0540	1,13		
12	Gerhardt SO2 korr.	0,849	0,0290	0,61		
16	Halbmikro SO2 korr.	0,740	-0,0800	-1,67		
17	Gerhardt SO2 korr.	7,288	6,4680	135,33		(*)
24	Gerhardt SO2 korr.	0,840	0,0200	0,42		
28	Halbmikro SO2 korr.	0,826	0,0060	0,13		
29	Gerhardt SO2 korr.	0,740	-0,0800	-1,67		
35	Gerhardt SO2 korr.	0,821	0,0010	0,02		
37	Gerhardt SO2 ausg.	0,842	0,0220	0,46		
38	Wädensw. SO2 ausg.	0,820	0,0000	0,00		
43	Halbmikro SO2 korr.	0,680	-0,1400	-2,93		
44	Gerhardt SO2 korr.	0,781	-0,0390	-0,82		
45	Gerhardt SO2 korr.	0,829	0,0090	0,19		
49	Halbmikro SO2 unber.	0,936	0,1160	2,43		
56	OIV ohne SO2-korr.	0,840	0,0200	0,42		
57	Gerhardt SO2 korr.	0,830	0,0100	0,21		
59	Gerhardt SO2 korr.	0,850	0,0300	0,63		
60	Renschler mod. ausg.	0,785	-0,0350	-0,73		
61	Halbmikro SO2 korr.	0,777	-0,0430	-0,90		
65	Halbmikro SO2 korr.	1,370	0,5500	11,51		(*)
67	Gerhardt SO2 korr.	0,778	-0,0420	-0,88		
68	Gerhardt SO2 ausg.	0,765	-0,0550	-1,15		
70	Gerhardt SO2 korr.	0,800	-0,0200	-0,42		
201	FTIR	0,680	-0,1400	-2,93	-1,57	
203	FTIR	0,650	-0,1700	-3,56	-1,91	
210	FTIR	0,700	-0,1200	-2,51	-1,35	
211	FTIR	0,700	-0,1200	-2,51	-1,35	
216	FTIR	0,800	-0,0200	-0,42	-0,22	
217	FTIR	0,940	0,1200	2,51	1,35	
219	FTIR	0,910	0,0900	1,88	1,01	
229	FTIR	0,699	-0,1210	-2,53	-1,36	
242	FTIR	0,730	-0,0900	-1,88	-1,01	
246	FTIR	0,750	-0,0700	-1,46	-0,79	
247	FTIR	0,830	0,0100	0,21	0,11	
250	FTIR	0,770	-0,0500	-1,05	-0,56	
253	FTIR	0,640	-0,1800	-3,77	-2,02	
254	FTIR	0,590	-0,2300	-4,81	-2,58	
260	FTIR	0,750	-0,0700	-1,46	-0,79	
270	FTIR	0,680	-0,1400	-2,93	-1,57	
272	FTIR	0,690	-0,1300	-2,72	-1,46	
274	FTIR	0,730	-0,0900	-1,88	-1,01	

Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 201 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Ü\ FTIR}$ berechnet.
Mit (*) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 50 % vom Bezugswert ab und bleiben unberücksichtigt.

5.20.2 Zusätzliche Angaben zur Untersuchung bei Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Wiederfindung %	Destillatblindwert (als Essigsäure) g/L	SO2-Korrekturbetrag (als Essigsäure) g/L
4	Gerhardt SO2 ausg.	99	0,200	
7	Gerhardt SO2 korr.	106	0,080	0,013
9	Gerhardt SO2 korr.			
10	Büchi SO2 korr.	98	0,032	0,118
11	OIV SO2-korr.			
12	Gerhardt SO2 korr.	99		0,123
16	Halbmikro SO2 korr.			
17	Gerhardt SO2 korr.	96	0,050	0,116
24	Gerhardt SO2 korr.	95	0,080	0,207
28	Halbmikro SO2 korr.			0,086
29	Gerhardt SO2 korr.			
35	Gerhardt SO2 korr.	96	0,041	0,069
37	Gerhardt SO2 ausg.	96	0,040	
38	Wädensw. SO2 ausg.			
43	Halbmikro SO2 korr.		0,030	0,115
44	Gerhardt SO2 korr.	98		0
45	Gerhardt SO2 korr.	95		0,130
49	Halbmikro SO2 unber.			
56	OIV ohne SO2-korr.	97		0,129
57	Gerhardt SO2 korr.	>95	0,120	0,122
59	Gerhardt SO2 korr.	95	0,170	0,169
60	Renschler mod. ausg.	100	0,018	
61	Halbmikro SO2 korr.		0,060	0,145
65	Halbmikro SO2 korr.			
67	Gerhardt SO2 korr.	100	0,096	0,125
68	Gerhardt SO2 ausg.	94	0,045	
70	Gerhardt SO2 korr.			

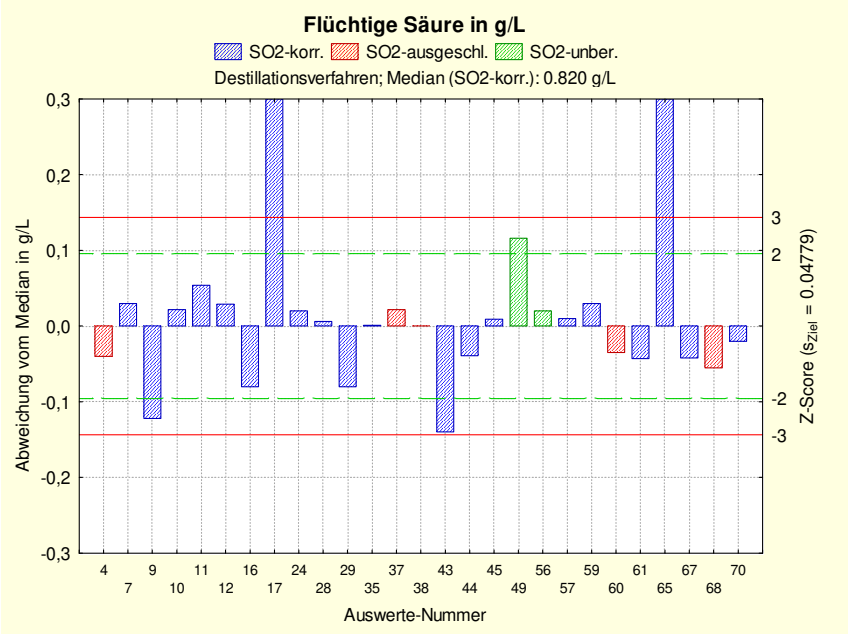
SO_2-Korrekturbetrag und Destillationsblindwert in g/L sollten als Essigsäure berechnet werden.
Bei den blau markierten Destillationsblindwerten erscheint dies nach dem Augenschein zweifelhaft.
Rot markierte Angaben sind widersprüchlich.

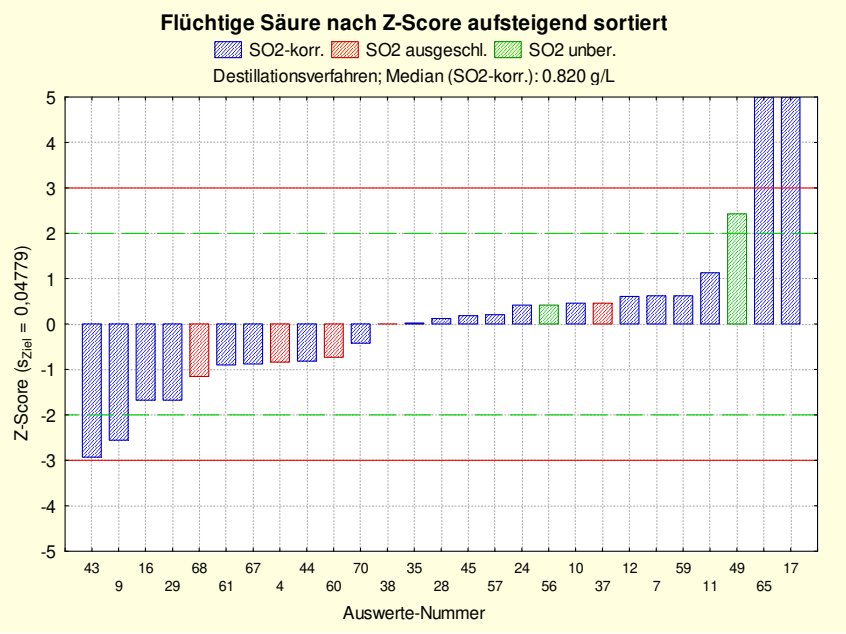
5.20.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] SO_2-Einfluss korrigiert	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	0,680
Mittelwert	0,7999
Median	0,8200
Maximalwert	0,874
Standardabweichung (s_L)	0,051
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,011
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	0,048
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,089
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,06
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,76
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,74
Quotient (u_M/s_H)	0,22
Quotient (u_M/s_{exp})	0,38
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,12

5.20.4 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
SO_2 korr.	Verfahren mit SO_2-Korrektur oder SO_2-Ausschluss			
- Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV, SO_2-Ausschluss	5	0,8281	0,1932
- Wädenswill	Verfahren n. Rentschler(Wädenswil), SO_2-Ausschluss	1	0,8200	
- Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt, SO_2-Ausschluss	3	0,7911	0,0375
	SO_2 korrigiert	13	0,8158	0,0511
- OIV	OIV-MA-AS-313-02, SO2 korrigiert	1	0,8740	
- Rentschler	Verfahren n. Rentschler, modifiziert, SO_2-Ausschluss	1	0,7850	
- Büchi	Destillationsapparat Büchi, SO_2-Einfluss korrigiert	1	0,8420	
	herkömmliche Verfahren, SO_2-korrigiert/ausgeschl.	25	0,8105	0,0549
SO_2 unber.	Verfahren ohne Berücksichtigung des SO_2-Einflusses			
- Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV	1	0,9360	
- OIV	OIV-MA-AS-313-02	1	0,8400	
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	18	0,7268	0,0769





5.21 Sorbinsäure [mg/L]

5.21.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	HPLC (OIV)	290	-1,0	-0,05	-0,12	
12	HPLC (OIV)	276	-15,5	-0,78	-1,86	
31	HPLC (OIV)	293	2,0	0,10	0,24	
32	HPLC divers	311	20,0	1,01	2,41	
36	HPLC divers	274	-17,0	-0,86	-2,04	
43	HPLC (OIV)	297	6,0	0,30	0,72	
44	HPLC (OIV)	282	-9,0	-0,45	-1,08	
57	HPLC (OIV)	291	0,0	0,00	0,00	
60	phot.	316	25,0	1,26	3,01	
67	HPLC divers	283	-8,0	-0,40	-0,96	
70	UV-Phot.(OIV)	301	10,0	0,50	1,20	
74	k. A.	263	-28,2	-1,42	-3,39	
136	NMR	256	-35,0	-1,77	-4,21	
167	NMR	272	-18,5	-0,94	-2,23	
260	FTIR	177	-114,0	-5,75	-13,71	(**)
274	FTIR	354	63,0	3,18	7,58	(**)

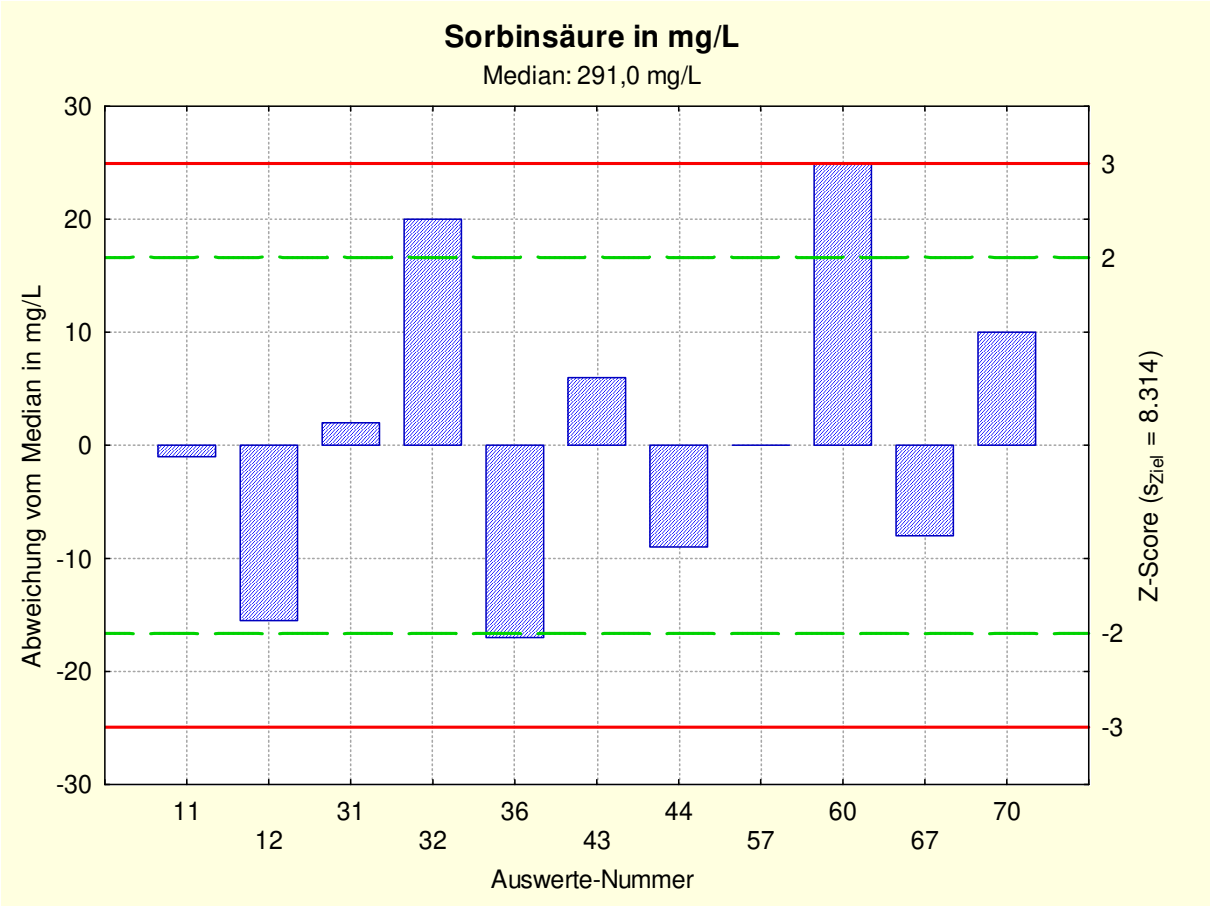
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

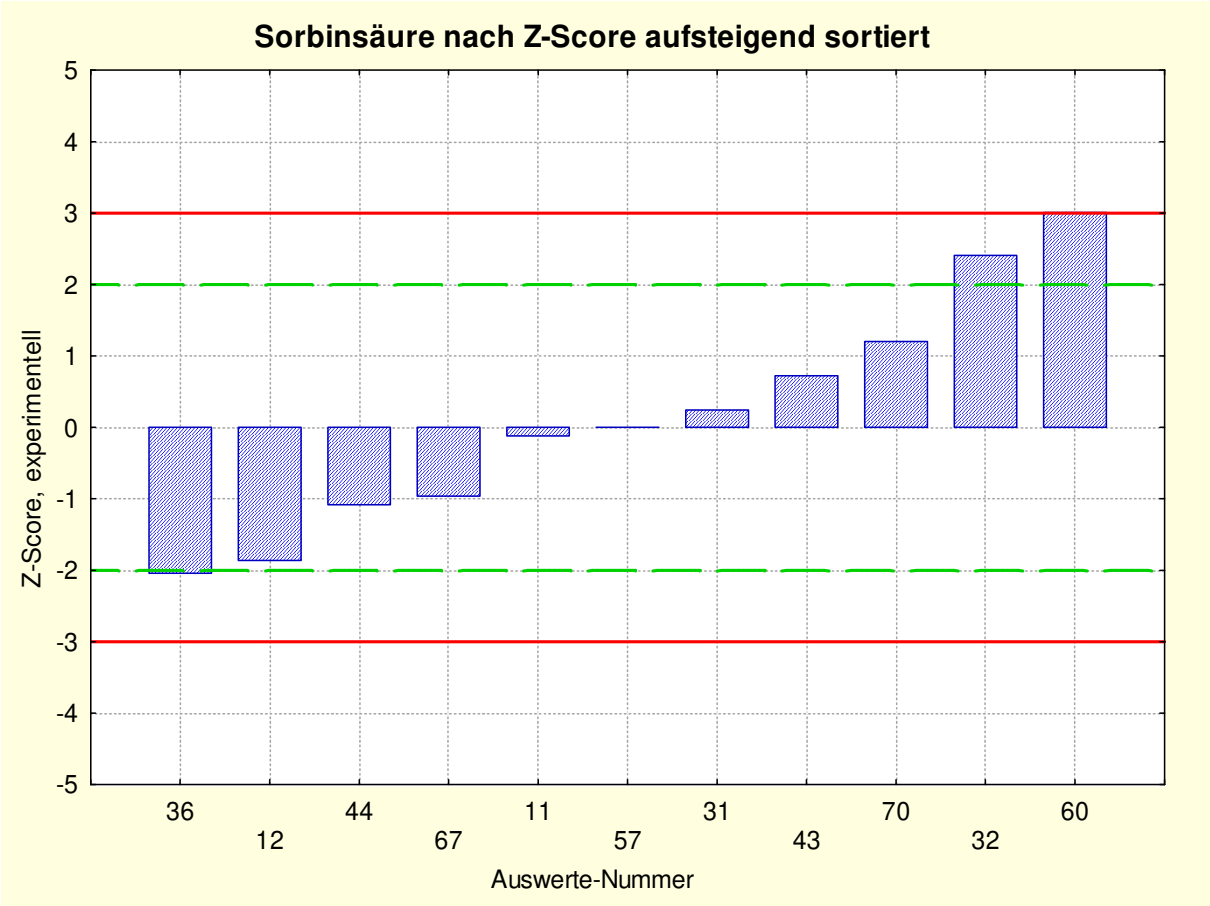
5.21.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Sorbinsäure [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	11
Minimalwert	274
Mittelwert	292,1
Median	291,0
Maximalwert	316
Standardabweichung (s_L)	13,5
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	4,1
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	19,8
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	8,3
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,68
Quotient (s_L/s_{exp})	1,63
Quotient (u_M/s_H)	0,21
Quotient (u_M/s_{exp})	0,49

5.21.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
UV-Phot.(OIV)	UV-Spektrometrie nach Wasserdampfdestillation; OIV-MA-AS313-14A	1	301,0	
HPLC (OIV)	isokratische HPLC an RP-Säule mit UV-Detektion; OIV-MA-AS313-20	6	288,2	8,63
HPLC divers	Hochleistungflüssigkeitschromatographie; verschiedene sonstige Ausführungsformen	3	286,7	16,85
phot.	photometrisch automatisiert; Dichromat / Thiobarbitursäure	1	316,0	
	herkömmliche Verfahren	11	292,0	15,04
NMR	1H-Kernresonanzspektroskopie	1	256,0	
k. A.	keine Verfahrensangabe	1	262,8	
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	2	265,5	141,93


Sorbinsäure in mg/L
Median: 291,0 mg/L
Abweichung vom Median in mg/L
Z-Score (s_{Ziel} = 8.314)
30
20
10
0
-10
-20
-30
3
2
-2
-3
11
12
31
32
36
43
44
57
60
67
70
Auswerte-Nummer


Sorbinsäure nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
36
12
44
67
11
57
31
43
70
32
60
Auswerte-Nummer

5.22 Reduktone [mg/L]

5.22.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebnis-wert	Abwei-chung	Z-Score Horwitz	Reaktions-zeit [min]	Hinweis
1	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76	20	
3	Glyoxal/Stärke	12,0	0,00	0,00	20	
4	Glyoxal/potentiometr.	12,0	0,00	0,00	20	
5	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	15	
6	Propionaldehyd/Stärke	14,0	2,00	1,51	20	
7	Glyoxal/potentiometr.	12,0	0,00	0,00	15	
8	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-7,00	-5,30	10	(*)
9	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-1,00	-0,76	10	
13	Glyoxal/potentiometr.	14,0	2,00	1,51	20	
14	Glyoxal/potentiometr.	36,0	24,00	18,17	5	(*)
15	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76		
16	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-3,00	-2,27	20	
17	Glyoxal/Stärke	7,0	-5,00	-3,79	20	
18	Glyoxal/potentiometr.	6,0	-6,00	-4,54	20	
19	Glyoxal/Stärke	13,0	1,00	0,76	20	
20	Glyoxal/potentiometr.	10,7	-1,30	-0,98	5	
22	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76	5	
23	Propionaldehyd/Stärke	12,0	0,00	0,00	15	
24	Glyoxal/potentiometr.	21,9	9,90	7,49	10	(*)
25	Propionaldehyd/Stärke	24,0	12,00	9,08	20	(*)
26	Glyoxal/potentiometr.	13,0	1,00	0,76	20	
27	Acetaldehyd/Stärke	12,0	0,00	0,00	20	
28	Propionaldehyd/Stärke	19,0	7,00	5,30	20	(**)
29	Glyoxal/Stärke	12,0	0,00	0,00	20	
30	Glyoxal/Stärke	24,0	12,00	9,08	5	(*)
31	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-2,00	-1,51	10	
32	Acetaldehyd/potent.	11,5	-0,50	-0,38	20	
33	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27		
34	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	5	
35	Glyoxal/Stärke	18,0	6,00	4,54	20	
36	Glyoxal/Stärke	14,0	2,00	1,51	20	
37	Glyoxal/potentiometr.	6,7	-5,30	-4,01	20	
38	Glyoxal/Stärke	15,6	3,60	2,73		
39	Glyoxal/Stärke	21,0	9,00	6,81	5	(*)
40	Glyoxal/potentiometr.	36,1	24,10	18,25	20	(*)
41	Glyoxal/potentiometr.	15,0	3,00	2,27	20	
42	Glyoxal/Stärke	17,0	5,00	3,79	20	
43	Glyoxal/potentiometr.	16,0	4,00	3,03	20	
44	Glyoxal/potentiometr.	8,2	-3,80	-2,88	25	
45	Glyoxal/potentiometr.	16,0	4,00	3,03	20	
46	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,00	-0,76	20	
47	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-3,00	-2,27	20	
48	Glyoxal/Stärke	22,3	10,30	7,80	25	(*)
49	Glyoxal/potentiometr.	14,4	2,40	1,82	15	
50	Glyoxal/Stärke	13,0	1,00	0,76	20	
51	Acetaldehyd/Stärke	12,0	0,00	0,00	10	
52	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-1,00	-0,76		
53	Glyoxal/Stärke	13,0	1,00	0,76		
54	Glyoxal/potentiometr.	6,0	-6,00	-4,54	20	
55	Propionaldehyd/Stärke	15,0	3,00	2,27	20	
56	Propionaldehyd/Stärke	20,0	8,00	6,06	20	(**)
57	Glyoxal/potentiometr.	10,2	-1,80	-1,36	15	
58	Glyoxal/potentiometr.	8,0	-4,00	-3,03	20	
59	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-7,00	-5,30	20	(*)
60	Glyoxal/MTT	7,6	-4,40	-3,33	30	
61	Glyoxal/Stärke	8,0	-4,00	-3,03	20	
62	Acetaldehyd/Stärke	16,0	4,00	3,03	20	
63	Glyoxal/potentiometr.	16,0	4,00	3,03	25	
64	Acetaldehyd/Stärke	13,0	1,00	0,76	20	

Mit (*) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.
Mit (**) gekennzeichnete Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

Fortsetzung Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebnis-wert	Abwei-chung	Z-Score Horwitz	Reaktions-zeit [min]	Hinweis
65	Propionaldehyd/Stärke	12,0	0,00	0,00	5	
66	Glyoxal/Stärke	20,0	8,00	6,06		(**)
67	Acetaldehyd/potent.	4,0	-8,00	-6,06	30	(*)
68	Glyoxal/Stärke	10,5	-1,50	-1,14	20	
69	Glyoxal/Stärke	19,0	7,00	5,30	10	(**)
70	Glyoxal/Stärke	9,0	-3,00	-2,27	20	
71	Propionaldehyd/Stärke	13,0	1,00	0,76	20	
72	Glyoxal/Stärke	20,0	8,00	6,06	20	(**)
73	Propionaldehyd/Stärke	16,0	4,00	3,03	20	
74	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-1,00	-0,76		

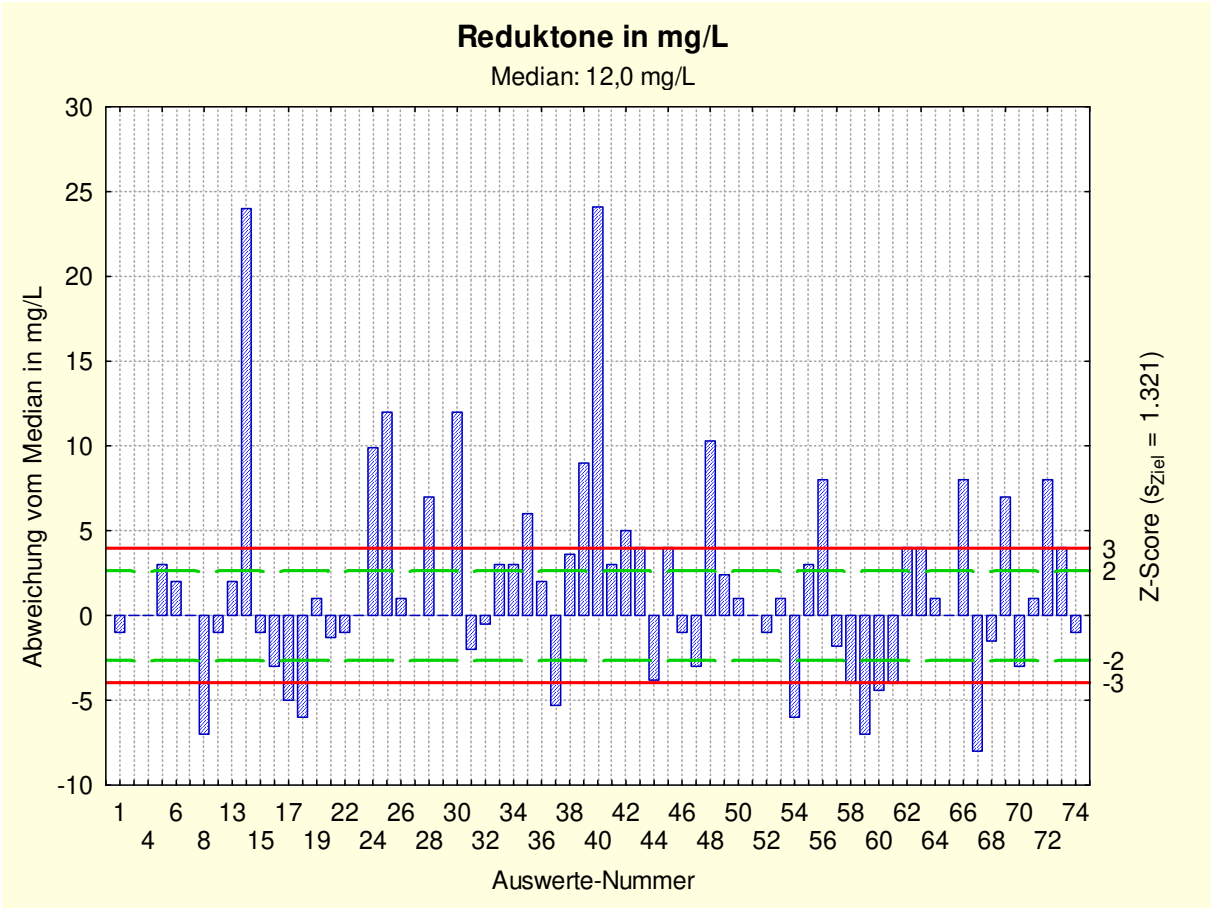
Mit (*) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.
Mit (**) gekennzeichnete Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

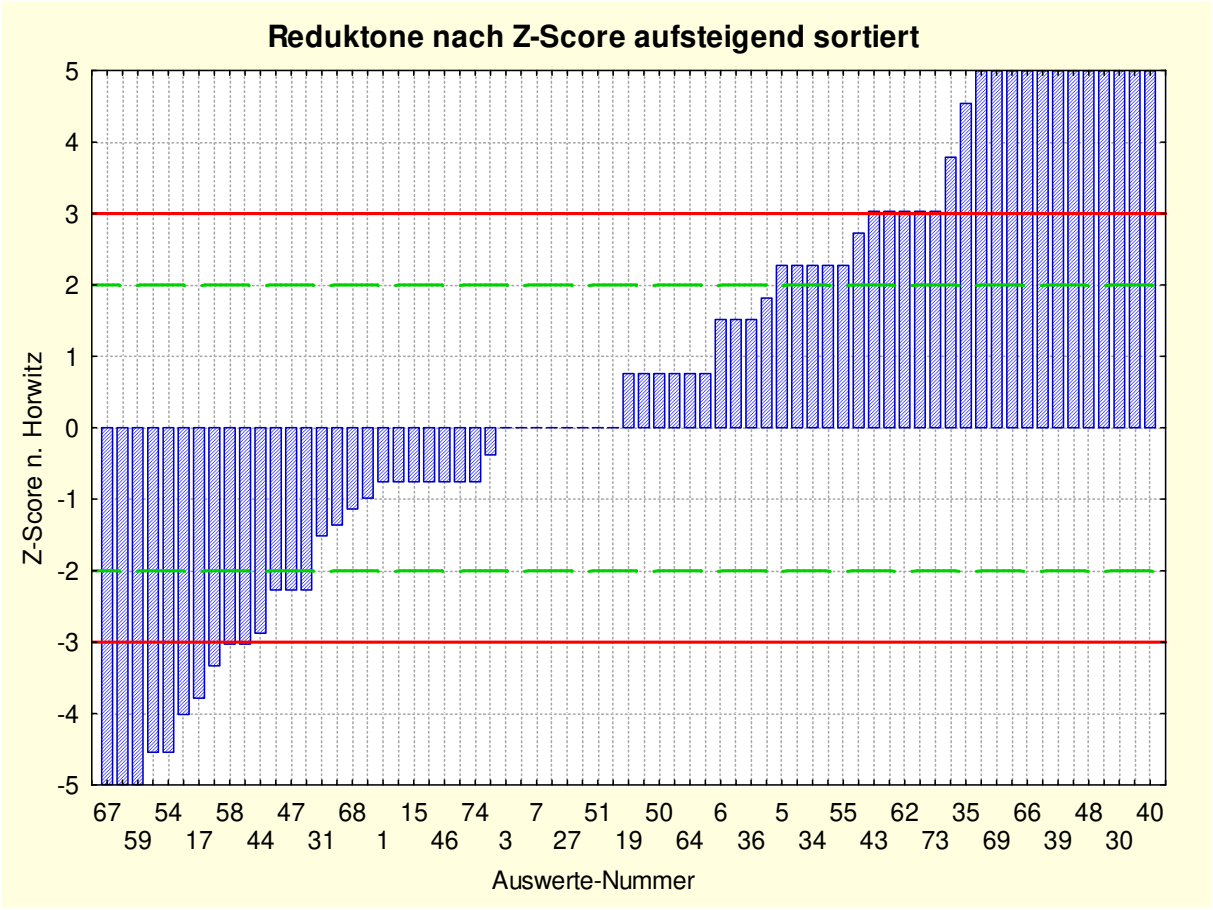
5.22.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	59	54
Minimalwert	6,0	6,0
Mittelwert	12,68	12,04
Median	12,00	12,00
Maximalwert	20,0	18,0
Standardabweichung (s_L)	3,527	2,943
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,459	0,400
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	1,321	1,321
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})		
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,67	2,23
Quotient (s_L/s_{exp})		
Quotient (u_M/s_H)	0,35	0,30
Quotient (u_M/s_{exp})		

5.22.3 Methodenübersicht

Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke	SO_2-Bindung mit Acetaldehyd; Stärke als Indikator	4	13,14	1,91
Acetaldehyd/potent.	SO_2-Bindung mit Acetaldehyd, Platinelektrode	2	7,75	6,01
Propionaldehyd/Stärke	SO_2-Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	9	15,91	4,19
Glyoxal/Stärke	SO_2-Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	23	14,19	4,94
Glyoxal/potentiometr.	SO_2-Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	30	11,90	4,70
Glyoxal/MTT	SO2-Bindung mit Glyoxal; MTT als Farbreagenz (n. Beutler & Beinstingl)	1	7,60	
	alle Verfahren	69	13,17	4,88


Reduktone in mg/L
Median: 12,0 mg/L
Abweichung vom Median in mg/L
Z-Score (s_{Ziel} = 1.321)
Auswerte-Nummer


Reduktone nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score n. Horwitz
Auswerte-Nummer

5.23 Freie Schweflige Säure [mg/L]

5.23.1 Laborergebnisse: Verfahren ohne Reduktoneinfluß

Bewertungsbasis: Werte aus Destillations-, photometrischen und FTIR-Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
1	LwK 6.3	32,0	5,80	2,26	
2	LwK 6.4	23,0	-3,20	-1,25	
10	LwK 6.4	28,4	2,20	0,86	
11	LwK 6.2	28,6	2,40	0,94	
12	LwK 6.3	31,0	4,80	1,87	
16	LwK 6.3	22,0	-4,20	-1,64	
17	LwK 6.3	24,0	-2,20	-0,86	
21	LwK 6.3	23,0	-3,20	-1,25	
33	LwK 6.3	21,0	-5,20	-2,03	
35	LwK 6.3	27,0	0,80	0,31	
39	LwK 6.3	22,0	-4,20	-1,64	
60	LwK 6.4	25,6	-0,60	-0,23	
67	LwK 6.2	26,8	0,60	0,23	
70	LwK 6.4	20,0	-6,20	-2,42	
160	LwK 6.2	27,4	1,20	0,47	
219	LwK 6.5	30,0	3,80	1,48	
273	LwK 6.5	30,0	3,80	1,48	
274	LwK 6.5	25,0	-1,20	-0,47	

Die Z-Scores der FTIR-Werte ab Auswerte-Nr. 219 wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{Horwitz}$ berechnet.

5.23.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren

Ergebnisse jodometrischer Verfahren inclusive Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
3	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	2,00	0,66	
5	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	2,00	0,66	
9	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	1,00	0,33	
13	LwK 6.1(incl.Red.)	29,9	-2,10	-0,69	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	29,2	-2,80	-0,92	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-4,00	-1,32	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-2,00	-0,66	
26	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	
27	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	5,00	1,65	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	1,00	0,33	
30	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	10,00	3,29	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	29,8	-2,20	-0,72	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	28,1	-3,90	-1,28	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	37,5	5,50	1,81	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	23,0	-9,00	-2,96	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	
48	LwK 6.1(incl.Red.)	35,7	3,70	1,22	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	30,7	-1,30	-0,43	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	2,00	0,66	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-5,00	-1,65	
55	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	-1,00	-0,33	
58	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	2,00	0,66	
61	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	
62	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	4,00	1,32	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	42,0	10,00	3,29	
68	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	
71	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-5,00	-1,65	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	1,00	0,33	
73	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	5,00	1,65	
74	LwK 6.1(incl.Red.)	28,8	-3,20	-1,05	
76	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	0,00	0,00	

Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

Ergebnisse jodometrischer Verfahren exclusive Reduktone

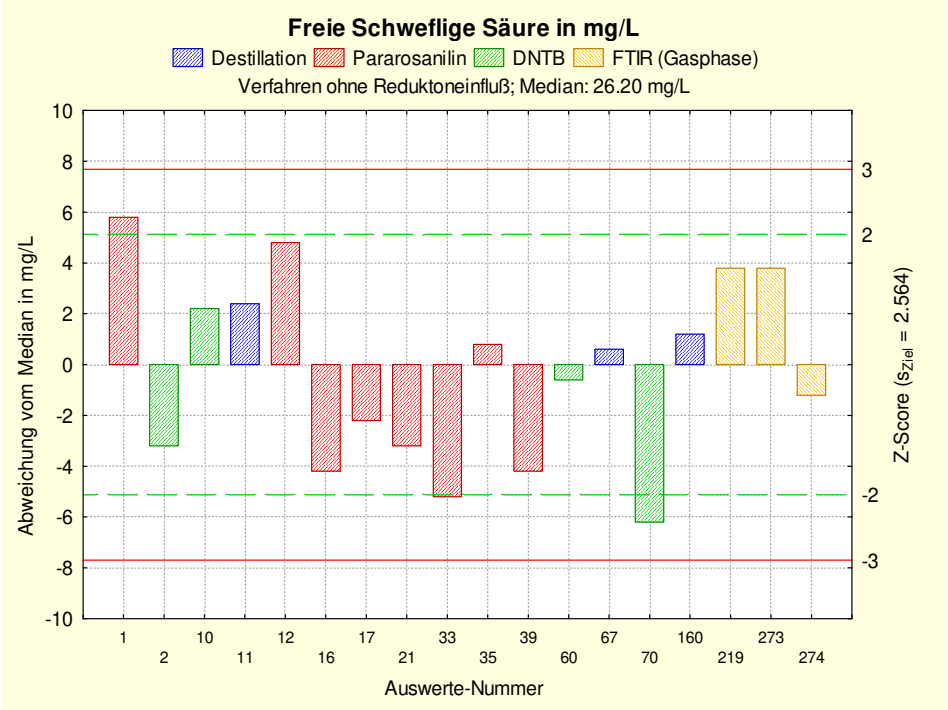
Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score s_H incl.	Hinweis
4	LwK 6.1(excl.Red.)	23,4	3,10	1,50	1,02	
6	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,56	
7	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,56	
8	LwK 6.1(excl.Red.)	24,4	4,10	1,99	1,35	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,70	1,79	1,22	
18	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,70	1,79	1,22	
19	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	30,0	9,70	4,70	3,19	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	-8,30	-4,02	-2,73	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-6,30	-3,05	-2,07	
31	LwK 6.1(excl.Red.)	28,0	7,70	3,73	2,53	
32	LwK 6.1(excl.Red.)	13,5	-6,80	-3,29	-2,24	
34	LwK 6.1(excl.Red.)	12,5	-7,80	-3,78	-2,57	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-6,30	-3,05	-2,07	
41	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-4,30	-2,08	-1,41	
44	LwK 6.1(excl.Red.)	18,2	-2,10	-1,02	-0,69	
45	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-4,30	-2,08	-1,41	
47	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,70	1,31	0,89	
51	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-3,30	-1,60	-1,09	
52	LwK 6.1(excl.Red.)	27,0	6,70	3,25	2,20	
53	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-2,30	-1,11	-0,76	
56	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,56	
57	LwK 6.1(excl.Red.)	20,3	0,00	0,00	0,00	
59	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,23	
63	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-1,30	-0,63	-0,43	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,70	1,79	1,22	
65	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-4,30	-2,08	-1,41	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	24,0	3,70	1,79	1,22	

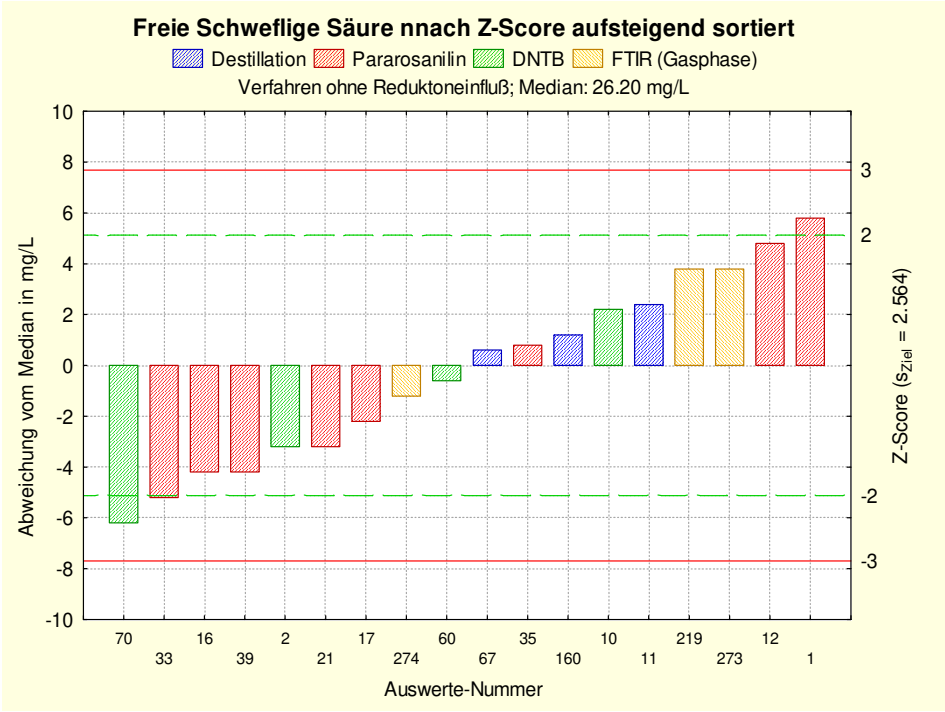
5.23.3 Deskriptive Ergebnisse

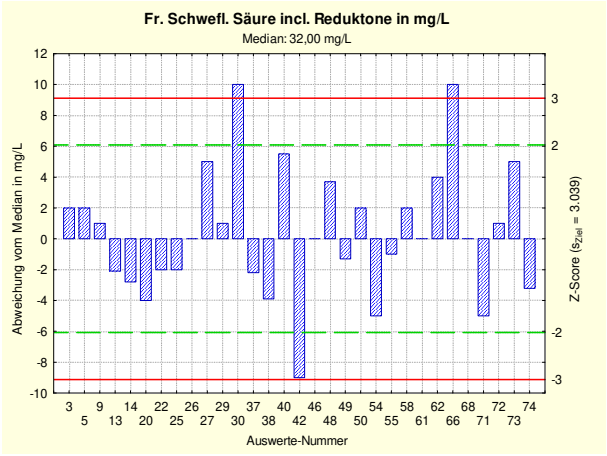
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation etc.	Jodometrie	
	alle Daten	incl. Reduktone. alle Daten	excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	18	31	29
Minimalwert	20,0	23,0	12,0
Mittelwert	25,93	32,35	20,18
Median	26,20	32,00	20,30
Maximalwert	32,0	42,0	30,0
Standardabweichung (s_L)	3,640	4,185	4,739
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,858	0,752	0,880
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	2,564	3,039	2,065
Zielstandardabweichung incl. Reduktone ($s_{Hincl.}$)			3,039
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,42	1,38	2,30
Quotient (s_L/s_{exp})			1,56
Quotient (u_M/s_H)	0,33	0,25	0,43
Quotient (u_M/s_{exp})			0,29

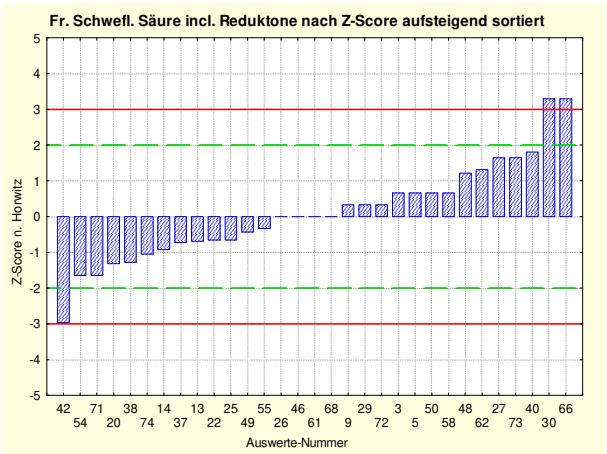
5.23.4 Methodenübersicht

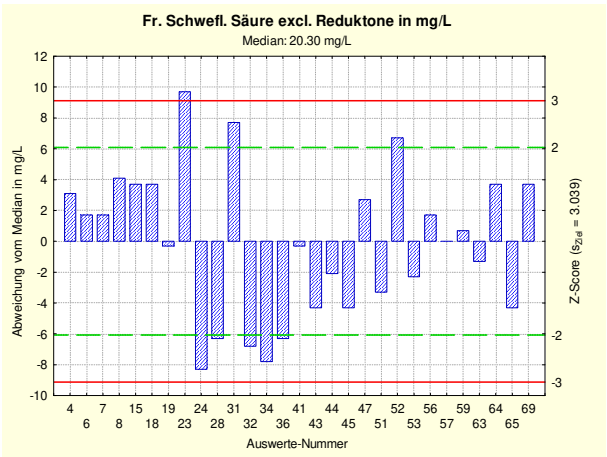
Verfahren	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
- incl. Red.	- ohne Abzug der Reduktone	31	32,19	3,77
- excl. Red.	- mit Abzug der Reduktone	29	20,12	5,18
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	3	27,60	1,04
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	8	25,16	4,68
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	4	24,25	4,07
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	3	28,36	3,21
	alle Verfahren ohne Reduktoneinfluss	18	25,93	4,13

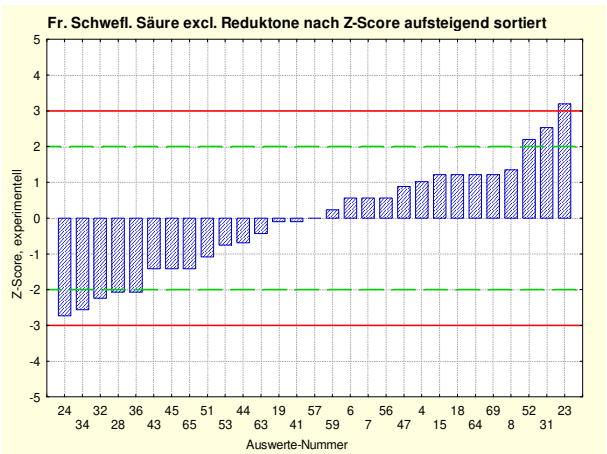





Fr. Schwefl. Säure incl. Reduktone in mg/L
Median: 32,00 mg/L
Abweichung vom Median in mg/L
Z-Score (s_{Ziel} = 3.039)
Auswerte-Nummer


Fr. Schwefl. Säure incl. Reduktone nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score n. Horwitz
Auswerte-Nummer


Fr. Schwefl. Säure excl. Reduktone in mg/L
Median: 20.30 mg/L
Abweichung vom Median in mg/L
Z-Score (s_{Ziel} = 3.039)
Auswerte-Nummer


Fr. Schwefl. Säure excl. Reduktone nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
Auswerte-Nummer

5.24 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

5.24.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
1	LwK 7.6	105,0	-15,50	-1,65	-2,89	
2	LwK 7.7	113,0	-7,50	-0,80	-1,40	
3	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
4	LwK 7.5.3(incl. Red.)	128,0	7,50	0,80	1,40	
5	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	5,50	0,59	1,03	
6	LwK 7.5.3(excl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
7	LwK 7.4.1	130,0	9,50	1,01	1,77	
8	LwK 7.1	120,0	-0,50	-0,05	-0,09	
9	LwK 7.4.2	127,0	6,50	0,69	1,21	
10	LwK 7.4.2	118,0	-2,50	-0,27	-0,47	
11	LwK 7.3	117,0	-3,50	-0,37	-0,65	
12	LwK 7.4.2	123,0	2,50	0,27	0,47	
13	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,9	10,40	1,11	1,94	
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	124,3	3,80	0,41	0,71	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	-12,50	-1,33	-2,33	
16	LwK 7.7	118,0	-2,50	-0,27	-0,47	
17	LwK 7.7	116,0	-4,50	-0,48	-0,84	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	117,0	-3,50	-0,37	-0,65	
19	LwK 7.4.2	130,0	9,50	1,01	1,77	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	1,50	0,16	0,28	
21	LwK 7.7	98,0	-22,50	-2,40	-4,20	
22	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	5,50	0,59	1,03	
24	LwK 7.5.1(excl. Red.)	115,4	-5,10	-0,54	-0,95	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	13,50	1,44	2,52	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	13,50	1,44	2,52	
28	LwK 7.3	115,0	-5,50	-0,59	-1,03	
29	LwK 7.4.1	125,0	4,50	0,48	0,84	
30	LwK 7.4.1	107,0	-13,50	-1,44	-2,52	
31	LwK 7.5.2(excl. Red.)	117,0	-3,50	-0,37	-0,65	
32	LwK 7.5.1(excl. Red.)	141,5	21,00	2,24	3,92	
33	LwK 7.4.2	131,0	10,50	1,12	1,96	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	77,5	-43,00	-4,59	-8,03	(***)
35	LwK 7.4.1	110,0	-10,50	-1,12	-1,96	
36	LwK 7.4.2m	120,0	-0,50	-0,05	-0,09	
37	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,6	3,10	0,33	0,58	
38	LwK 7.1	115,0	-5,50	-0,59	-1,03	
39	LwK 7.7	123,0	2,50	0,27	0,47	
40	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	-9,50	-1,01	-1,77	
41	LwK 7.4.1	123,0	2,50	0,27	0,47	
42	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	-9,50	-1,01	-1,77	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	114,5	-6,00	-0,64	-1,12	
44	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,5	-5,00	-0,53	-0,93	
45	LwK 7.4.2	123,0	2,50	0,27	0,47	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	4,50	0,48	0,84	
47	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	-9,50	-1,01	-1,77	
48	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	14,50	1,55	2,71	
49	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,8	14,30	1,53	2,67	
50	LwK 7.5.2(excl. Red.)	132,0	11,50	1,23	2,15	
51	LwK 7.4.2	121,0	0,50	0,05	0,09	
52	LwK 7.5.1(excl. Red.)	123,0	2,50	0,27	0,47	
53	LwK 7.5.1(excl. Red.)	88,0	-32,50	-3,47	-6,07	(***)
54	LwK 7.4.2	112,0	-8,50	-0,91	-1,59	
55	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	4,50	0,48	0,84	
56	LwK 7.4.2	129,0	8,50	0,91	1,59	
57	LwK 7.5.1(incl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
58	LwK 7.7	103,0	-17,50	-1,87	-3,27	
59	LwK 7.7	104,0	-16,50	-1,76	-3,08	

Die mit (***) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

Fortsetzung Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
60	LwK 7.7	112,7	-7,80	-0,83	-1,46	
61	LwK 7.5.3(incl. Red.)	122,7	2,20	0,23	0,41	
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-10,50	-1,12	-1,96	
63	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-15,50	-1,65	-2,89	
64	LwK 7.3	99,2	-21,30	-2,27	-3,98	
65	LwK 7.4.2	121,0	0,50	0,05	0,09	
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	7,50	0,80	1,40	
67	LwK 7.3	125,0	4,50	0,48	0,84	
68	LwK 7.4.1	195,5	75,00	8,00	14,00	(*)
69	LwK 7.4.2	104,0	-16,50	-1,76	-3,08	
70	LwK 7.7	105,0	-15,50	-1,65	-2,89	
71	LwK 7.5.1(excl. Red.)	129,0	8,50	0,91	1,59	
72	LwK 7.4.2	123,0	2,50	0,27	0,47	
73	LwK 7.5.2(incl. Red.)	136,0	15,50	1,65	2,89	
74	LwK 7.3	78,3	-42,20	-4,50	-7,88	(**)
76	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	-8,50	-0,91	-1,59	
129	LwK 7.5.1(incl. Red.)	125,0	4,50	0,48	0,84	
144	LwK 7.4.2	117,0	-3,50	-0,37	-0,65	
160	LwK 7.3	118,6	-1,90	-0,20	-0,35	
273	LwK 7.8	99,0	-21,50	-2,29	-4,01	
274	LwK 7.8	116,0	-4,50	-0,48	-0,84	

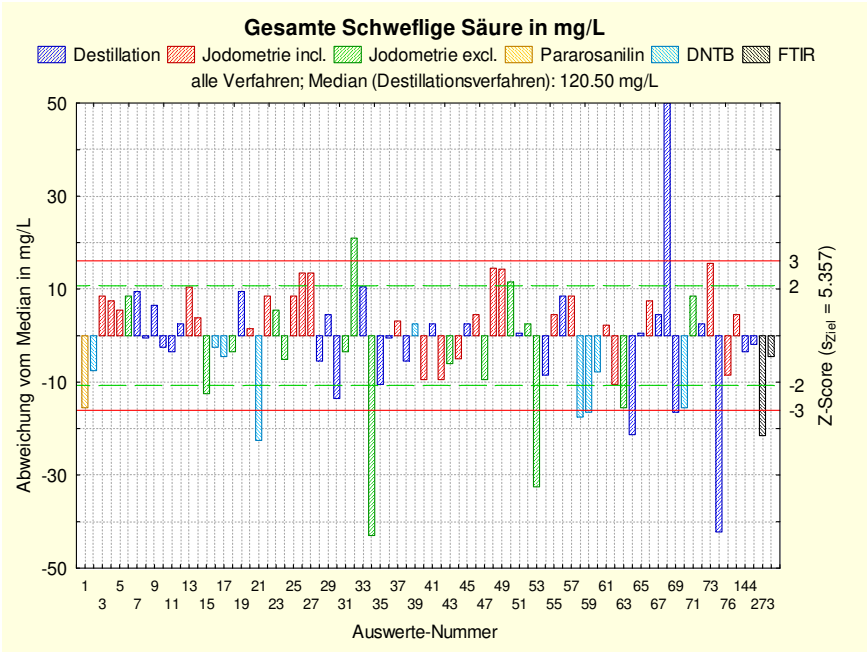
Der mit (*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und blieb unberücksichtigt.
Der mit (**) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.
Rot markierte Auswerte-Nummer: Dieses Ergebnis war für die statistischen Berechnungen nicht verfügbar.

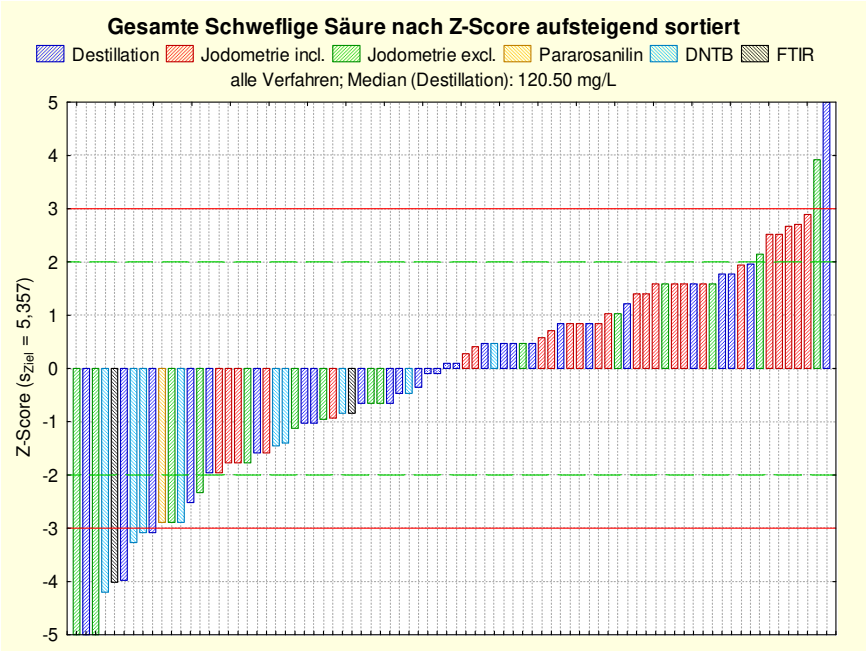
5.24.2 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode n. AVV V2	2	117,50	4,01
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	6	111,36	14,64
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	124,47	18,26
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	122,02	7,17
LwK 7.4.2m	modifizierte Destillationsmethode nach Rebelein	1	120,00	
	alle Destillationsverfahren	28	119,76	8,90
LwK 7.5.1 incl.	jodometrisch n. einfacher Hydrolyse			
	- ohne Abzug der Reduktone	20	125,41	7,16
LwK 7.5.1 excl.	- unter Abzug der Reduktone	12	113,73	17,51
LwK 7.5.2 incl.	jodometrisch n. doppelter Hydrolyse			
	- ohne Abzug der Reduktone	2	133,45	4,09
LwK 7.5.2 excl.	- unter Abzug der Reduktone	2	124,50	12,03
LwK 7.5.3 incl.	Hydrolyse n. Dr. Rebelein			
	- ohne Abzug der Reduktone	2	125,35	4,25
LwK 7.5.3 excl.	- unter Abzug der Reduktone	1	129,00	
LwK 7.6	Pararosanilinmethode	1	105,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	9	110,30	9,30
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (Gasphase)	2	107,50	13,63

5.24.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	27	26
Minimalwert	78,3	99,2
Mittelwert	117,86	119,38
Median	120,00	120,50
Maximalwert	131,0	131,0
Standardabweichung (s_L)	11,179	8,061
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	2,151	1,581
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	9,340	9,373
Zielstandardabweichung experim. (s_{exp})	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,20	0,86
Quotient (s_L/s_{exp})	2,09	1,50
Quotient (u_M/s_H)	0,23	0,17
Quotient (u_M/s_{exp})	0,40	0,30





5.25 Extinktion pro cm bei 420 nm

5.25.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
4	OIV/EG gebräuchl.	2,460	0,0400	0,39	
5	OIV/EG gebräuchl.	2,285	-0,1350	-1,32	
8	OIV/EG gebräuchl.	2,331	-0,0890	-0,87	
11	OIV/EG gebräuchl.	2,178	-0,2420	-2,36	
12	OIV/EG gebräuchl.	2,415	-0,0050	-0,05	
16	OIV/EG gebräuchl.	2,250	-0,1700	-1,66	
17	OIV/EG gebräuchl.	1,827	-0,5930	-5,78	(**)
24	OIV/EG gebräuchl.	2,500	0,0800	0,78	
29	OIV/EG gebräuchl.	2,340	-0,0800	-0,78	
32	OIV/EG gebräuchl.	2,497	0,0770	0,75	
36	OIV/EG gebräuchl.	2,462	0,0420	0,41	
37	OIV/EG gebräuchl.	13,744	11,3240	110,35	(*)
41	OIV/EG gebräuchl.	2,424	0,0038	0,04	
43	OIV/EG gebräuchl.	2,485	0,0650	0,63	
50	OIV/EG gebräuchl.	3,386	0,9660	9,41	(**)
56	FTIR	2,470	0,0500	0,49	
57	OIV/EG gebräuchl.	2,480	0,0600	0,58	
60	OIV/EG gebräuchl.	2,388	-0,0320	-0,31	
66	OIV/EG gebräuchl.	2,257	-0,1630	-1,59	
67	OIV/EG gebräuchl.	2,480	0,0600	0,58	
70	OIV/EG gebräuchl.	2,420	0,0000	0,00	
232	FTIR	2,368	-0,0520	-0,51	

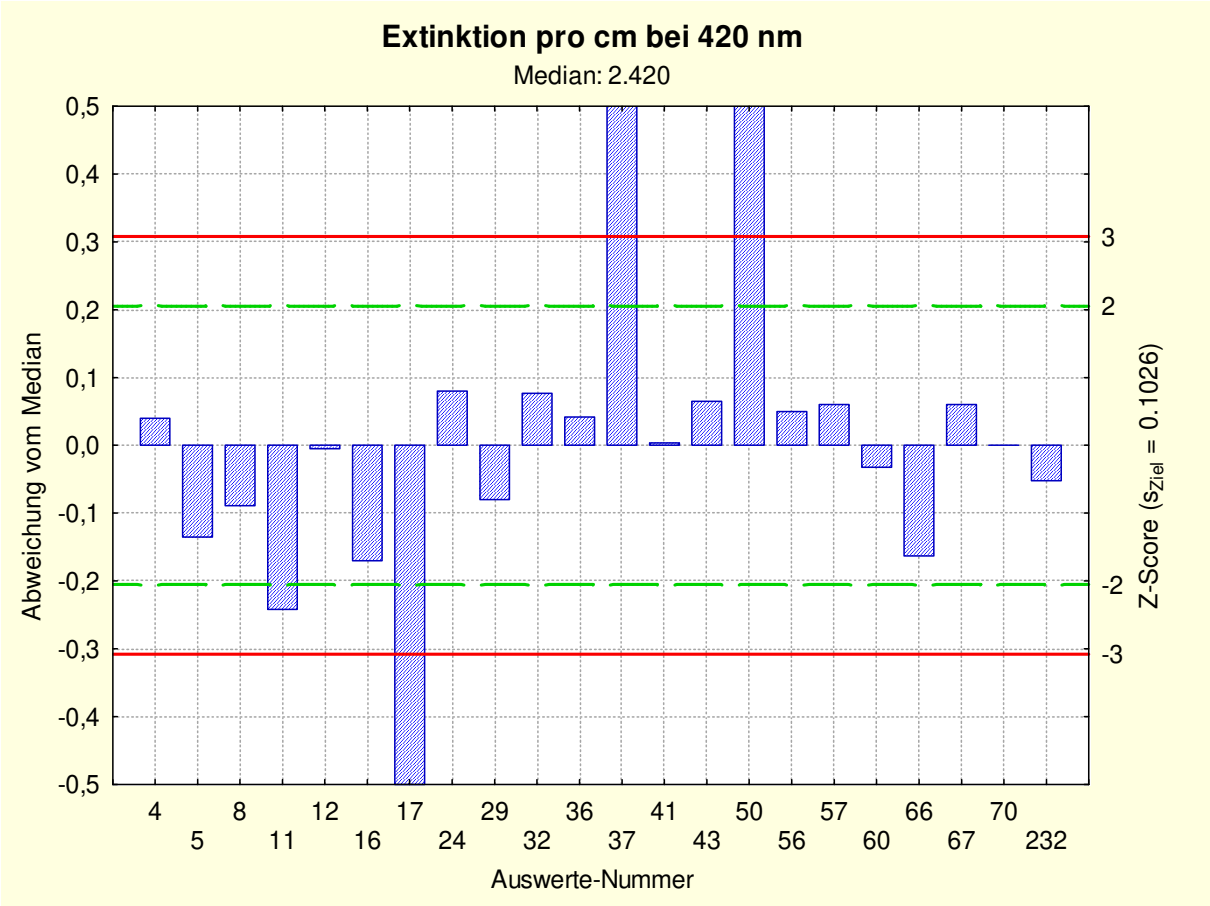
Der mit (*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und blieb unberücksichtigt.
Die mit (**)gekennzeichneten Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

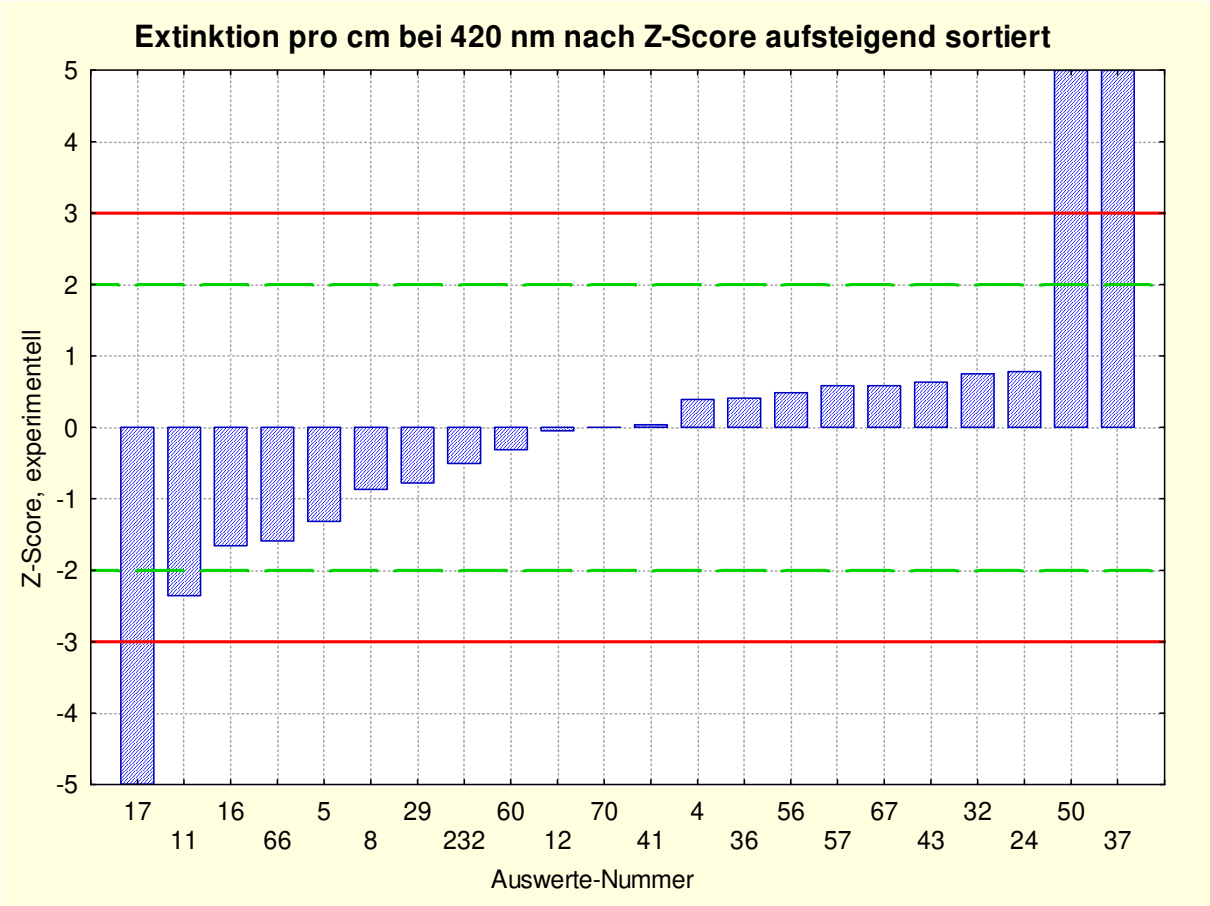
5.25.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Extinktion pro cm bei 420 nm	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	19	17
Minimalwert	1,827	2,178
Mittelwert	2,414	2,391
Median	2,420	2,420
Maximalwert	3,386	2,500
Standardabweichung (s_L)	0,285	0,100
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0653	0,0243
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,1026	0,1026
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient (s_L/s_{exp})	2,77	0,98
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient (u_M/s_{exp})	0,64	0,24

5.25.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
OIV/EG gebräuchl.	Farbcharakteristik OIV-MA-AS2-07B (Typ IV) VO (EG) Nr. 2676/90-40	20	2,405	0,139
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	2	2,419	0,082


Extinktion pro cm bei 420 nm
Median: 2.420
Abweichung vom Median
Z-Score (s_{Ziel} = 0.1026)
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
-0,1
-0,2
-0,3
-0,4
-0,5
3
2
-2
-3
4 5 8 11 12 16 17 24 29 32 36 37 41 43 50 56 57 60 66 67 70 232
Auswerte-Nummer


Extinktion pro cm bei 420 nm nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
17 11 16 66 5 8 29 232 60 12 70 41 4 36 56 57 67 43 32 24 50 37
Auswerte-Nummer

5.26 Extinktion pro cm bei 520 nm

5.26.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
4	OIV/EG gebräuchl.	2,890	0,1000	0,71	
5	OIV/EG gebräuchl.	2,747	-0,0430	-0,31	
8	OIV/EG gebräuchl.	2,750	-0,0400	-0,28	
11	OIV/EG gebräuchl.	2,625	-0,1650	-1,17	
12	OIV/EG gebräuchl.	2,868	0,0780	0,55	
16	OIV/EG gebräuchl.	2,730	-0,0600	-0,43	
17	OIV/EG gebräuchl.	2,253	-0,5370	-3,82	
24	OIV/EG gebräuchl.	3,045	0,2550	1,81	
29	OIV/EG gebräuchl.	2,720	-0,0700	-0,50	
32	OIV/EG gebräuchl.	2,992	0,2020	1,44	
36	OIV/EG gebräuchl.	2,918	0,1280	0,91	
37	OIV/EG gebräuchl.	2,597	-0,1930	-1,37	
41	OIV/EG gebräuchl.	2,831	0,0410	0,29	
43	OIV/EG gebräuchl.	2,880	0,0900	0,64	
50	OIV/EG gebräuchl.	4,040	1,2500	8,88	(**)
56	FTIR	2,991	0,2010	1,43	
57	OIV/EG gebräuchl.	2,790	0,0000	0,00	
60	OIV/EG gebräuchl.	2,582	-0,2080	-1,48	
66	OIV/EG gebräuchl.	2,723	-0,0670	-0,48	
67	OIV/EG gebräuchl.	2,895	0,1050	0,75	
70	OIV/EG gebräuchl.	2,820	0,0300	0,21	
232	FTIR	2,970	0,1800	1,28	

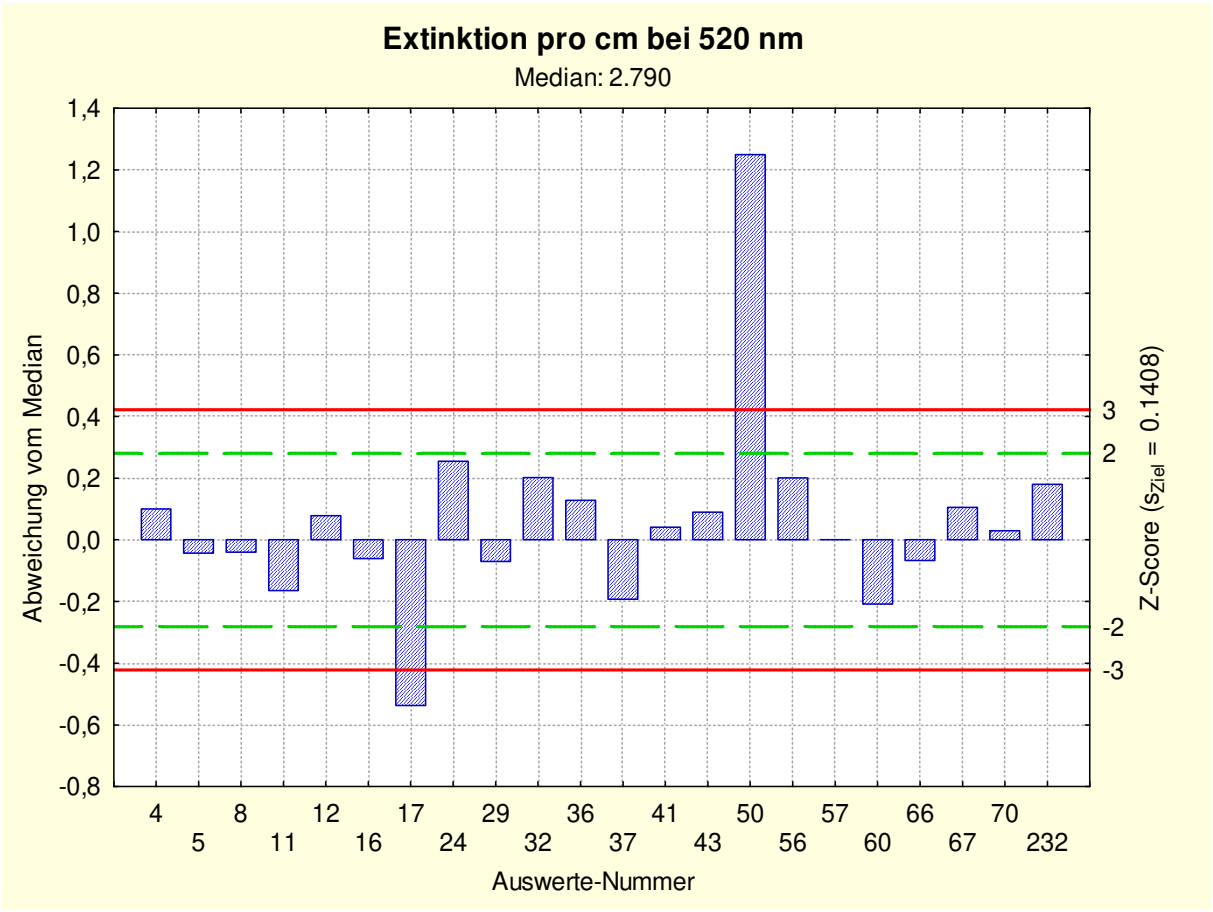
Der mit (**)gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

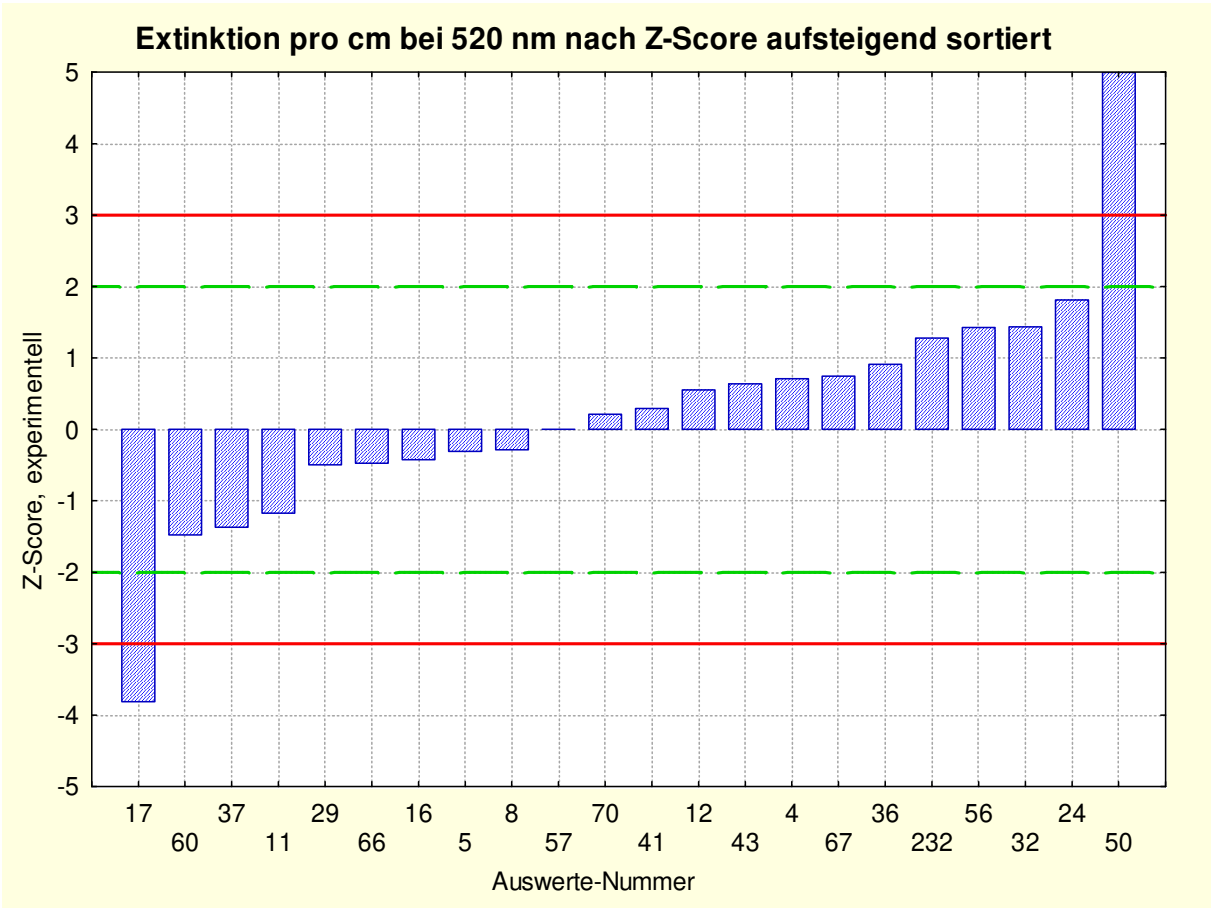
5.26.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Extinktion pro cm bei 520 nm	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	20	19
Minimalwert	2,253	2,253
Mittelwert	2,835	2,771
Median	2,805	2,790
Maximalwert	4,040	3,045
Standardabweichung (s_L)	0,332	0,177
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0743	0,0407
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,1408	0,1408
Horrat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient (s_L/s_{exp})	2,36	1,26
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient (u_M/s_{exp})	0,53	0,29

5.26.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
OIV/EG gebräuchl.	Farbcharakteristik OIV-MA-AS2-07B (Typ IV) VO (EG) Nr. 2676/90-40	20	2,801	0,163
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	2	2,981	0,017


Extinktion pro cm bei 520 nm
Median: 2.790
Abweichung vom Median
Z-Score (sZiel = 0.1408)
1,4
1,2
1,0
0,8
0,6
0,4
0,2
0,0
-0,2
-0,4
-0,6
-0,8
3
2
-2
-3
4 5 8 11 12 16 17 24 29 32 36 37 41 43 50 56 57 60 66 67 70 232
Auswerte-Nummer


Extinktion pro cm bei 520 nm nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
17 60 37 11 29 66 16 5 8 57 70 41 12 43 4 67 36 232 56 32 24 50
Auswerte-Nummer

5.27 Extinktion pro cm bei 620 nm

5.27.1 Laborergebnisse

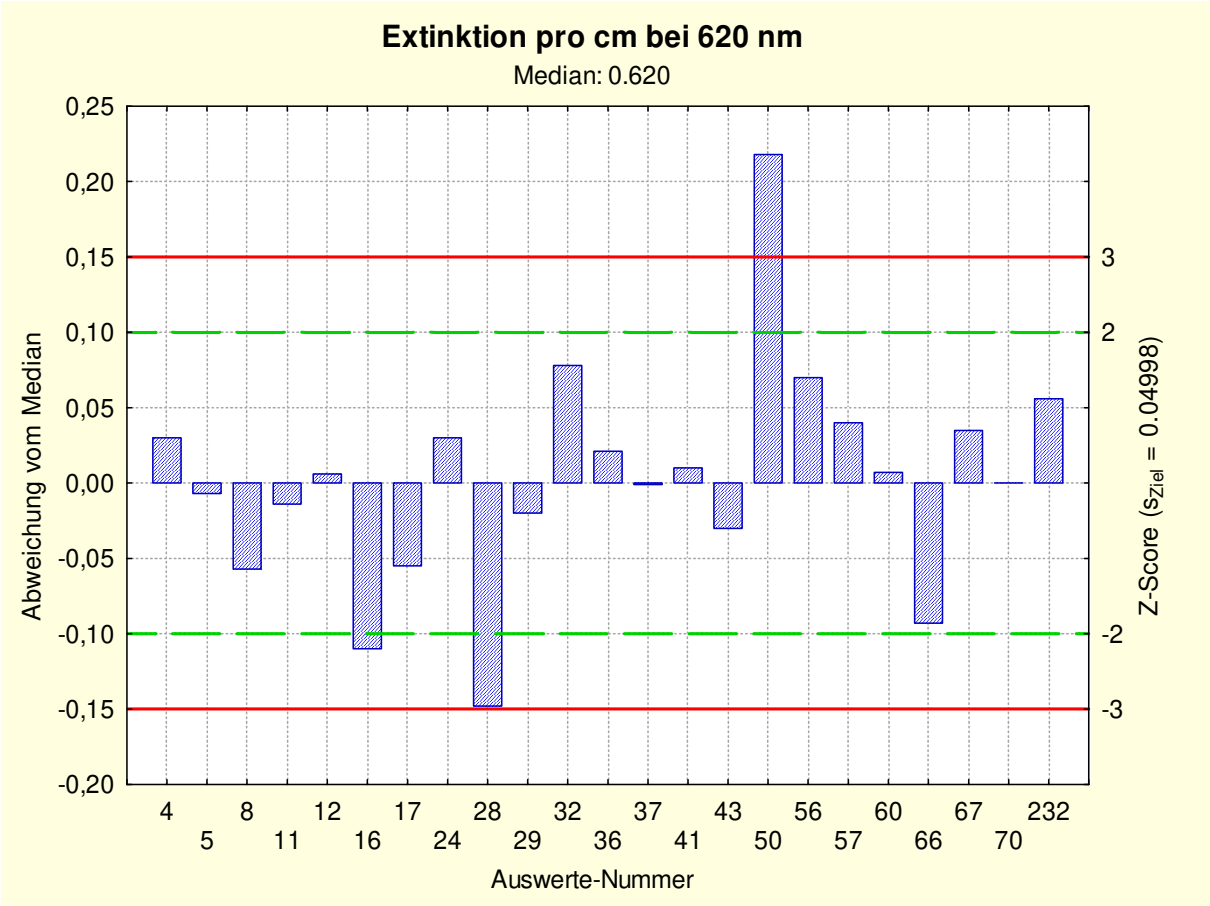
Auswerte-Nr.	Verfahren	Ergebniswert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
4	OIV/EG gebräuchl.	0,650	0,0300	0,60	
5	OIV/EG gebräuchl.	0,613	-0,0070	-0,14	
8	OIV/EG gebräuchl.	0,563	-0,0570	-1,14	
11	OIV/EG gebräuchl.	0,606	-0,0140	-0,28	
12	OIV/EG gebräuchl.	0,626	0,0060	0,12	
16	OIV/EG gebräuchl.	0,510	-0,1100	-2,20	
17	OIV/EG gebräuchl.	0,565	-0,0550	-1,10	
24	OIV/EG gebräuchl.	0,650	0,0300	0,60	
28	OIV/EG gebräuchl.	0,472	-0,1480	-2,96	
29	OIV/EG gebräuchl.	0,600	-0,0200	-0,40	
32	OIV/EG gebräuchl.	0,698	0,0780	1,56	
36	OIV/EG gebräuchl.	0,641	0,0210	0,42	
37	OIV/EG gebräuchl.	0,619	-0,0010	-0,02	
41	OIV/EG gebräuchl.	0,630	0,0100	0,20	
43	OIV/EG gebräuchl.	0,590	-0,0300	-0,60	
50	OIV/EG gebräuchl.	0,838	0,2180	4,36	
56	FTIR	0,690	0,0700	1,40	
57	OIV/EG gebräuchl.	0,660	0,0400	0,80	
60	OIV/EG gebräuchl.	0,627	0,0070	0,14	
66	OIV/EG gebräuchl.	0,527	-0,0930	-1,86	
67	OIV/EG gebräuchl.	0,655	0,0350	0,70	
70	OIV/EG gebräuchl.	0,620	0,0000	0,00	
232	FTIR	0,676	0,0560	1,12	

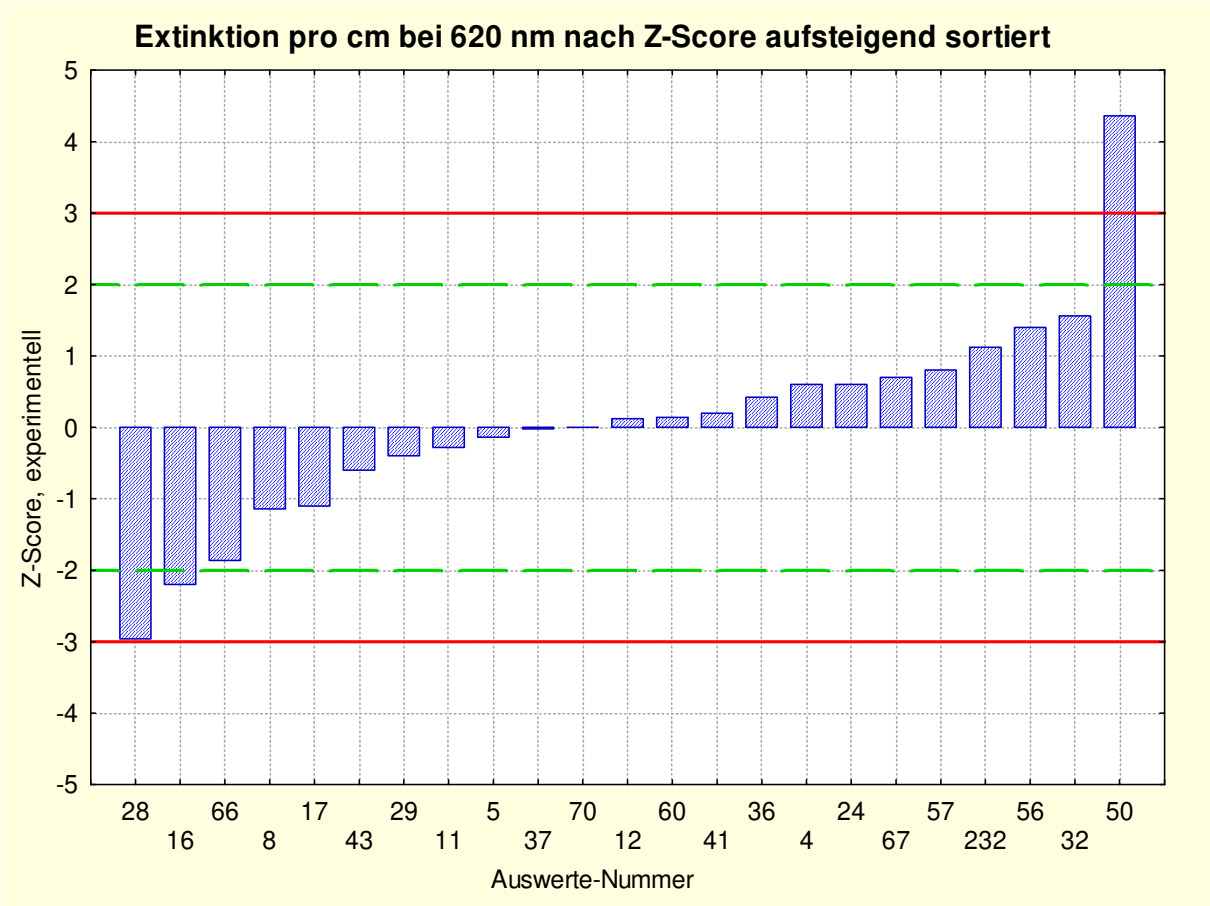
5.27.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Extinktion pro cm bei 620 nm	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,472
Mittelwert	0,6171
Median	0,6200
Maximalwert	0,838
Standardabweichung (s_L)	0,0739
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0161
Zielstandardabweichung nach Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,0500
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient (s_L/s_{exp})	1,48
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient (u_M/s_{exp})	0,32

5.27.3 Methodenübersicht

Methode	Methoden-Beschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
OIV/EG gebräuchl.	Farbcharakteristik OIV-MA-AS2-07B (Typ IV) VO (EG) Nr. 2676/90-40	21	0,6144	0,0559
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	2	0,6830	0,0112


Extinktion pro cm bei 620 nm
Median: 0.620
Abweichung vom Median
Z-Score (s_{Ziel} = 0.04998)
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
-0,05
-0,10
-0,15
-0,20
3
2
-2
-3
4 8 12 17 28 32 37 43 56 60 67 232
5 11 16 24 29 36 41 50 57 66 70
Auswerte-Nummer


Extinktion pro cm bei 620 nm nach Z-Score aufsteigend sortiert
Z-Score, experimentell
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
28 66 17 29 5 70 60 36 24 57 56 50
16 8 43 11 37 12 41 4 67 232 32
Auswerte-Nummer

6 Alphabetisches Verzeichnis der Teilnehmer

ABC-Labor	D 54486	Mülheim
Amtl. anerk.Weinlabor Porn	D 54518	Osann-Monzel
Analytisches Labor Link	D 67256	Weisenheim/Sand
Analytisches Labor Link	D 67551	Worms-Pfeddersheim
Arauner GmbH & Co. KG	D 97318	Kitzingen
Bataillard AG	CH-6023	Rothenburg
Breko GmbH	D28217	Bremen
Coop Weinkeller LNA Pratteln	CH-4133	Pratteln
Das Weinlabor Carl Klein GmbH	D 97318	Kitzingen
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum Rheinhessen-Nahe-Hunsrück	D 55276	Oppenheim
Dienstleistungszentrum Ländl. Raum Rheinpfalz	D 67435	Neustadt/Weinstr.
Eaton Technologies GmbH	D 55450	Langenlonsheim
Felsengartenkellerei Besigheim e.G.	D 74394	Hessigheim
Gebietswinzergenossenschaft Dt. Weintor	D 76831	Ilbesheim
Henkell & Söhnlein Sektkellerei KG	D 65187	Wiesbaden
Hochschule Geisenheim University	D 65366	Geisenheim
Höhere Bundeslehranstalt u. Bundesamt f. Weinbau	A 3400	Klosterneuburg
Institut Heidger	D 54518	Osann-Monzel
Jacques' Wein-Depot Wein-Einzelhandel GmbH	D 40219	Düsseldorf
Jordan Analytik	D 97246	Eibelstadt
Kost GmbH & Co. KG	D-56856	Zell (Mosel)
Kost GmbH & Co. KG	D 55459	Aspisheim
Kunzmann – Weinkellerei – Mineralbrunnen – Fruchtsaft GmbH & Co. KG	D 86453	Dasing
Laboratorium Lacher	D 79238	Ehrenkirchen
Les Domaines de VinsMoselle Centrallaboratoire	L 5404	Bech-Kleinmacher
Marco Köninger Oenologie	D 77876	Kappelrodeck
Oenologie und Weinanalytik Krauß	D 55291	Saulheim
PK-Weinlabor	D 67273	Weisenheim/Berg
Rimuss- und Weinkellerei Rahm AG	CH-8215	Hallau
Rotkäppchen Mumm Sektkellereien GmbH & Co. KG	D 65343	Eltville/Rhein
Scherer & Bühler AG	CH-6045	Meggen
Schöller Wein & Analytik	D 55294	Bodenheim
Sektkellerei Schloß Wachenheim AG	D 67157	Wachenheim
Tophi GmbH	D 04749	Ostrau
Tröndlin Önologie GmbH	D 79418	Schliengen
Vinalytik	CH-6423	Seewen
Vinocare GmbH – Weinlabor	D 67278	Bockenheim/Weinstr.
Wein- und Bodenlabor Dr. Nilles	D 97332	Volkach
Wein- und Bodenlabor Rebholz	D 55237	Flonheim
Weinkellerei Zimmermann-Graeff & Müller GmbH	D 56856	Zell
Wein-Bodenlabor Peitz	D 55595	Wallhausen
Weinfachlaboratorium B. Höfer GmbH	D 65375	Oestrich-Winkel
Weinkellerei Reh Kendermann	D 55411	Bingen
Weinlabor - Weinbautechniker Kaufmann	D 54536	Kröv
Weinlabor Baumann GmbH & Co. KG	D 67483	Edesheim
Weinlabor Beck	D 63927	Bürgstadt
Weinlabor Bergmann	D 91478	Markt Nordheim
Weinlabor Bollig	D 54349	Trittenheim
Weinlabor Braun e.K.	D 67435	Neustadt-Mußbach
Weinlabor Briegel e.K.	D 67146	Deidesheim
Weinlabor Emmel	D 67483	Edesheim
Weinlabor Frank	D 55283	Nierstein
Weinlabor Franzen	D 56814	Bremm
Weinlabor Geissel	D 67169	Kallstadt
Weinlabor Keßler	D 76829	Landau-Wollmesheim
Weinlabor Kiefer	D 67487	Maikammer
Weinlabor Klös	D 67578	Gimbsheim
Weinlabor Lex	D 54340	Klüsserath
Weinlabor Matthias Schreml	D 55444	Waldlaubersheim
Weinlabor Mittelhaardt	D 67098	Bad Dürkheim
Weinlabor Möndel-Börtzler	D 67487	Maikammer
Weinlabor Müller	D 72070	Tübingen
Weinlabor Neumann	D 67278	Bockenheim/Weinstr.
Weinlabor Pfitzenmaier	D 76831	Birkweiler
Weinlabor Porten	D 56814	Bruttig
Weinlabor R. Meyer	D 54349	Trittenheim
Weinlabor Schmitt	D 55450	Langenlonsheim

Weinlabor Schumacher	D 53474	Bad Neuenahr-Ahrweiler
Weinlaboratorien Dr. E.M. Kleinknecht	D 55232	Alzey
Weinlaboratorien Dr. E.M. Kleinknecht	D 55543	Bad Kreuznach
Wine Analytics Mehring	D 54346	Mehring
WLV Weinanalytik GmbH	D 65366	Geisenheim
WSB Labor Ruzycki	D 55278	Hahnheim
WSB Labor Ruzycki, Zwgst. Nierstein	D 55283	Nierstein
Zentrallabor Witowski	D 55232	Alzey
Zentrallabor Witowski, Zwgst. Bechtheim	D 67595	Bechtheim