

Ergebnisse



LE GOUVERNEMENT  
DU GRAND-DUCHÉ DE LUXEMBOURG  
Ministère de l'Agriculture,  
de l'Alimentation et de la Viticulture

# EIP Projekt ITF-Milk

In den vergangenen vier Jahren wurde im Rahmen vom ITF-Milk Projekt intensiv an der Entwicklung von Techniken zur messtechnischen Bewertung vom Milchgeschmack gearbeitet. Zum Ende eines insgesamt sehr komplizierten Forschungsprojekts konnten nun für die wichtigsten Fettsäuren spektrale Vorhersagegleichungen vorgestellt und im large scale Einsatz für den Praxiseinsatz getestet werden. Dies erlaubte es, eine Bewertung der einzelkuhbasierten Ist-Situation in Luxemburg durchzuführen. Zudem konnten erstmalig mögliche Grenz- und Richtwerte zum freien Anteil von einzelnen Fettsäuren bewertet werden. Insgesamt wurden fünf verschiedene Modellierungsansätze zurückbehalten, die teils auf klassischer Statistik und teils auf KI basieren.



Romain Reding

**F**olgender Beitrag zeigt nun erstmalig eine Auswertung von insgesamt 1.159.559 Spektren aus Luxemburg der Jahre 2019, 2020 und 2021. In einer ersten Phase bestand das Hauptziel darin, für die sieben wichtigsten und vorwiegend themarelevanten Fettsäuren alle Einzelkuh Werte zu bestimmen und anschließend deren gaußsche Verteilung, jahreszeitlich bedingte signifikante Unterschiede und weitere Besonderheiten zu bestimmen.

Die enorme Komplexität von diesem Projekt ist darauf zurückzuführen, dass man von Beginn an mit dem nicht vorhersehbaren Problem zu tun hatte, dass einzelkuhbasierte Referenzproben zu einem nennenswerten Anteil unter der Detektionsgrenze des bestmöglich verfügbaren Laboranalysegeräts GC-MS/MS

lagen. Dies hatte zur Folge, dass ein Großteil der Referenzproben labortechnisch künstlich aufbereitet werden mussten und dies dann die verschiedenen Probencampagnen zusätzlich verkomplizierte.

Tabelle 1 zeigt nun die Ergebnisse der Modellierungsleistung zu den einzelnen Fettsäuren. Zurückbehalten wurden insgesamt fünf verschiedene Modellierungsansätze. Zudem wurden alle Modelle mittel Cross Validierung (CV) und einer externen Validierung (VAL) getestet.

Tabelle 3 präsentiert die Resultate der dreijährigen Bewertung der freien Fettsäuren in Relation zu den normal vorkommenden Konzentrationen der Fettsäuren (Triglyzeride, Glycerin & freie Fettsäuren) in der Milch. Die durchschnittliche Konzentration vom freien Anteil der sieben untersuchten Fettsäuren liegt stets unter der 1 % Marke und variiert von ca. 0,2 bis 0,8 %, was mit weiteren Literaturquellen durchaus übereinstimmt. Die niedrigen Werte bestätigen also, dass das Projekt wirklich im wahrsten Sinne des Wortes im Bereich der «ultra-fein» Zusammensetzung der Milch agiert. Es versteht sich von selbst, dass es sich hierbei um Spektraldaten von unverarbeiteter

**Tab. 1:** Modellierungsleistung der einzelnen freien Fettsäuren mit dem besten Algorithmus auf der Grundlage des niedrigsten RMSE (Root Mean Square Error = Maßzahl zur Beurteilung der Prognosegüte) der externen Validierung; RPD: ratio of performance deviation, KRR: Kernel Ridge Regression, PCR: Principal Component Regression, PLS: Partial Least Square regression, SVM-R: Support Vector Machine-Regression (Quelle: CRA-W)

FFA	Algorithmus	R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub>	R <sup>2</sup> <sub>CV</sub>	R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub>	RMSE <sub>CAL</sub>	RMSE <sub>CV</sub>	RMSE <sub>VAL</sub>	RPD <sub>CAL</sub>	RPD <sub>CV</sub>	RPD <sub>VAL</sub>
C4	KRR	0,85	0,73	0,76	14,79	19,85	16,75	2,58	1,92	2,28
C6	ElasticNet	0,77	0,68	0,57	9,74	11,58	12,7	2,1	1,77	1,61
C8	SVM-R	0,85	0,54	0,4	4,95	8,71	9,72	2,61	1,48	1,33
C10	KRR	0,59	0,52	0,38	8,88	9,62	9,15	1,56	1,44	1,51
C12	PCR	0,35	0,31	0,08	6,45	6,65	6,34	1,24	1,21	1,26
C14	KRR	0,52	0,4	0,02	9,91	11,06	11,04	1,44	1,29	1,29
C16	KRR	0,5	0,36	0,2	22,4	25,25	21,82	1,41	1,25	1,45
C18	PLS	0,7	0,59	0,49	11,18	12,99	12,48	1,81	1,56	1,62

Milch handelt. In vielen Publikationen wird der Anteil in verarbeiteter Milch mit etwa 1-2 % angegeben, womit dann auch feststeht, dass die entwickelte Forschungsmethodik durchaus eingesetzt werden könnte, um beispielsweise Qualitätsverluste während des Milchtransports messbar zu machen.

Im Vergleich der drei Jahre (Abbildung 1 & 2) fällt auf, dass insbesondere die mittelkettigen C8, C10 und C14 im Jahr 2020 mit dem sehr warmen und trockenen Frühjahr teils kleinere Konzentrationen hatten, die aber nur für den Fall von C8 signifikant waren. Weiterhin fällt auf, dass für die Jahresbetrachtung die Werte von 2021 für C8 und C10 signifikant höher waren. Generell fällt auf, dass die Mittelwerte von C8 und C10 von einem auf das andere Jahr am stärksten schwanken. C8 und C10 sind beide aus der Herkunft «de Novo» (= Synthese in der Milchdrüse) und haben eine mittellange Verkettung der Fettsäuren (MCFA = medium-chain fatty acids)

Die signifikanten Unterschiede beim Mittelwert zwischen den Monaten für die drei Jahre sind allerdings relativ hoch. Lediglich bei 15 von insgesamt 252 möglichen Kombinationen wiederholen sich ähnliche Situationen bei der Bewertung der Signifikanz in Relation zu den drei untersuchten Jahren.

Bei der Festlegung von möglichen Schwellenwerten wurde auf den Ansatz der Quantil-Bestimmung zurückgegriffen. Die Festlegung von Schwellenwerten mit Quantilen ist ein Verfahren, das in der Statistik und Datenanalyse verwendet wird, um Daten in Gruppen zu unterteilen. Quantile sind Bereiche in einer Verteilung, die eine bestimmte Anzahl von Beobachtungen enthalten. Schwellenwerte werden dann anhand dieser Quantile festgelegt, um Daten in Gruppen zu unterteilen. Im Zusammenhang mit dieser Analyse wurden zunächst Quantilstufen von 99 %, 97,5 % und 95 % festgelegt, um im Endeffekt die Konzentration bis zu diesen Gruppengrenzen zu bestimmen. Schließlich interessieren wir uns hier ja nur für die hohen, respektiv sehr hohen Werte und im Endeffekt um deren Häufigkeit. Basierend auf der vorliegenden Schwellenwertbewertung vom Jahr

2021, wobei die Werte von 2021 in etwa eine mittige Situation zwischen den beiden extremen Jahren 2019 und 2021 darstellen, wurde diagnostiziert, dass man vor allem in den vier Hauptwintermonaten insgesamt höhere Schwellenwerte bei der Konzentration feststellt. Im Endeffekt bedeutet dies, dass höhere Werte hier häufiger vorkommen und man bei der Festlegung von Grenz und Richtwerten im Optimalszenario wohl zwischen einer Winter und Sommersituation unterscheiden müsste.

Ein anderer Ansatz in diesem Zusammenhang ist natürlich die Relation zu Erfahrungswerten mit anderen schon bestehenden

**Tab. 2:** Die Praxis Bewertung der Entwicklungen vom Projekt ITF-Milk wurde an einem dreijährigen Datenpool der CONVIS MLP getestet. Die Tabelle enthält, basierend auf verwertbaren Spektren, die Anzahl Kühe und die Anzahl der jeweiligen Betriebe.

	2019		2020		2021	
	Anzahl Kühe	Anzahl Betriebe	Anzahl Kühe	Anzahl Betriebe	Anzahl Kühe	Anzahl Betriebe
Januar	34892	450	34447	427	27138	468
Februar	940	15	37479	431	29500	416
März	37279	448	32555	412	32192	425
April	37201	463	34540	410	31484	402
Mai	36365	450	37017	424	37129	450
Juni	32604	419	33220	412	24056	435
Juli	35512	441	30185	371	31214	447
August	33726	412	29602	407	23725	428
September	30928	394	31860	441	30254	389
Oktober	38370	451	35551	436	35890	427
November	34290	432	33271	440	31124	403
Dezember	33501	426	34028	439	36490	455
	385608		403755		370196	

**Tab. 3:** Durchschnittliche Konzentration und korrespondierende Anteile vom freien Anteil der verschiedenen Fettsäuren vom MLP Pool aus Luxemburg und der direkte Vergleich mit möglichen Konzentrationen nach der Milchverarbeitung laut Literaturwerten; De Novo = Synthese in der Milchdrüse, preformed = Synthese aus Futter und Körperfettabbau; mixed = Synthese in der Milchdrüse und aus Futter; SCFA = short-chain fatty acids; MCFA = medium-chain fatty acids; LCFA = long-chain fatty acid

		Herkunft	Verzweigungs Grad	Konzentration in normaler Milch			Konzentration vom freien Anteil		Konzentration vom freien Anteil	
				Literatur Quelle	Literatur Quelle	% vom Fett	mg/l	freier Anteil (%)	mg/l	freier Anteil (%)
C4	Buttersäure	de novo	SCFA	0,14	1.400	3,23	6,71	0,48	20,9	1,49
C6	Capronsäure	de novo	SCFA	0,08	800	1,85	5,93	0,74	7,7	0,96
C8	Caprylsäure	de novo	MCFA	0,05	500	1,15	4,26	0,85	4,5	0,90
C10	Caprinsäure	de novo	MCFA	0,10	1.000	2,31	6,24	0,62	15,1	1,51
C14	Myristinsäure	de novo	MCFA	0,37	3.700	8,55	8,32	0,22	27,8	0,75
C16	Palmitinsäure	mixed	LCFA	0,96	9.600	22,17	24,81	0,26	75,8	0,79
C18	Stearinsäure	preformed	LCFA	0,32	3.200	7,39	25,93	0,81	39,7	1,24

Abb. 1: Statistische Darstellung von 36 monatlichen Mittelwerten von Einzelkühen der Jahre 2019, 2020, 2021 (Einheit=mg/l)

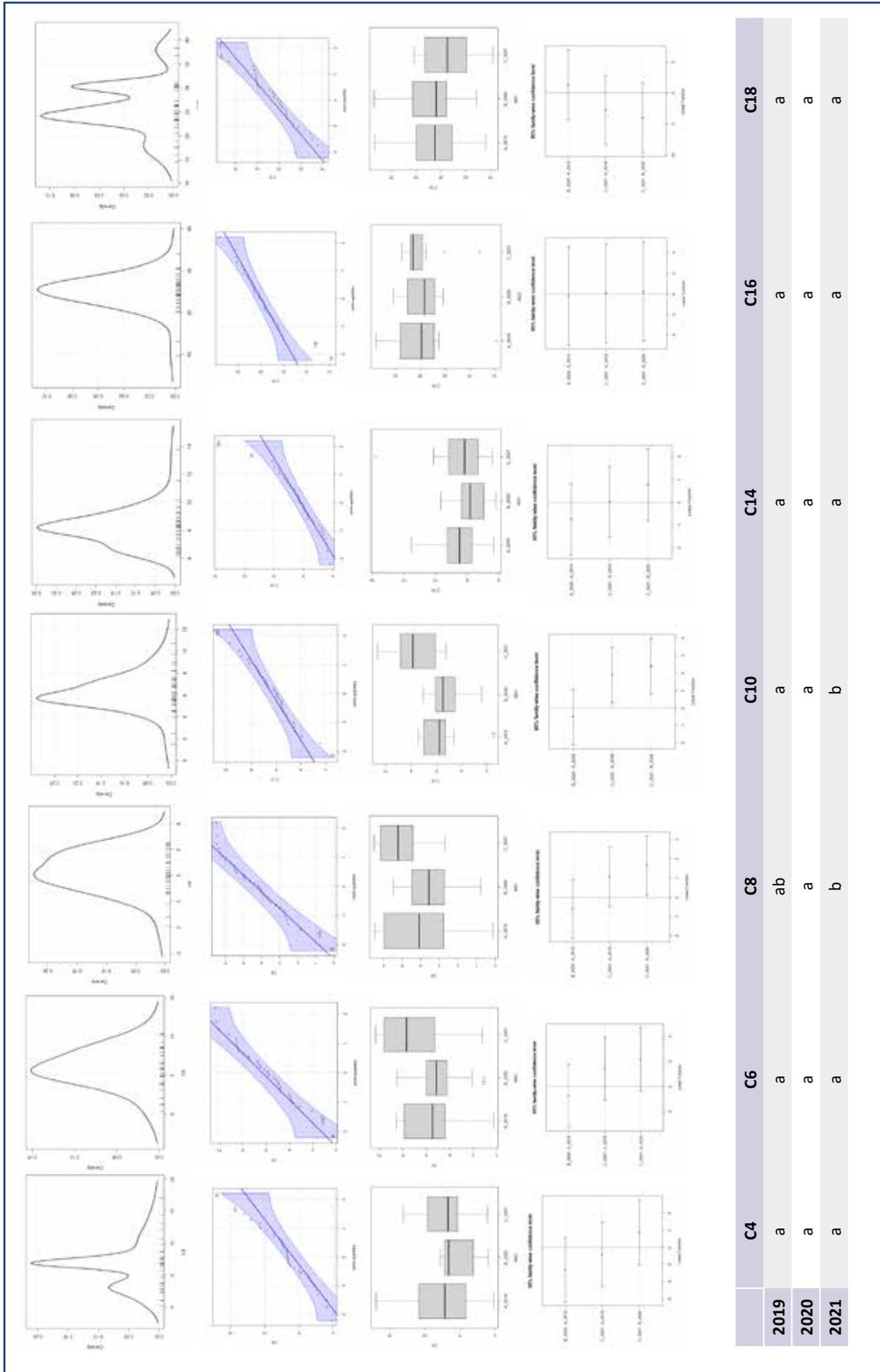
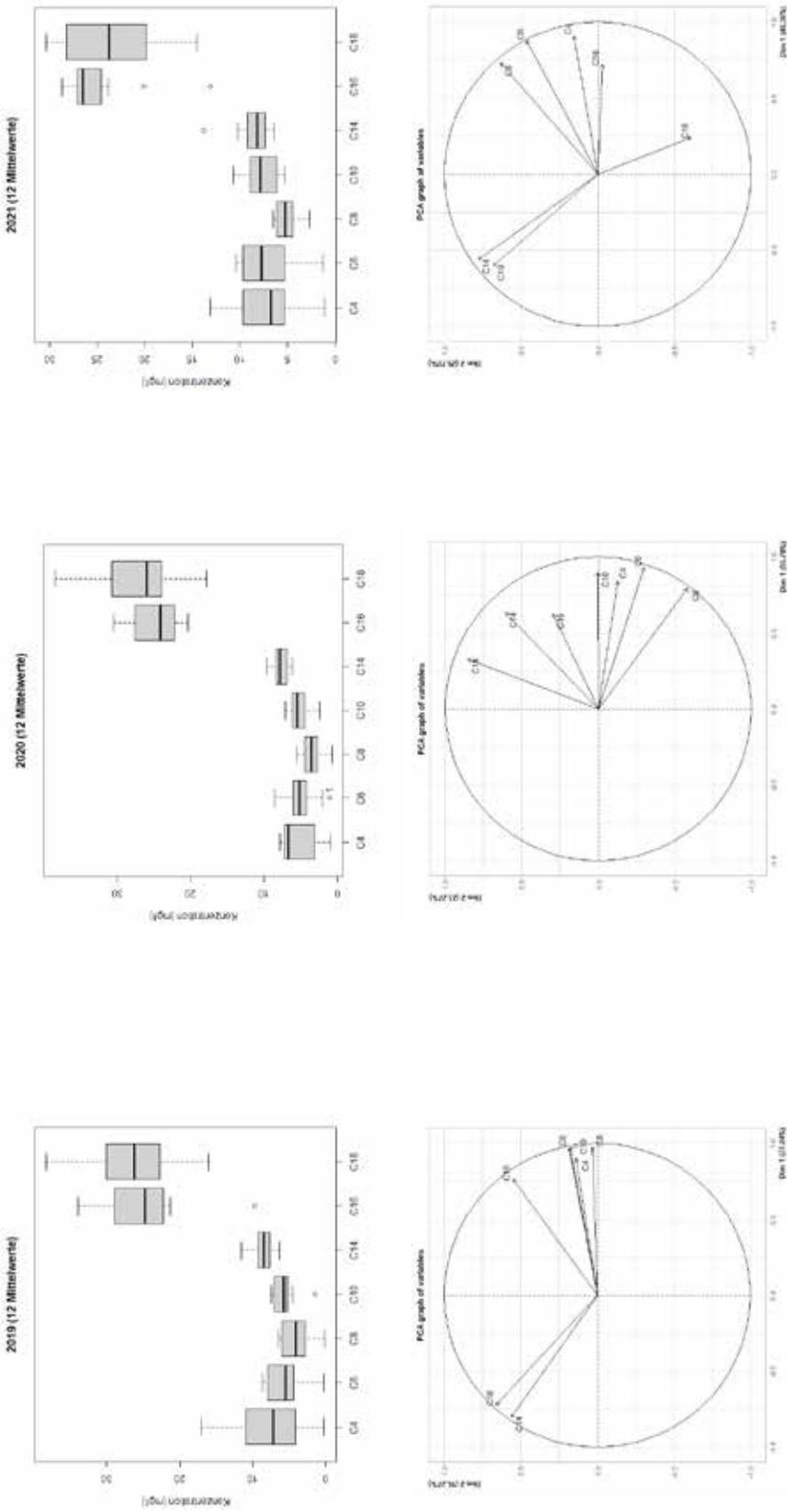


Abb. 2: Anova Analyse und die entsprechenden Korrelationskreise von Einzelkuhwerten zu den drei untersuchten Jahren

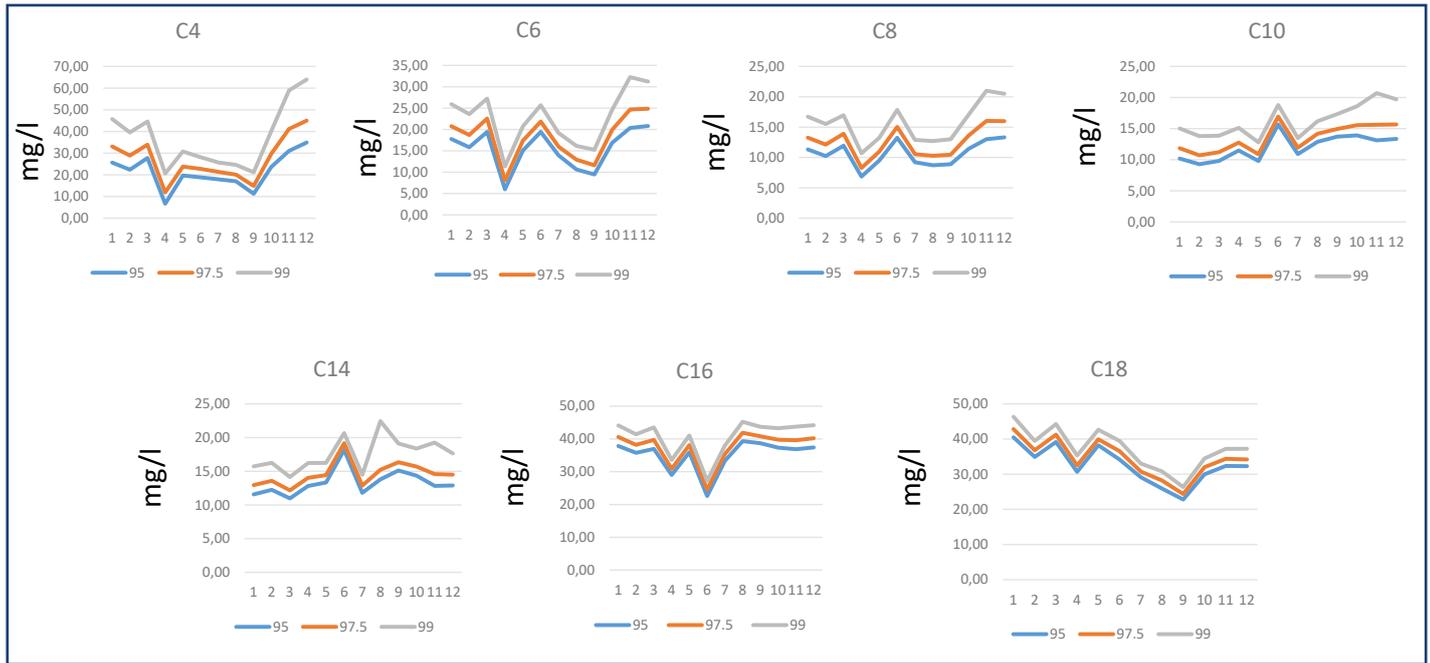


Jan 21	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a
Feb 21	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
Mär 21	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c
Apr 21	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d
Mai 21	b	e	b	e	b	e	ab	b	e	ab	b	e	c	c
Jun 21	e	f	e	f	e	f	e	f	e	f	e	f	e	e
Jul 21	f	g	f	g	f	g	f	g	f	g	f	g	f	f
Aug 21	g	h	g	h	g	h	g	h	g	h	g	h	g	g
Sep 21	h	i	h	i	h	i	h	i	h	i	h	i	h	h
Okt 21	i	g	a	j	h	h	h	h	i	g	a	j	h	i
Nov 21	c	j	i	k	j	i	k	j	i	k	j	i	k	j
Dez 21	j	j	j	j	j	j	j	j	j	j	j	j	j	d

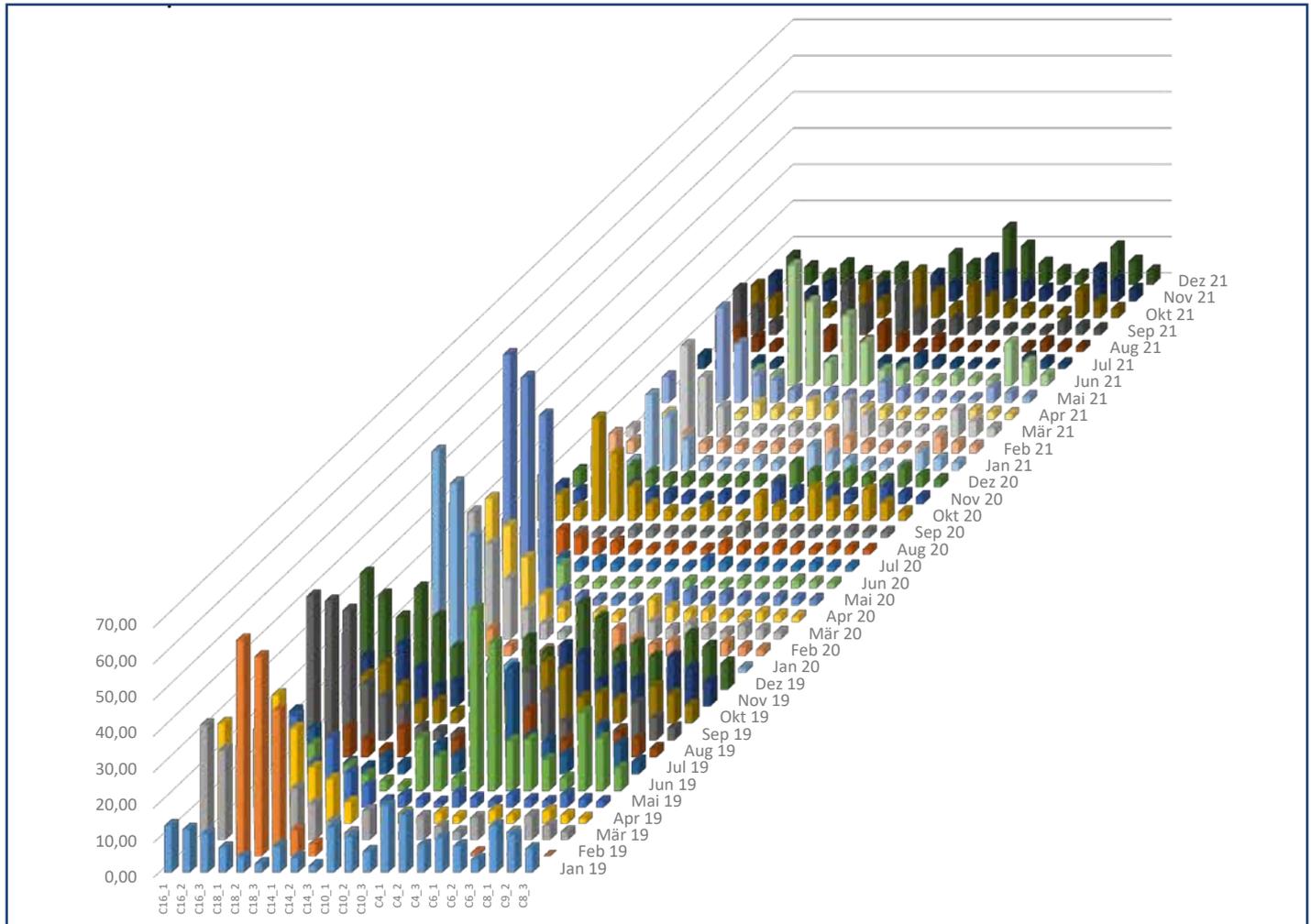
Jan 20	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a
Feb 20	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
Mär 20	c	c	c	c	c	c	cd	c	c	cd	c	c	c	c
Apr 20	d	b	d	d	d	d	e	d	e	d	e	d	e	d
Mai 20	be	d	e	e	f	e	f	e	f	e	f	e	f	e
Jun 20	f	e	e	e	f	g	h	f	g	h	f	g	h	f
Jul 20	g	f	c	f	g	h	h	f	g	h	f	g	h	f
Aug 20	h	g	f	g	e	i	g	h	e	i	g	h	e	g
Sep 20	i	h	g	h	h	j	j	h	h	j	h	h	j	h
Okt 20	d	i	h	i	i	k	i	d	i	k	i	k	i	i
Nov 20	b	j	i	j	g	cd	j	b	j	g	cd	j	b	j
Dez 20	e	k	j	k	j	d	j	e	k	j	d	j	e	k

Jan 19	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a
Feb 19	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
Mär 19	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c
Apr 19	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d
Mai 19	e	d	e	a	d	e	e	d	e	fg	e	e	f	g
Jun 19	f	e	f	h	f	e	f	e	f	h	e	f	h	g
Jul 19	g	g	h	g	a	g	f	g	h	g	a	g	f	g
Aug 19	h	h	g	a	g	h	h	g	h	g	a	g	h	g
Sep 19	i	i	h	c	h	g	i	i	h	c	h	g	i	i
Okt 19	j	j	i	a	i	h	j	j	i	a	i	h	j	j
Nov 19	k	k	e	f	j	c	j	k	e	f	j	c	j	k
Dez 19	i	k	j	g	i	g	i	k	j	g	i	g	i	k

**Abb. 3:** Bestimmung der Konzentration für die Schwellenwerte von den drei ausgewählten Quantilstufen 99 %, 97,5 % und 95 %; 12 Monate vom Jahr 2021



**Abb. 4:** Anzahl Kühe pro Betrieb über den Schwellenwerten für die drei Quantilstufen. Auffällig ist die deutlich bessere Situation 2020 (mit einem sehr trockenen Frühjahr und Sommer) im direkten Vergleich zu 2019 und 2021



**Tab. 4:** Hypothetische Korrespondenztabelle zwischen den FOSS Einheiten mmol/l Gesamtgehalt und den entsprechenden Konzentrationen der einzelnen freien Fettsäuren in den Einheiten vom Projekt ITF-Milk (mg/l)

Werte FOSS (mmol / l)	Werte FOSS (mmol/100g Fett)	korrespondierende Werte Projekt ITF-Milk [hypotetische Schätzkalkulation] (mg / l)						
alle Fettsäuren zusammen	alle Fettsäuren zusammen	C4	C6	C8	C10	C14	C16	C18
0,5	1,0	5,8	7,0	4,7	8,0	8,1	23,4	23,5
1,0	1,9	11,5	14,0	9,5	12,9	16,1	46,8	47,0
1,5	2,9	17,2	21,0	14,2	19,3	24,2	70,2	70,5
2,0	3,9	23,0	28,0	18,9	25,7	32,2	93,6	94,0

**Abb. 5:** Heat-MAP Diagramm mit der Anzahl von betroffenen Betrieben mit mindestens einer Kuh über den jeweiligen drei Quantilstufen

	C16_1	C16_2	C16_3	C18_1	C18_2	C18_3	C14_1	C14_2	C14_3	C10_1	C10_2	C10_3	C4_1	C4_2	C4_3	C6_1	C6_2	C6_3	C8_1	C9_2	C8_3
Jan 19	350	286	217	344	271	189	284	245	153	232	205	152	265	225	182	240	192	155	234	193	138
Feb 19	0	0	0	15	15	15	15	8	3	2	2	2	1	1	1	2	1	1	2	2	0
Mrz 19	399	388	368	423	410	368	345	280	155	356	304	181	267	200	125	349	282	180	352	288	185
Apr 19	304	298	279	423	406	364	351	283	155	235	178	108	158	97	48	224	161	80	217	153	85
Mai 19	341	307	264	345	301	244	206	162	102	179	128	70	151	106	62	216	151	82	209	152	80
Jun 19	363	341	295	292	255	190	157	120	82	287	238	169	287	257	219	308	260	187	300	264	207
Jul 19	193	169	142	263	199	152	239	185	123	205	179	136	210	162	134	208	165	116	208	178	136
Aug 19	207	159	120	273	229	168	275	219	138	169	150	102	140	106	67	185	128	78	170	123	94
Sep 19	160	145	125	154	141	108	202	170	126	225	200	149	237	178	112	271	213	130	308	257	175
Okt 19	323	257	187	393	367	313	297	258	180	215	188	143	230	174	116	250	185	136	251	205	151
Nov 19	418	399	364	372	351	297	327	292	196	329	285	214	230	174	116	370	318	238	354	312	232
Dez 19	407	398	371	402	388	362	343	297	189	286	261	214	362	307	239	350	294	229	319	274	218
Jan 20	270	196	124	427	425	423	293	232	145	157	130	97	139	121	88	122	95	75	121	96	59
Feb 20	216	162	117	382	340	274	249	202	133	193	154	107	258	207	134	231	185	111	225	173	108
Mrz 20	304	242	175	397	390	359	357	304	171	229	178	124	264	202	136	242	182	124	220	167	114
Apr 20	240	199	149	379	365	328	302	255	159	183	143	106	250	174	88	199	150	87	182	141	89
Mai 20	363	335	281	421	418	407	277	192	119	115	86	69	195	125	58	186	124	69	143	100	59
Jun 20	187	140	95	284	245	191	165	124	95	100	77	56	82	46	27	98	67	36	107	76	52
Jul 20	275	220	146	226	182	121	205	152	97	126	94	62	75	45	24	136	83	40	141	92	42
Aug 20	339	289	184	279	227	156	236	198	142	159	117	79	107	63	31	138	93	51	143	91	59
Sep 20	176	119	81	147	116	88	217	185	137	122	108	85	132	82	49	134	94	61	159	120	93
Okt 20	415	380	292	427	419	397	331	285	180	245	204	134	228	168	99	330	260	158	295	233	147
Nov 20	335	270	191	400	357	283	305	245	166	225	173	125	254	189	124	304	223	151	300	242	158
Dez 20	373	309	210	398	344	250	243	203	138	208	171	124	292	235	162	305	244	160	333	267	179
Jan 21	406	347	254	456	436	398	250	199	137	245	193	138	318	261	183	182	122	58	362	286	174
Feb 21	331	270	183	374	313	223	276	213	141	184	146	107	278	208	142	142	97	60	287	223	138
Mrz 21	255	337	255	422	413	384	204	158	106	214	174	123	349	287	193	219	153	82	367	311	210
Apr 21	96	59	34	229	174	112	270	204	121	230	164	101	92	70	48	61	39	21	124	92	56
Mai 21	338	267	168	445	416	357	304	229	134	180	133	84	248	166	75	111	73	39	251	182	106
Jun 21	23	18	14	311	245	167	415	397	293	370	309	197	164	104	42	170	109	57	280	244	160
Jul 21	227	155	80	170	109	70	187	142	92	196	136	76	218	102	37	94	67	37	228	158	93
Aug 21	334	290	195	51	38	24	280	220	118	265	200	111	120	61	26	74	43	22	183	124	73
Sep 21	333	284	215	64	58	43	316	271	184	320	266	169	65	43	23	87	53	35	191	141	82
Okt 21	349	305	216	152	114	74	339	297	193	348	293	212	260	192	130	189	132	81	307	253	188
Nov 21	350	314	234	298	253	164	286	249	186	326	281	221	326	283	212	260	195	121	360	315	256
Dez 21	418	374	285	299	243	175	319	268	184	372	313	225	396	336	261	269	215	135	399	355	264

gleichartigen Messmethoden wie z.B. der Ansatz der Firma FOSS, der z.B. auch im ASTA Milchlabor routinemäßig durchgeführt wird. Das Problem mit dieser Methode liegt darin, dass die verschiedenen Fettsäuren nicht einzeln, sondern alle zusammen als Pool in der Einheit mmol/l bestimmt werden. Die beiden Methoden sind daher nicht direkt vergleichbar. Im Rahmen von ITF-Milk konnte nun aufgrund der vorliegenden Datenbasis ein Umrechnungsverfahren aufgebaut werden, das auf einer stöchiometrischen Verhältniskalkulation basierend auf den Ergebnissen der ersten 250 Referenzproben aufbaut. Diese Proben wurden von sechs EMR (European Milk recording) Partnern aus Belgien, Frankreich, Deutschland, Österreich und Luxemburg ohne weitere labortechnische Zwischenmanipulationen direkt aus dem Stall nach Luxemburg zum LIST in Belvaux geliefert. Das prozentuale Vorkommen vom freien Anteil jeder Fettsäure in diesen Proben bildet die Basis zur Umrechnung. Tabelle 4 zeigt die korrespondierenden Werte vom Projekt ITF-Milk. Laut Erfahrungsberichten, insbesondere aus Literaturberichten aus Frankreich (Methode «savon de cuivre» MSC) und den USA (Methode BDI, Bureau of Dairy Industries), beginnt die kritische Phase ab einer Konzentration von ca. 1 mmol/l. Literaturwerte von verarbeiteter Milch stammen von Veröffentlichungen vom Department of Food Science and Technology der Oregon State University, Corvallis.

Zusammenfassend kann man zum aktuelle Zeitpunkt festhalten, dass die entwickelte Methodik im Vergleich mit weiteren Veröffentlichungen sehr logische Resultate liefert. Ohne den zunächst nicht vorgesehenen Einsatz von Modellierungstechniken aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz wären diese Resultate allerdings nie zustande gekommen. Man kann festhalten, dass in den letzten fünf Jahren in den Bereichen «machine learning» und «deep learning» enorme Fortschritte gemacht worden sind und diese Techniken sehr oft bis dato für unmöglich gehaltene Anwendungen nun ermöglichen. Man wird in Zukunft zweifelsohne noch viel davon hören. Man geht jetzt davon aus, dass die Entwicklungen vom Projekt ITF-Milk erstmals im Rahmen vom laufenden Interreg NWE Projekt HoliCow zeitnah für Pilotbetriebe in der Praxis angewendet werden.

