

**Untersuchung von Roggen
mittels Fluoreszenz-Anregungs-Spektroskopie**

31.10.2008

Auftraggeber: Dr. Karl Josef Müller
Darzau Hof
D-29490 Neu Darchau

Durchführung: KWALIS Qualitätsforschung Fulda GmbH
Fuldaer Str. 21
D-36160 Dipperz

Berichts-Nr.: P 81031-1

Berichtsdatum: 31.10.2008

Bearbeiter: Dr. J. Strube

Inhalt

1	Material	3
2	Untersuchungsmethode	3
2.1	Untersuchungsprinzip der FAS	3
2.2	Gerät.....	4
2.3	Untersuchungsmethode	4
2.4	Probenvorbereitung.....	5
2.5	Proben und Messwiederholungen.....	6
2.6	Statistik.....	6
3	Ergebnisse	6
3.1	Vorbemerkungen	6
3.1.1	Grafische Darstellung und Statistik.....	6
3.2	Bewertung mittels empirischer Bewertungsfunktion.....	7
3.2.1	Standorte.....	8
3.2.2	Proben.....	9
3.3	Bewertung unter dem Kriterium der Unterscheidung zwischen Populationssorten und Hybriden.	11
3.3.1	Standorte.....	11
3.3.2	Sorten.....	11
4	Zusammenfassung.....	14
5	Literatur.....	15

1 Material

Roggen:	10 Sorten	10 Sorten	10 Sorten
Probeneingang:	04.08.2008	18.08.2008	21.08.2008
Erntejahr:	2008	2008	2008
Probencodierung:	01 bis 10	01 bis 10	01 bis 10
Herkunft:	Dottenfelder Hof	Darzac Hof	Hof Höllwangen
Ort:	Bad Vilbel	Neu Darchau	Überlingen
Menge:	je 200g	je 300g	je 200g

Nach Vorliegen der Messergebnisse und deren erster Übersichtsdarstellung wurden die Proben zunächst nach Sortentypen (Population, Hybride, Synthetic) decodiert und erst am Schluss nach Sortenbezeichnungen.

Auflösung der Chiffrierung der Roggenproben

1 Amilo	Population	1992
2 Lichtkorn	Müller-Darzac	
3 Hellvus	Hybride	2007
4 Carotop	Synthetic	2002
5 Rolipa	Heyden-Salem	
6 Visello	Hybride	2006
7 Recrut	Population	2002
8 Firmament	Spieß-Dottenfelderhof	
9 Ascari	Hybride	2003
10 Danko	Population	1980

2 Untersuchungsmethode

Die Proben wurden mittels Fluoreszenz-Anregungs-Spektroskopie untersucht.

2.1 Untersuchungsprinzip der FAS

Der Grundgedanke des angewandten Verfahrens besteht darin, Veränderungen des zeitabhängigen optischen Spektrums, das am Untersuchungsgut (Proben) gemessen wird, mit bekannten Einflussfaktoren in Beziehung zu setzen.

Die Untersuchung erfolgte mittels Fluoreszenz-Anregungs-Spektroskopie (FAS). Die Methode beruht auf der Tatsache, dass pflanzliche Proben nach Anregung durch Licht langfristig fluoreszieren, d.h. Licht niedrigerer Energie (größerer Wellenlänge) im Vergleich zur Anregung emittieren. Diese Emission (auch als verzögerte Lumineszenz bezeichnet) nimmt mit der Zeit ab, wobei die Abklingzeit durch die Probenart bedingt ist. Grundsätzlich hängen Intensität und Zeitverlauf der breitbandig (260 nm – 850 nm) gemessenen Emission vom Spektralbereich der Anregung und von der Probenart ab. Zur Messung von Spektren erfolgt die optische Anregung sequentiell in 7 verschiedenen spektralen Abschnitten des sichtbaren Bereichs und im nahen UV (780 nm bis 360 nm). Die spektralen Abschnitte für die Anregung ergeben sich durch Filterung mit Standard-Farbggläsern aus einer Weißlichtquelle mit Halogenlampe. Entsprechend entstehen Anregungsbandbreiten von ≥ 100 nm, je nach Filter. Wird die

Emission in Abhängigkeit vom anregenden Spektralbereich dargestellt, so ergeben sich Spektren die zeigen, in welchem Ausmaß der jeweilig anregende Spektralabschnitt auf die Messgröße wirkt (Strube *et al.* 2004). Als Bewertungsgrößen für die Proben wurden aus den gemessenen Spektren geeignete abgeleitete Messgrößen gebildet.

2.2 Gerät

Fluoreszenzmessgerät mit Photovervielfacher 9202QA (EMI); Single-Photon-Counting mit Thorn EMI Amplifier Discriminator C604-A und Data Translation DT2819 Counting Board, Hochspannungsversorgung mit Thorn EMI PM28B, Anregung mit Halogen-Glühlampe Pel=150W, Spektralbereiche durch Schott-Standard-Farbglassfilter, PM-Kühlung mit Peltierelementen von Melcor, Rückkühlung und Thermostatisierung mit Wasserumlaufkühler WKL1200, Lauda Dr. R. Wobser GmbH & Co. KG, Lauda-Königshofen.

2.3 Untersuchungsmethode

Zur Messung befindet sich die Probe in einer lichtdichten Messkammer. Das Licht einer externen Quelle gelangt durch einen Verschluss zur Probe. Die Messung des verzögert emittierten Lichts erfolgt mittels Photovervielfacher. Die optische Anregung erfolgt mit konstanter Helligkeit für eine definierte Zeit (Anregungsphase).

Eine Messphase umfasst 100 einzelne Messwerte. Bei 10 Sekunden Messdauer wird ein Messwert je 0,1 Sekunde erfasst. Je Messsequenz erfolgen 8 Messphasen mit unterschiedlichem Spektralbereich der optischen Anregung, d.h. es ergeben sich 8 x 100 primäre Messwerte.

Aus den primären Messwerten werden primäre und sekundäre Messgrößen errechnet. Die primären Messgrößen Anfangsintensität (Mw1) und mittlere Intensität während der Sekunden 6 bis 10 (R40) zeigt die Abb. 1. Vergleichbar zu R40 erfasst die in dieser Abbildung nicht gekennzeichnete Messgröße R80 den Zeitraum von Sekunde 2 bis 10.

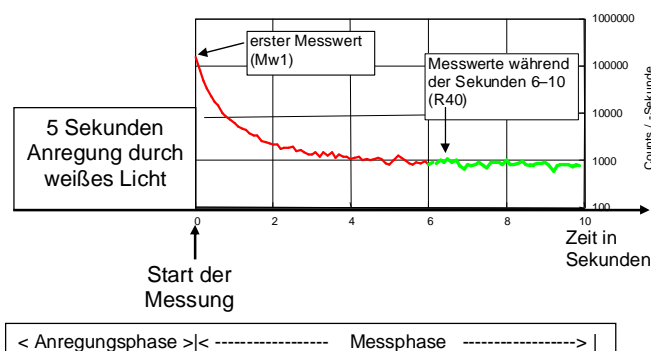


Abb. 1: Zeitschema der Messung. Nach der Anregungsphase ergibt sich ein abklingender Intensitätsverlauf der Emission. Die Zuordnung der im Text verwendeten Kurzbezeichnungen Mw1 und R40 ist angegeben.

Generell ergeben sich diese primären Messgrößen für jede der 8 optischen Anregungen. Zur Unterscheidung werden sie entsprechend der Anregungsfarbe mit Mw1dr (dunkelrot) bis Mw1w (weiß) bezeichnet. Entsprechendes gilt für R40dr bis R40w bzw. R80dr bis R80w. Sekundäre Messgrößen erfassen die Kurvenkrümmung, das Verhältnis von anfänglicher zu späterer Emission sowie weitere Eigenschaften. Insgesamt stehen im Messdatenvektor 156 primäre und sekundäre Messgrößen zur Verfügung.

Die Daten jeder einzelnen Messung werden zum einen so wie sie entstehen als Rohdaten abgespeichert und zum anderen in aufbereiteter Form als Datenvektor. Der Datenvektor aufbereiteter Daten wird Grundlage der Probenbewertung. Er wird deshalb auch als Evaluationsdatenvektor bezeichnet. In diesen Datenvektor gehen zum einen speziell ausgewählte Daten ein, die den direkt gemessenen Werten der 8 Intensitätsverläufe einer einzelnen Messung entnommen werden (Daten erster Ordnung). Zusätzlich werden aus den gemessenen Werten weitere Daten berechnet, die Messgrößen von Eigenschaften der gemessenen Daten darstellen (Messdaten zweiter Ordnung). Nachfolgend wird die Auswahl und Bezeichnung der Elemente des Evaluationsdatenvektors beispielhaft erläutert.

Als Kurzzeitemission wird die Emissionsintensität im ersten Messintervall (Mw1) nach der Anregung bezeichnet. Die 8 Kurzzeitemissionen nach den Anregungen durch Dunkelrot, Rot, Hellrot, Gelb, Grün, Blau, UV und Weiß werden mit Mw1dr, Mw1r, Mw1hr, Mw1ge, Mw1gr, Mw1bl und Mw1w abgekürzt und bilden 8 Elemente des Datenvektors. Ein ähnliche Gruppe von Werten existiert für die Langzeitemissionen (R40; Sekunde 6 – 10; siehe Abb. 1), wobei an R40 wiederum entsprechend die jeweilige Anregungsfarbe angehängt wird, bei Gelb z.B. R40ge. Die 8 Langzeitemissionen sind ebenfalls Elemente des Datenvektors.

Als Messgrößen zweiter Ordnung sind im Datenvektor u. a. die Verhältnisse zweier Langzeitemissionen enthalten. Ein Beispiel ist der Quotient $R40ge/R40bl$, der kürzer mit $R40ge/bl$ bezeichnet wird. Generell werden bei den Quotienten als Bezugsgrößen $R40w$ und $R40bl$ verwendet. Es existieren daher zwei Serien von je 7 Quotienten, die mit $R40dr/w$ bis $R40bl/w$ und $R40dr/bl$ bis $R40w/bl$ bezeichnet werden. Die Krümmung der abklingenden Intensitätskurve der Emission während der ersten 50 Datenpunkte (erste 5 Sekunden) wird durch eine Größe bewertet, die als Quotient einer exponentiellen und einer hyperbolischen Chi-Quadrat Kurvenanpassung errechnet wird. Diese Größe wird als $ChiEH50$ bezeichnet. Die 8 Größen $ChiEH50dr$ bis $ChiEH50w$ bilden weitere Elemente des Evaluationsdatenvektors. Insgesamt wird so ein Vektor mit 156 Größen für jede einzelne Messung generiert. Zusätzlich werden in diesem Vektor Datum und Zeitpunkt der Messung sowie weitere Geräte- und Umweltdaten erfasst.

2.4 Probenvorbereitung

Trocknung über Silicagel und Äquilibrierung in gemeinsamer Atmosphäre.

2.5 Proben und Messwiederholungen

Je Probe wurden 6 Teilproben (ca. 28 g) getrocknet und davon jeweils dreimal 20 ml (ca. 18 g) in einer Suprasil-Küvette gemessen.

2.6 Statistik

Bei der Lumineszenz-Messung ergeben sich 156 Messgrößen. Die einzelnen Messgrößen reagieren in unterschiedlichem Ausmaß auf die Probeneigenschaften. Eine Messgröße reagiert zumeist auf mehrere Eigenschaften zugleich, dabei im allgemeinen auf eine stärker, auf andere schwächer. Für eine Arbeitsfrage sind die Messgrößen auszuwählen, die auf die fragliche Eigenschaft am ausgeprägtesten reagieren.

Für eine gegebene Untersuchungsfrage werden die trennenden Messgrößen gegebenenfalls mittels Diskriminanzanalyse bestimmt und bei Bedarf eine trennscharfe Diskriminanzfunktion (Linearkombination von Messgrößen) errechnet. Diese Bestimmung kann man als Training des Verfahrens an bekannten Proben bezeichnen (retrospektive Datenauswertung). Ist eine geeignete Diskriminanzfunktion bestimmt, lassen sich gegebenenfalls unbekannte Proben mittels dieser Diskriminanzfunktion klassifizieren (prospektive Datenauswertung).

Zur Auswertung der Messdaten werden ggf. folgende Verfahren eingesetzt:

- einfaktorielle und/oder mehrfaktorielle Varianzanalyse
- Diskriminanzanalyse, ggf. mit Berechnung von kanonischen Variablen und deren Varianzanalyse

Verwendete Statistikprogramme: JMP 6 und Statistica 8

3 Ergebnisse

3.1 Vorbemerkungen

3.1.1 Grafische Darstellung und Statistik

In Grafiken sind alle Messwerte einzeln als Messpunkte dargestellt. Messpunkte gleichen Wertes liegen aufeinander. Der Strich im Rechteck kennzeichnet den Medianwert. Die Rechtecke reichen von 25. bis zum 75. Quantil. Dieser Interquartil-Bereich umfasst 50 % aller Datenpunkte. Die Toleranzbalken (Whisker) reichen vom Rechteck bis zu den jeweils äußersten Datenpunkten, die innerhalb des Bereichs vom oberen Quartil + 1.5*(Interquartil-Bereich) zum unteren Quartil - 1.5*(Interquartil-Bereich) liegen. Datenpunkte außerhalb dieses Bereichs sind möglicherweise Ausreißer.

Die Rautendiagonalen kennzeichnen den Mittelwert der Probe und die Rautenhöhe den 95 % Vertrauensbereich des Mittelwertes bei der Varianzanalyse unter der Annahme gleicher Varianzen der Proben.

Die statistischen Angaben kennzeichnen, wenn nichts anderes angegeben ist, die bei der Messung der vorliegenden Proben durch Probenwiederholungen erreichte Sicherheit. Es wurde mit $n=18$, d.h. 18 Probenwiederholungen je Probe und Standort gearbeitet. Proben aus Versuchswiederholungen lagen nicht vor.

3.2 Bewertung mittels empirischer Bewertungsfunktion

Sortenuntersuchungen an Roggen wurden zuvor zweimal durchgeführt. Es handelte sich um Populations- und Hybridsorten. Jedoch war die Technik bei Messung und Auswertung seinerzeit noch nicht so ausgefeilt wie heute, so dass sie gegenwärtig nur einen Anhaltspunkt darstellen können.

Je nach Anbaujahr reagieren die FAS-Messgrößen unterschiedlich stark auf Sortenunterschiede. Unter den insgesamt zur Verfügung stehenden Messgrößen zeigten bei Samen die Größen der Tab. 1 die dargestellten Tendenzen. Welche Größe dabei die treffendsten Unterschiede aufweist, wechselt von Jahr zu Jahr. Vermutlich hängt dies mit jährlichen meteorologischen Besonderheiten zusammen. Eine Kombination der Größen ist nicht immer die trennschärfste, aber bei unbekanntem Verhältnissen eine relativ zuverlässige Möglichkeit der Bewertung.

Tab. 1: Typische Tendenz ausgewählter Elemente des Datenvektors bei Weizen.

Messgröße	Tendenz	
	samentypisch (ökologisch)	vegetativ (konventionell)
R40ge/bl	niedrig	hoch
Mw1w	hoch	niedrig
R40w	niedrig	hoch
ChiE/H50w	niedrig	hoch
Mw1/R40w	hoch	niedrig

Zur Bewertung wird eine ungewichtete Linearkombination aus den Messgrößen der Tab. 1 gebildet (Bewertungsfunktion). Dadurch lässt sich die Darstellung auf einen Zahlenwert reduzieren. Dieses Verfahren wurde als Index der samentypischen Ausprägung bereits beschrieben (Strube 2005). Die Messgrößen wurden zunächst normalisiert und die Bewertungsfunktion als $BWF = (Mw1w - R40w - R40ge/bl - ChiH50w + Mw1/R40w) / 5$ berechnet. Anzumerken ist, dass eine solche Bewertungsfunktion bislang mit Weizen erprobt wurde, jedoch noch nicht mit Hybridsorten.

Die Bewertung würde vermutlich wesentlich zuverlässiger, wenn zunächst ein Probenensemble mit bekannten Eigenschaften zur Verfügung stünde. Auf Basis eines solchen Lern-Datensatzes kann dann die Bewertungsfunktion mittels

Diskriminanzanalyse unter Verwendung sämtlicher FAS-Messgrößen errechnet werden. Mit einer solchen empirischen Bewertungsfunktion kann dann eine prospektive Bewertung recht zuverlässig erfolgen (Strube *et al.* 2007).

Im vorliegenden Fall bietet sich an, eine Nachauswertung nach Dekodierung durchzuführen um zu sehen, ob sich dadurch ergänzende Aufschlüsse ergeben.

3.2.1 Standorte

Zunächst wird dargestellt, welche Reihenfolge sich für die Standorte im Mittel aller Sorten bei der verwendeten Bewertungsfunktion ergibt.

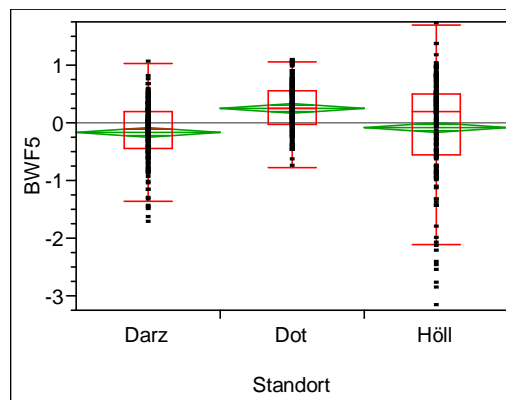


Abb. 2: Ergebnis der Bewertungsfunktion für die drei Standorte im Mittel über sämtliche untersuchten Proben. Die deutlichste samentypische Ausprägung (hoher Zahlenwert) liefert danach der Standort Dottenfelderhof. Höllwangen ergibt einen etwas höheren Mittelwert als Darzau, jedoch ohne signifikanten Unterschied. Auffällig ist die große Streuung bei Höllwangen.

Tab. 2: Statistische Daten zur Abb. 2

Oneway Anova Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio	Prob > F
Standort	2	17,59791	8,79895	22,3868	<,0001
Error	537	211,06384	0,39304		
C. Total	539	228,66175			

Means for Oneway Anova

Level	Number	Mean	Std Error	Lower 95%	Upper 95%
Darz	180	-0,16886	0,04673	-0,2607	-0,0771
Dot	180	0,25025	0,04673	0,1585	0,3420
Höll	180	-0,08139	0,04673	-0,1732	0,0104

Std Error uses a pooled estimate of error variance

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level	Mean
Dot	A 0,2502539
Höll	B -0,0813910
Darz	B -0,1688629

Levels not connected by same letter are significantly different.

Zusammenfassung: Der Standort Dottenfelderhof ist nach den Daten als der samentypischer anzusehen.

3.2.2 Proben

Im Mittel über alle Standorte erscheint die Sorte 01 als die samentypischste, die Sorte 04 als vegetativste.

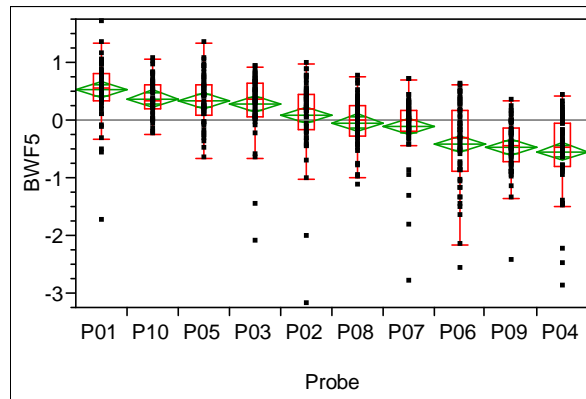


Abb. 3: Ergebnis der Bewertungsfunktion für die Proben 1 -10 gemittelt über die drei Standorte. Die deutlichste samentypische Ausprägung (hoher Zahlenwert) ergab danach die Probe 1.

Tab. 3: Statistische Daten zur Abb. 3

Oneway Anova Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Ratio	Prob > F
Probe	9	70,80483	7,86720	26,4139	<,0001
Error	530	157,85692	0,29784		
C. Total	539	228,66175			

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level	Mean
P01	0,5210062
P10	0,3743409
P05	0,3361143
P03	0,2739502
P02	0,0809037
P08	-0,0431354
P07	-0,1124572
P06	-0,4176625
P09	-0,4680575
P04	-0,5450027

Levels not connected by same letter are significantly different.

Bei zweifaktorieller Anova ergibt sich:

LSMeans Differences Tukey HSD

$\alpha=0,050$ $Q=3,17733$

Level	Least Sq Mean
P01	0,5210062
P10	0,3743409
P05	0,3361143
P03	0,2739502
P02	0,0809037
P08	-0,0431354
P07	-0,1124572
P06	-0,4176625
P09	-0,4680575
P04	-0,5450027

Levels not connected by same letter are significantly different.

Die zweifaktorielle Anova (unterer Datensatz in

Tab. 3) liefert weniger signifikant unterschiedliche Proben Gruppen. Dies ist jedoch von geringer Bedeutung, da es sich ohnehin um Probenwiederholungen handelt, deren Anzahl nur durch die Probenmenge und die Laborkapazität begrenzt ist.

Die Ergebnisse getrennt nach Standorten enthält die Abb. 4. Diese Berechnung erfolgte mittels zweifaktorieller ANOVA.

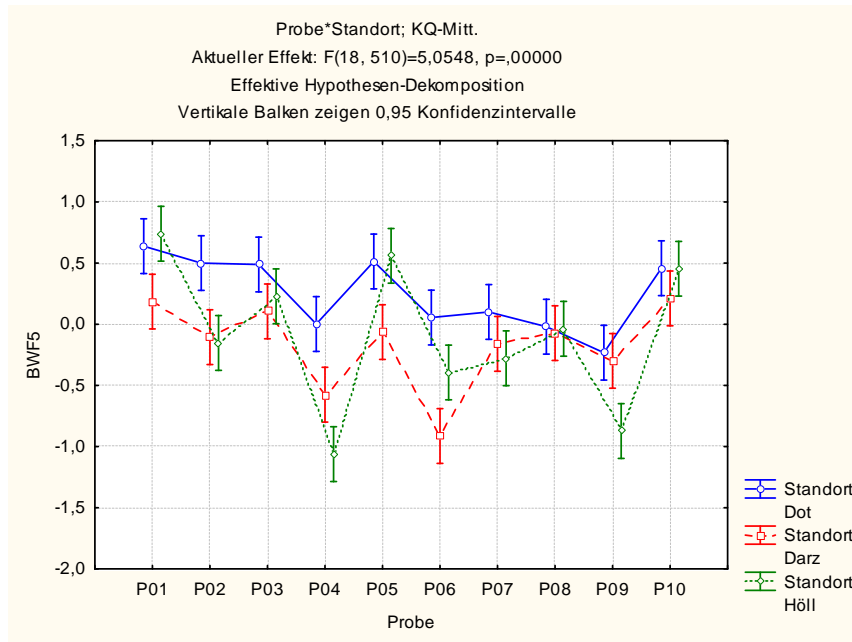


Abb. 4: Die Ergebnisse der Proben getrennt nach Standorten.

Die gleichen Ergebnisse, jedoch als Veränderung mit dem Standort dargestellt, enthält Abb. 5.

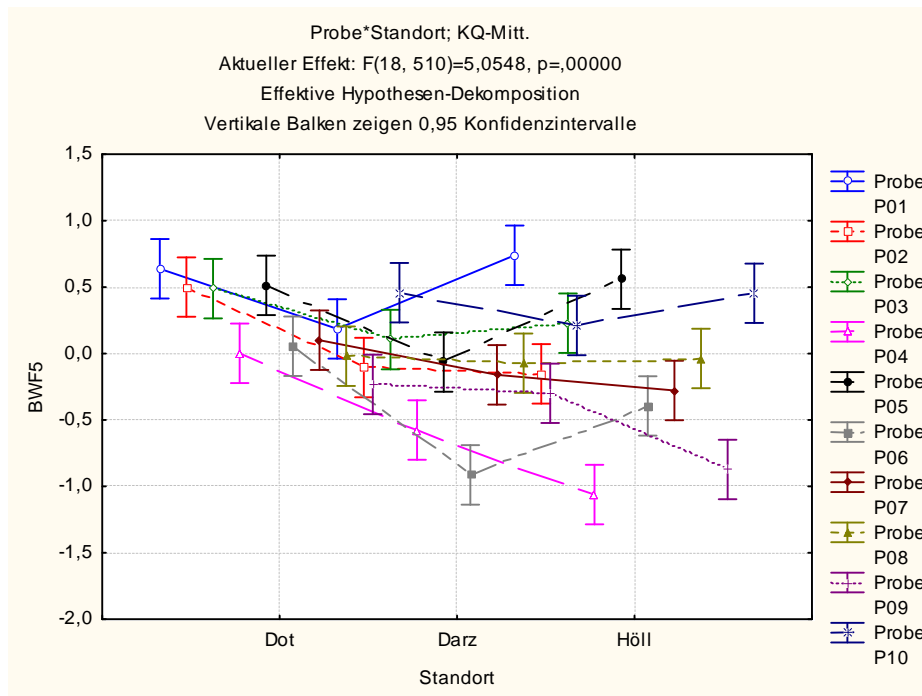


Abb. 5: Die Veränderung der Ergebnisse in Abhängigkeit vom Standort.

3.3 Bewertung unter dem Kriterium der Unterscheidung zwischen Populationssorten und Hybriden.

Unter Verwendung der Typisierung nach Populations- und Hybridsorten (unter Zuordnung einer synthetischen Sorte zu den Hybriden) wurde eine neue Bewertungsfunktion errechnet. Zielkriterium dafür war ausschließlich, die beiden Sortentypen möglichst gut zu trennen. Mit der so erhaltenen Bewertungsfunktion (Canon16) wurden Rangfolgen der Proben als Mittel über alle Standorte sowie für jeden der drei Standorte berechnet.

3.3.1 Standorte

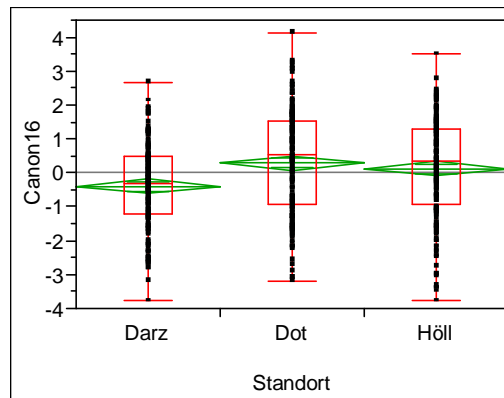


Abb. 6: Ergebnis der Bewertungsfunktion für die drei Standorte. Die Rangfolge ist die gleiche wie bei Abb. 2, jedoch ist der Standort Höllwangen dichter an den Dottenfelderhof gerückt. Die Ähnlichkeit des Ergebnisses lässt darauf schließen, dass diese Bewertungsfunktion ähnliche Probeneigenschaften erfasst.

Oneway Anova Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level		Mean
Dot	A	0,2907922
Höll	A	0,1137060
Darz	B	-0,4044982

Levels not connected by same letter are significantly different.

3.3.2 Sorten

Die Proben wurden mit folgenden Anfangsbuchstaben gekennzeichnet:

- P = Populationssorte
- Ö = Ökozüchtung
- H = Hybride
- S = Synthetic

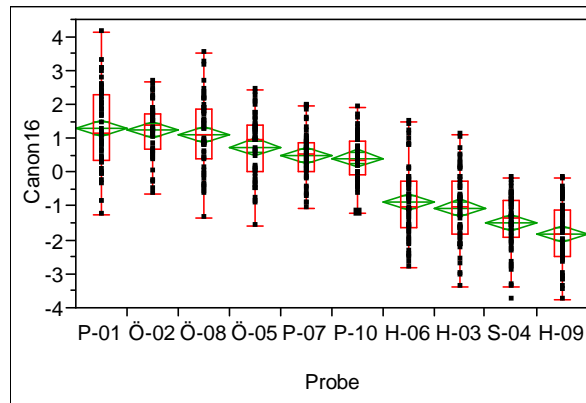


Abb. 7: Rangfolge der Proben im Mittel über alle Standorte. Hybrid- u. Synthetic-Sorten erscheinen rechts. Der Unterschied zwischen der Populationsorte 01 und den Ökosorten 02 u. 08 ist statistisch unbedeutend.

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level		Mean
P-01	A	1,286316
Ö-02	A	1,250155
Ö-08	A	1,102269
Ö-05	A B	0,744469
P-07	B	0,486655
P-10	B	0,404727
H-06	C	-0,880594
H-03	C D	-1,060843
S-04	D E	-1,497579
H-09	E	-1,835574

Levels not connected by same letter are significantly different.

3.3.2.1 Standort Darzau

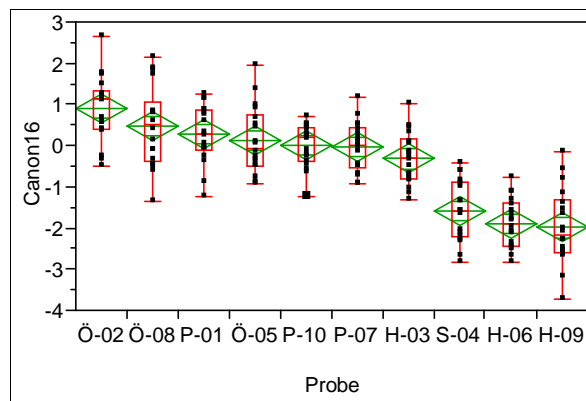


Abb. 8: Rangfolge der Proben am Standort Darzau. Hier hebt sich die Sorte 02 von den anderen etwas ab.

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level		Mean
Ö-02	A	0,903424
Ö-08	A B	0,466043
P-01	A B	0,280469
Ö-05	A B	0,117292
P-10	B	0,007442
P-07	B	-0,028953
H-03	B	-0,313771
S-04	C	-1,586696
H-06	C	-1,901428
H-09	C	-1,988806

Levels not connected by same letter are significantly different.

3.3.2.2 Standort Dottenfelderhof

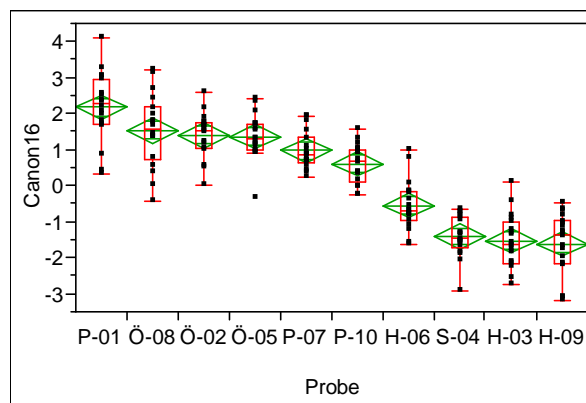


Abb. 9: Rangfolge der Proben am Standort Dottenfelderhof.

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level	Mean
P-01 A	2,173243
Ö-08 A B	1,525628
Ö-02 A B	1,395984
Ö-05 B C	1,358190
P-07 B C	0,969011
P-10 C	0,600612
H-06 D	-0,553835
S-04 E	-1,410929
H-03 E	-1,534054
H-09 E	-1,615927

Levels not connected by same letter are significantly different.

3.3.2.3 Standort Höllwangen

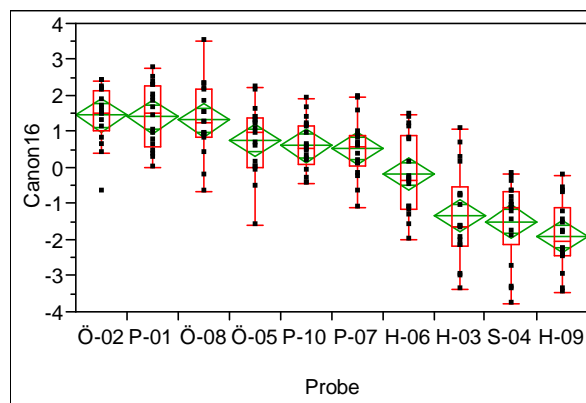


Abb. 10: Rangfolge der Proben am Standort Höllwangen.

Means Comparisons for all pairs using Tukey-Kramer HSD

Level	Mean
Ö-02 A	1,451058
P-01 A	1,405237
Ö-08 A	1,315134
Ö-05 A B	0,757925
P-10 A B	0,606126
P-07 A B	0,519905
H-06 B	-0,186519
H-03 C	-1,334705
S-04 C	-1,495111
H-09 C	-1,901990

Levels not connected by same letter are significantly different.

4 Zusammenfassung

Mittels FAS ließen sich die Proben wie auch die Standorte unterscheiden. Die angewandte allgemeine Bewertungsfunktion für samentypische Ausprägung lieferte eine Reihenfolge für die Proben und die Standorte.

Es lag kein Daten- oder Probensatz für Roggen zum Training der Bewertungsfunktion vor. Mit einem solchen Satz ließen sich wahrscheinlich treffsicherere Bewertungen berechnen. Im vorliegenden Fall konnte dies nur durch Nachauswertung nach Teil-Dekodierung von Typen (z.B. samenfest u. hybrid) erfolgen.

Nach Dekodierung der Proben hinsichtlich Populations- und Hybridsorten (unter Zuordnung einer synthetischen Sorte zu den Hybriden) wurde deutlich, dass die zunächst verwendete empirische Bewertungsfunktion bereits drei der vier Hybridsorten in der Rangfolge als vegetativste einstufte, eine jedoch inmitten der Populationssorten. Die Bewertungsfunktion erfasste offensichtlich nicht alle vorkommenden Variationen von Hybriden richtig.

Unter Verwendung der Typisierung nach Populations- und Hybridsorten wurde eine neue Bewertungsfunktion errechnet. Diese kombinierte weitere FAS-Messgrößen. Ausschließliches Zielkriterium war, die beiden Sortentypen möglichst gut zu trennen. Mit der so erhaltenen Bewertungsfunktion wurden Rangfolgen der Proben für jeden der drei Standorte berechnet. Ob eine solche Trennfunktion jedoch zugleich eine angemessene allgemeine Bewertungsfunktion darstellt blieb zunächst offen. Die Beurteilung durch Karl-Josef Müller ergab, dass die durch die Bewertungsfunktion gegebene Rangordnung mit auf andere Weise gewonnenen Beurteilungen Gemeinsamkeiten aufwies.

Die bisher verwendete eindimensionale Gruppierung in samentypisch und vegetativ reichte zwar für die Unterscheidung zwischen organischem und konventionellem Anbau aus, erscheint aber für Sortenklassifizierungen zu einfach. Eine sachlich angemessene Kalibrierung der Methode müsste auf einen (möglichst großen) Probensatz mit bekannten Probeneigenschaften aufbauen. Dabei wäre zu klären, wie vollständig sich bekannte Dimensionen der Bewertung zu Messgrößen der FAS zuordnen lassen. Grundsätzlich sollte dies möglich sein. So wie sich Eigenschaften in den Daten finden, die mit hybrid versus samenfest assoziiert sind, so werden sich auch Standorteigenschaften wie trocken versus feucht und mineralisch versus belebt in den Daten spiegeln. Es hängt vermutlich nur von der Vollständigkeit des Datensatzes und der Verfügbarkeit einer genauen Beschreibung ab, wie gut eine prospektive Bewertung von Proben dann funktioniert.

5 Literatur

- Strube, J. (2005). Fluoreszenz-Anregungsspektroskopie. in "Abschlussbericht Projektnummer 02OE170 "Ganzheitliche Untersuchungsmethoden zur Erfassung und Prüfung der Qualität ökologischer Lebensmittel: Stand der Entwicklung und Validierung"". A. Meier-Ploeger. Bonn, Geschäftsstelle Bundesprogramm Ökologischer Landbau in der Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung (BLE) 53168 Bonn S. 61-157.
<http://orgprints.org/4815/01/4815-02OE170-ble-uni-kassel-2003-validierung-qualitaet.pdf>
- Strube, J., et al. (2004). Lebensmittel vermitteln Leben - Lebensmittelqualität in erweiterter Sicht. KWALIS Qualitätsforschung Fulda GmbH, Dipperz. 3-935769-01-6.
- Strube, J., et al. (2007). Differenzierung und Klassifizierung von Öko-Produkten mittels validierter analytischer und ganzheitlicher Methoden. Dipperz. 06. Juli 2007. FKZ: 02OE170/F2 http://orgprints.org/14072/01/14072-02OE170_F2-kwalis-strube-2007-oekoprodukte.pdf