

**HUGO COLOMBAROLLI BONFÁ**

**ESTUDOS SOBRE MÉTODOS ESTATÍSTICOS APLICADOS À  
EXPERIMENTAÇÃO ANIMAL**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Zootecnia, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

**VIÇOSA  
MINAS GERAIS – BRASIL  
2016**

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

B713e  
2016

Bonfá, Hugo Colombarolli, 1987-  
Estudos sobre métodos estatísticas aplicados à  
experimentação animal / Hugo Colombarolli Bonfá. – Viçosa,  
MG, 2016.  
xi, 60f. : il. ; 29 cm.

Inclui anexo.

Orientador: Edênio Detmann.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Inclui bibliografia.

1. Nutrição animal - Métodos estatísticos . I. Universidade  
Federal de Viçosa. Departamento de Zootecnia. Programa de  
Pós-graduação em Zootecnia. II. Título.

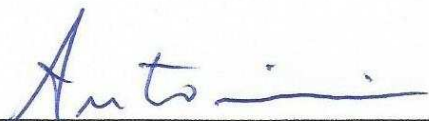
CDD 22. ed. 636.084

**HUGO COLOMBAROLLI BONFÁ**

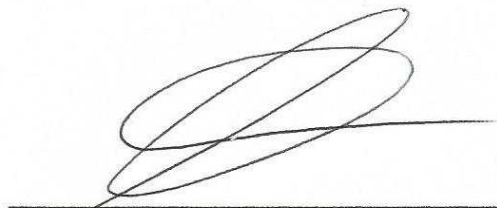
**ESTUDOS SOBRE MÉTODOS ESTATÍSTICOS APLICADOS À  
EXPERIMENTAÇÃO ANIMAL**

Tese apresentada à Universidade  
Federal de Viçosa, como parte das  
exigências do Programa de Pós-  
Graduação em Zootecnia, para  
obtenção do título de *Doctor Scientae*.

APROVADA: 25 de julho de 2016.



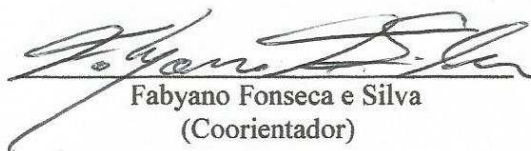
Antonio Policarpo Souza Carneiro



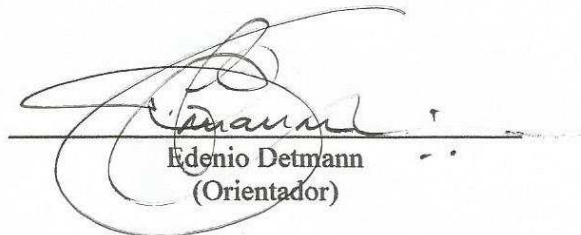
André Soares de Oliveira



Mário Luiz Chizzotti



Fabyano Fonseca e Silva  
(Coorientador)



Edenio Detmann  
(Orientador)

À **Vida**, pela oportunidade.

À minha mãe, **Sandra Colombaroli**, que sempre acreditou em mim.

Ao meu irmão, **Igor**, por ser meu grande amigo.

**Dedico**

*“ O homem é a mais insana das espécies. Ele adora um Deus invisível e destrói a natureza visível. Sem saber que essa natureza que ele está destruindo é esse Deus que ele está adorando. ”*

*Hubert Reeves*

## AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Viçosa e ao Departamento de Zootecnia, por tornar possível a realização deste sonho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo auxílio financeiro.

À minha mãe Sandra Colombarolli, pelos ensinamentos de determinação, persistência, amor incondicional, ajuda ao próximo, compreensão e companheirismo.

Ao meu pai Paulo Antônio Bonfá, que mesmo distante sempre esteve na torcida.

Ao meu irmão Igor Colombarolli Bonfá, pelos conselhos nos momentos difíceis, a quem confio minhas alegrias, tristezas e confidências.

A toda minha família, especialmente à minha avó Diva (*in memoriam*), pelo apoio e suporte.

Ao Professor Edenio Detmann, pela orientação e por todos os ensinamentos profissionais e, principalmente, pessoais. Por me mostrar que o ser humano não deve ser julgado por sua crença, etnia, sexualidade ou opção política, mas sim pelos atos de amor ao próximo. O senhor é para mim um exemplo de ser humano.

Ao Professor Fabyano Fonseca e Silva, pelos ensinamentos, conselhos e ajuda sempre que necessário.

Aos demais Professores do Departamento de Zootecnia e Departamento de Estatística da UFV, pelos ensinamentos.

Aos colegas de orientação, Marcia, Erick, Malber, William, Tadeu, Luana, Cristiane, Larissa, Amanda e Gabriel, pelo companheirismo e apoio. It's box!

Aos demais colegas do Departamento de Zootecnia, pelo apoio e momentos de descontração.

Aos funcionários do Departamento de Zootecnia, por todo suporte necessário.

Aos amigos das republicas “Rep. Xamego com Biscoito”, “Rep. Ferradura”, “Rep. apt. #230”, “Rep. Θ π Θ”, e “Rep. Estancia”, pelos momentos de descontração e por fazerem esta trajetória menos árdua.

Aos amigos que me acompanharam durante o doutorado sanduíche, em especial aos verdadeiros: Lidiane, Otavio, Nayara, Renata e Rebeca, por tornarem essa experiência inesquecível. #Roomies

Aos diversos colegas que fiz em Davis (USA), em especial: Pauline, Sara, Berta, Adeline, Tekeste, Luiz, Noe, Paul e Grace, pelo apoio e suporte sempre que necessário. Coffee time?

Enfim, a todos que contribuíram diretamente e indiretamente para a realização deste trabalho. Obrigado!

## BIOGRAFIA

Hugo Colombarolli Bonfá, filho de Paulo António Bonfá e Sandra Colombarolli, nasceu na cidade de Belo Horizonte, estado de Minas Gerais, no dia 04 de janeiro de 1987.

Em fevereiro de 2010, graduou-se em Zootecnia pela Universidade Federal de Minas Gerais.

Em fevereiro do mesmo ano, iniciou o curso de Mestrado em Zootecnia pela Universidade Federal de Minas Gerais, concentrando seus estudos na área de Estatística Aplicada a Nutrição Animal, submetendo-se à defesa de dissertação em 29 de fevereiro de 2012.

De março a dezembro de 2012, atuou na função de apoio técnico na Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, na área de Estatística Aplicada a Nutrição de Ruminantes.

Em fevereiro de 2013, iniciou o curso de Doutorado em Zootecnia pela Universidade Federal de Viçosa, tendo como foco a área de Estatística Aplicada a Experimentação Animal, realizando o Doutorado Sanduíche na *University of California – Davis*, entre janeiro de 2015 e janeiro de 2016.

Submeteu-se à defesa de tese em 25 de julho de 2016.

## ÍNDICE

	Página
RESUMO.....	viii
ABSTRACT .....	x
INTRODUÇÃO GERAL .....	1
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	6
<b>CAPÍTULO 1 – Aproximações para os intervalos de confiança para as exigências energéticas de bovinos de corte</b>	
Resumo .....	7
Introdução .....	8
Material e Métodos .....	8
Resultado e Discussão .....	13
Conclusões .....	20
Abstract .....	20
Referências Bibliográficas .....	20
<b>CAPÍTULO 2 – Assessment of hypotheses test for the components of mean square error of prediction</b>	
Abstract .....	26
Introduction .....	26
Derivation of the method .....	27
Evaluation of the statistical efficiency of the method .....	30
Example of application of the method .....	31
Discussion .....	33
Conclusions .....	34
Resumo .....	34
References .....	34
<b>CAPÍTULO 3 – Bayesian and frequentist approaches for fitting the gamma-time-dependent model to describe neutral detergent fiber degradation</b>	
Abstract .....	36
Introduction .....	36
Material and Methods .....	38
Results .....	41
Discussion .....	42



Conclusions .....	43
Resumo .....	44
References .....	44
Appendix .....	53

## RESUMO

BONFÁ, Hugo Colombaroli, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, julho de 2016. **Estudos sobre métodos estatísticos aplicados à experimentação animal.** Orientador: Edenio Detmann. Coorientadores: Fabyano Fonseca e Silva e Paulo Roberto Cecon.

Foram realizados três experimentos objetivando propor, avaliar e comparar os diferentes métodos aplicados a inferências estatísticas em experimentos de nutrição animal. No primeiro experimento objetivou-se propor aproximações para intervalos de confiança das exigências de energia líquida e metabolizável para manutenção e para as eficiências de uso da energia metabolizável para manutenção e ganho em bovinos de corte. Neste experimento uma população simulada de 100.000 animais foi utilizada para demonstração das propriedades distribucionais das exigências de energia. Aproximações para os intervalos foram propostas e demonstradas utilizando-se as propriedades da distribuição normal e aproximações por anamorfose e por série de expansão de Taylor. Banco de dados formados por 158 animais foi utilizado para demonstração das aproximações propostas. Os resultados demonstraram a viabilidade de uso de tais aproximações, as quais constituem ferramentas para prática da estatística indutiva e para o cotejamento inter e intra-experimental. No segundo experimento, objetivou-se desenvolver um teste de hipóteses simples para a avaliação dos componentes do quadrado médio do erro de predição baseando-se no teste da razão de verossimilhança e na distribuição de qui-quadrado. Esta aproximação foi aplicada sobre um conjunto de dados obtidos pela simulação de características da dieta de bovinos utilizando-se dois diferentes modelos matemáticos. Concluiu-se neste experimento que o teste proposto pode auxiliar profissionais na área de modelagem para a identificação dos entraves ou limitações reais dos modelos desenvolvidos, orientando-os no desenvolvimento de modificações necessárias na estrutura matemática dos modelos de forma a ampliar a exatidão e a precisão dos valores simulados. No terceiro e último experimento, objetivou-se avaliar e comparar a eficiência das inferências Bayesiana e frequentista frente a descrição da degradação ruminal da fibra em detergente neutro utilizando um modelo do tipo gama-tempo-dependente. Um banco de dados simulado composto por quatro cenários foi utilizado: restrição regular do número de tempos de incubação, perda aleatória de tempos de incubação, perda de partes específicas das curvas de degradação, variação na precisão dos procedimentos de incubação. Os cenários

foram divididos em quatro subconjuntos cada, os subconjuntos foram simulados dez vezes, permitindo uma ampla avaliação da capacidade de ajuste das diferentes abordagens frente os diferentes cenários. Dois bancos de dados reais foram utilizados para avaliar as abordagens, os dados reais foram compostos da degradação da FDN de uma gramínea tropical (*Brachiaria decumbes*). O modelo foi ajustado de acordo com as características de cada abordagem e comparados por dois avaliadores: desvio padrão assintótico do erro e o viés, comparações gráficas foram realizadas quando pertinente. A abordagem bayesiana e a abordagem frequentista apresentaram estimativas confiáveis para a maioria dos dados avaliados. Entretanto, a abordagem bayesiana apresentou um grande viés das estimativas do resíduo e das estimativas da taxa de degradação de incubação, não apresentando uma coerência biológica para os parâmetros, em comparação com a abordagem frequentista. Ou seja, a abordagem bayesiana ajustada com informações *a priori* não informativas, apresentou-se menos flexível do que a abordagem frequentista. No entanto, ressalta-se a importância das informações *a priori*, especialmente para a abordagem bayesiana, a fim de definir as informações *a priori* apropriadas ao modelo. Estudos futuros mais aprofundados sobre a influência das informações *a priori* não informativas sobre a estimativa de parâmetros são necessários.

## ABSTRACT

BONFÁ, Hugo Colombarolli, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2016. **Studies on statistical methods applied to animal experiments.** Advisor: Edenio Detmann. Co-Advisers: Fabyano Fonseca and Silva and Paulo Roberto Cecon.

Three experiments were carried out aiming to propose, evaluate and compare different method applied to statistical inferences in animal experiments. The first experiment aimed to propose approaches to the confidence intervals for the net and metabolizable energy requirements for maintenance, and for the efficiency of utilization of metabolizable energy for maintenance and weight gain in beef cattle. In this experiments, a simulated population of 100,000 animals was used to demonstrate the distributional properties of the energy requirements. Approaches to the confidence intervals were proposed and demonstrated using the properties of the normal distribution, and using approaches based on anamorphosis and Taylor's series. Approaches a dataset of 158 animals was used to demonstrate the application of the proposed approaches. The results demonstrated the feasibility of use of such approaches, which are relevant tools for the practice of inductive statistics and for inter- and intra-experimental comparisons. The second experiment aimed to develop a single hypothesis test to evaluate the statistical significance of mean square error of prediction components based on likelihood ratio test and chi-square distribution. This proposal was applied to a dataset obtained by simulating characteristics of cattle diets using two different models. We concluded that this test might help the modeler to focus on the real significant constraints of his model and to work on doing the necessary modifications on its mathematical structure in order to improve the accuracy and precision of the simulated values. The third and last experiment aimed to evaluate and compare the efficiency of the Bayesian and frequentist approach to describe the rumen degradation of neutral detergent fiber by using a gamma-time dependent model. A simulated data was composed by four scenarios: regular restriction in the number of incubation times, random loss of incubation times, loss of specific parts of the degradation curves, variation in the precision of the incubations procedures. The scenarios was divided in four subset each, and the subsets was simulated ten time in order to allow a more huge evaluation of the ability of different approaches to adjust in front of different scenarios. Two real datasets was used to evaluate

the inferences approaches, these real datas encompassed the evaluation of NDF degradation of a tropical grass (*Brachiaria decumbes*). The model was adjusted according their characteristic approach and compared by two assessors: asymptotic standard deviation of the residual and the bias, plot assessors were used when pertinent. The bayesian approach and frequentist approach presented reliable estimates of the degradation parameters for the majority of the datas tested. Therefore, in specific cases with short random records number, the bayesian approach showed greater bias of the estimates of incubation residue and estimates of degradation rate without a biological coherence of the parameters, compared to frequentist inference. In another words, the bayesian approach fitted with non-informative prior, presented less flexible than frequentist inference. Nevertheless, it is emphasized the importance of the background information before the modeling, especially for the bayesian approach, in order to define proper prior distributions. Future thorough studies about the influence of non-informative prior for the parameters are necessary.

## INTRODUÇÃO GERAL

A inferência estatística é um campo bastante amplo da estatística que se refere à análise e interpretação da população, observando somente uma parte desta; ou seja, é o ramo da estatística que tem como objetivo inferir sobre a população a partir de uma determinada amostra tomada a partir desta população. Diferentemente da estatística descritiva, que tem como objetivo simples a apresentação daquilo que foi observado, a inferência estatística é o processo de raciocínio em que as conclusões obtidas sobre uma amostra são estendidas a toda a população.

Objetivando-se concluir sobre o comportamento da população, a inferência estatística descreve o padrão populacional por intermédio de estimativas dos parâmetros obtidos a partir de amostras. Parâmetro é o valor de medidas populacionais que visam descrever uma determinada característica. Considerando-se populações pressupostamente infinitas, os parâmetros são assumidos como de natureza desconhecida; portanto, por intermédio da amostra, é possível estimá-los com uma margem de erro preestabelecida.

O campo da inferência estatística é amplo e composto por diversos métodos estatísticos. Na nutrição animal, estes métodos apresentam papel relevante no desenvolvimento de modelos nutricionais, na análise de alimentos, na descrição do desempenho animal, entre outras aplicações. Entretanto, considerando-se a pluralidade da inferência estatística, mais de uma possibilidade de aplicação pode estar disponível na interpretação dos dados oriundos de um experimento ou estudo observacional: diferentes abordagens, métodos, estimadores, etc; resultando em diversas possibilidades estatísticas de se avaliar um único conjunto de dados amostrais. Em face a tanta diversidade, dúvidas quanto à forma de avaliação, o melhor estimador a ser utilizado, o modelo mais adequado, a método

mais apropriado, a inferência mais acurada e precisa, etc, são comuns. Tais dúvidas, muitas vezes, podem levar o pesquisador a utilizar métodos inadequados, podendo gerar conclusões errôneas e/ou equivocadas.

O planejamento estatístico engloba várias etapas que começam com a declaração clara dos objetivos, suposições sobre os limites, a adequação dos dados disponíveis, delineamento da estrutura experimental, validação das estimativas, compilação e interpretação dos resultados e, caso necessário, o redimensionamento do processo (Tedeschi, 2006).

Em experimentos zootécnicos, vários entraves metodológicos têm sido observados. Um destes comumente ocorre em experimentos que visam estimar os requerimentos energéticos dos animais. O abate comparativo e as mensurações respirométricas são alguns dos métodos para a estimação dos requerimentos energéticos dos animais. No entanto, na aplicação de tais métodos, as estimativas de exigência de energia metabolizável (EM) e de energia líquida e as eficiências de uso da EM para manutenção e produção são normalmente obtidas de forma pontual, sem a devida estimação concomitante de uma medida de dispersão que permita a construção de intervalos de confiança para cada parâmetro estimado. Assim, o cotejamento entre diferentes situações experimentais (*i.e.*, locais, grupos genéticos, padrões de alimentação, etc) pode se tornar subjetivo e sem o devido balizamento por fundamentos estatísticos. Há de se levar em consideração que a construção direta de intervalos de confiança para estes parâmetros é matematicamente complexa, haja vista que muitos destes são obtidos de forma iterativa ou por intermédio da razão entre variáveis aleatórias.

Entraves metodológicos relacionados a valores pontuais com interpretações descritivas vão além dos experimentos que visam estimar o requerimento energético dos animais. Em geral, interpretações descritivas são de difícil avaliação e comparação, pois não

são balizadas por uma hipótese ou significância estatística. Tais entraves também ocorrem na avaliação de modelos matemáticos.

A avaliação da eficiência de predição de modelos matemáticos é um processo complexo. Modelos são hipóteses expressas matematicamente e, portanto, estão sujeitos ao processo normal de avaliação de hipóteses (France e Kebreab, 2008). A avaliação do modelo constitui etapa essencial no processo de modelagem, pois indica o grau de precisão e acurácia dos valores preditos. Esta é uma etapa importante que permite estabelecer a confiabilidade do modelo atual ou indicar a necessidade de seleção de modelos alternativos (Tedeschi, 2006). Segundo Tedeschi (2006), diversas são as técnicas disponíveis para avaliar a adequação dos modelos a fim de garantir a imparcialidade durante a decisão de aceitar ou rejeitar um determinado modelo matemático. Entre estas, o estudo do quadrado médio do erro de predição (QMEP) e sua decomposição em componentes ortogonais tem sido recomendado por diversos pesquisadores (Kobayashi e Salam, 2000; Gauch Jr. et al., 2003; Tedeschi, 2006).

Entretanto, o QMEP e seus componentes ortogonais são normalmente interpretados como estatísticas descritivas e pontuais. Esta abordagem, conduz a conclusões restritas, pois a informação a respeito da significância de cada componente não está disponível. Assim, as informações proporcionadas por cada componente do QMEP seriam mais incisivas se estivessem atreladas a um teste de hipótese adequado que permitisse a interpretação e comparação direta.

Contudo, restrições devido à ausência de ferramentas de inferência estatística não são os únicos entraves metodológicos enfrentados na experimentação animal. Recentemente, em experimentos realizados na ciência animal, tem sido reduzida a utilização de grande número de animais, devido ao alto labor, custo e exigência cada vez mais rigorosas dos comitês de



ética animal. Com isso, métodos estatísticas mais flexíveis a esta nova realidade são demandados.

Um dos principais objetivos da estatística é o ajuste ou construção de modelos. A construção de modelos pode ser realizada por duas principais abordagens estatísticas: frequentista (ou clássica) e Bayesiana. Quando a abordagem frequentista é aplicada aos dados, os parâmetros populacionais são considerados como efeitos fixos; desta maneira, as informações inerentes aos parâmetros são obtidas exclusivamente via amostragem. Entretanto, quando a abordagem Bayesiana é aplicada, os parâmetros populacionais são considerados efeitos aleatórios e podem ser descritos probabilisticamente. Portanto, para o processo Bayesiano de estimação, conjunto de dados menor seria necessário quando comparado à abordagem frequentista. Em outras palavras, a abordagem Bayesiana apresenta menor dependência do tamanho amostral em comparação à abordagem frequentista (Beaumont e Rannala, 2004).

Estudos de cinética ruminal da fibra em detergente neutro (FDN) são exemplos clássicos deste entrave na experimentação animal. As cinéticas de trânsito e degradação ruminal da FDN são processos tipicamente tempo-dependentes, pois a probabilidade de uma partícula fibrosa escapar para o intestino ou ser degradada por microrganismos varia ao longo do tempo de permanência no rúmen. A inclusão da dependência do tempo em modelos para descrição da cinética ruminal é comumente obtidas pela utilização de modelos não lineares do tipo gama-tempo-dependente (Ellis et al., 1994). Entretanto, o ajuste de modelos não lineares pode ser estatisticamente complexo, sobretudo para dados de cinética ruminal, pois os erros podem não seguir a distribuição normal. Algumas vezes, a distribuição normal é alcançada assintoticamente; no entanto, os bancos de dados reais geralmente apresentam tamanho amostral pequeno. Por outro lado, o padrão de degradação descrito ao longo do

tempo gera uma típica heterocedasticidade ou “efeito funil” (Detmann et al., 2001) e uma dependência entre os erros. Diferentemente da abordagem frequentista, a abordagem Bayesiana não exige a suposição de normalidade como uma condição necessária e as inferências sobre os parâmetros são realizadas com base na distribuição *a posteriori* dos dados. Contudo, há necessidade de se avaliar a adequabilidade de ambas as abordagens no tocante ao ajustamento de modelos gama-tempo-dependente para descrição das cinéticas de trânsito e degradação dos compostos fibrosos no rúmen.

Desta forma, definiram-se como objetivos nesta Tese:

1. apresentar aproximações para os intervalos de confiança para exigências energéticas de manutenção e eficiências de uso da energia metabolizável em bovinos de corte;
2. desenvolver e apresentar um teste de hipótese para avaliar a significância estatística dos componentes ortogonais do quadrado médio do erro de predição; e
3. avaliar e comparar a eficiência das abordagens Bayesiana e frequentista quanto à descrição da degradação ruminal da fibra em detergente neutro utilizando-se um modelo gama-tempo-dependente.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BEAUMONT, M. A.; RANNALA, B. The bayesian revolution in genetics, **Nature Reviews**, v.5, p.251-261, 2004.
- DETMANN, E.; CECON, P. R.; PAULINO, M. F.; ZERVOUDAKIS, J. T.; VALADARES FILHO, S. C.; ARAÚJO, C. V. Estimação de parâmetros de cinética de trânsito de partículas em bovinos sob pastejo por diferentes sequências amostrais. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v.30, p.222-230, 2001.
- ELLIS, W. C.; MATIS, J. H.; HILL, T. M. MURPHY, M. R. Methodology for estimating digestion and passage kinetics of forages. In: FAHEY JR., G. C. (Eds.) **Forage quality, evaluation, and utilization**. Madison: American Society of Agronomy, 1994. P.682-756.
- FRANCE, J.; KEBREAB, E. Introduction. In: FRANCE, J.; KEBREAB, E. (Eds.) **Mathematical modelling in animal nutrition**. Wallingford: CAB International, 2008. P.1-11.
- GAUCH Jr., H. G.; HWANG, J. T. G.; FICK, G. W. Model evaluation by comparison of model-based predictions and measured values. **Agronomy Journal**, Madison, v.95, p.1442-1446, 2003.
- KOBAYASHI, K.; SALAM, M. U. Comparing simulated and measured values using mean squared deviation and its components. **Agronomy Journal**, v.92, p.345-352, 2000.
- TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of linear models. **Agricultural Systems**, Amsterdam, v.89, p.225-247, 2006.

## CAPÍTULO 1

### APROXIMAÇÕES PARA OS INTERVALOS DE CONFIANÇA PARA AS EXIGÊNCIAS ENERGÉTICAS DE BOVINOS DE CORTE\*

Hugo Colombarolli BONFÁ<sup>1</sup>

Edenio DETMANN<sup>2</sup>

Paulo Roberto CECOM<sup>3</sup>

Sebastião de Campos VALADARES FILHO<sup>4</sup>

José Gilson Louzada REGADAS FILHO<sup>5</sup>

- **RESUMO:** Objetivou-se propor aproximações para os intervalos de confiança das exigências de energia líquida e metabolizável para manutenção e para as eficiências de uso da energia metabolizável para manutenção e ganho em bovinos de corte. Uma população simulada de 100.000 animais foi utilizada para demonstração das propriedades distribucionais das exigências de energia. Aproximações para os intervalos foram propostas e demonstradas utilizando-se as propriedades da distribuição normal e aproximações por anamorfose e por série de expansão de Taylor. Banco de dados formado por 158 animais foi utilizado para demonstração das aproximações propostas. Os resultados demonstraram a viabilidade de uso de tais aproximações, as quais constituem ferramentas para prática da estatística indutiva e para o cotejamento inter e intra-experimental.
- **PALAVRAS-CHAVE:** eficiência energética; energia líquida; energia metabolizável; estatística indutiva; exigências nutricionais.

---

\* Artigo publicado na Revista Brasileira de Biometria.

BONFÁ, H. C.; DETMANN, E.; CECOM, P. R.; VALADARES FILHO, S. C.; REGADAS FILHO, J. G. L. Aproximações para o intervalo de confiança para as exigências energéticas de bovinos de corte. *Rev. Bras. Biom.*, v.3, n.2, p.216-233, 2015.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: hugo.bonfa@ufv.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: detmann@ufv.br

<sup>3</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Estatística, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: cecon@ufv.br

<sup>4</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: scvfilho@ufv.br

<sup>5</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: gilsonregadas@gmail.com

## 1 Introdução

Energia é a capacidade de realizar trabalho, a qual pode ser expressa de várias formas de acordo com a referência definida e a condição padrão (KLEIBER, 1961; BLAXTER, 1962). Representada na nutrição animal nas formas de energia digestível, energia metabolizável (EM) e energia líquida (EL), esta constitui quantitativamente o maior dos requerimentos do animal, cujas estimativas de exigências podem ser obtidas por intermédio de diferentes métodos, havendo ainda a subdivisão funcional em requerimentos para manutenção e produção (BLAXTER, 1962; AFRC, 1993; NRC, 2000; CSIRO, 2007; MARCONDES et al., 2010).

O abate comparativo e as mensurações respirométricas são alguns dos métodos para a estimação dos requerimentos energéticos dos animais. No entanto, na aplicação de tais métodos, as estimativas de exigências de EM e de EL para manutenção ( $EL_m$  e  $EM_m$ , respectivamente) e as eficiências de uso da EM para manutenção e produção são normalmente obtidas de forma pontual, sem a devida estimação concomitante de uma medida de dispersão que permita a construção de intervalos de confiança para cada parâmetro estimado. Assim, o cotejamento entre diferentes situações experimentais (i.e., locais, grupos genéticos, padrões de alimentação, etc.) se torna subjetivo e sem o devido balizamento por fundamentos estatísticos. Há de se relevar que a construção direta de intervalos de confiança para estes parâmetros é de certa forma complexa, haja vista que muitos destes são obtidos de forma iterativa ou por intermédio da razão entre variáveis aleatórias.

Assim, objetivou-se com o presente trabalho apresentar métodos que permitam a obtenção de aproximações para os intervalos de confiança para exigências energéticas de manutenção e eficiências de uso da energia metabolizável em bovinos de corte.

## 2 Material e métodos

A avaliação das exigências de  $EL_m$  e  $EM_m$  de bovinos de corte está baseada na utilização de técnica de abate comparativo. Nesta técnica, animais alimentados com diferentes concentrações de EM na dieta são abatidos permitindo a quantificação direta do consumo de EM e da energia total retida no corpo vazio (PCVZ) e, a partir disto, quantifica-se indiretamente a produção de calor (PC) (LOFGREEN; GARRET, 1968; MARCONDES et al., 2010). Neste sentido, a relação entre o consumo de EM e a PC pode ser representada por intermédio de uma função exponencial, dada por:

$$Y_i = \beta_0 \times e^{\beta_1 \times X_i} \times \varepsilon_i \quad (1).$$

A função descrita em (1) é de natureza não linear, a qual somente pode ser ajustada por intermédio de algoritmos iterativos. Contudo, devido à sua estrutura peculiar e à pressuposição de erro com estrutura multiplicativa, possibilita-se a linearização da mesma por anamorfose, o que facilita sua aplicação, por permitir a utilização de métodos de mínimos quadrados lineares para obtenção de solução única. Assim, aplicando-se o logaritmo natural em (1), faz-se:

$$\ln Y_i = \ln \beta_0 + \beta_1 \times X_i + \ln \varepsilon_i \quad (2a);$$

$$Z_i = \theta_0 + \beta_1 \times X_i + e_i \quad (2b);$$

em que:  $Z_i$  = logaritmo natural de  $Y_i$ ;  $\theta_0$  = logaritmo natural de  $\beta_0$  e  $e_i$  = logaritmo natural de  $\varepsilon_i$ . Os demais termos foram previamente definidos.

Assumindo-se que  $e_i$  possa ser interpretado como sendo normal e independentemente distribuído, com média 0 e variância  $\sigma_e^2$ , as estimativas dos parâmetros de (2b) podem ser obtidos por intermédio do método dos mínimos quadrados ordinários utilizando-se os estimadores (DRAPPER; SMITH, 1966; MYERS, 1990; CECON et al., 2012):

$$\hat{\beta}_1 = \frac{SPDXZ}{SQDX} \quad (3);$$

$$\hat{\theta}_0 = \bar{Z} - \hat{\beta}_1 \times \bar{X} \quad (4);$$

em que:  $SPDXZ$  = soma dos produtos dos desvios de  $X$  e  $Z$ ; e  $SQDX$  = soma dos quadrados dos desvios de  $X$ . Os demais termos foram previamente definidos.

A variância residual utilizada para construção de intervalos de confiança e para realização dos testes estatísticos é dada por (DRAPPER; SMITH, 1966; MYERS, 1990; CECON et al., 2012):

$$s_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Z_i - \hat{Z}_i)^2}{n-2} = \frac{SQDZ - \hat{\beta}_1 \times SPDZX}{n-2} \quad (5);$$

em que:  $\hat{Z}_i$  = valor predito de  $Z_i$  por intermédio do ajuste da equação (2);  $s_e^2$  = variância residual.

A exigência de energia líquida para manutenção ( $EL_m$ ; Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>) é definida como o valor obtido em (1) quando o consumo de EM assume o valor 0. Assim, considerando-se a anamorfose previamente aplicada (Equações 1 e 2), faz-se:

$$EL_m = \hat{\beta}_0 = e^{\hat{\theta}_0} \quad (6).$$

Considerando a equação linearizada por anamorfose (Equação 2), o estimador para o erro padrão de  $\hat{\theta}_0$  é dado por (DRAPPER; SMITH, 1966; MYERS, 1990; CECON et al., 2012):

$$s(\hat{\theta}_0) = \sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{SQDX}\right) \times s_e^2} \quad (7).$$

Considerando-se a pressuposição de erro multiplicativo assumido para a equação (1) e assumindo-se no caso de erro multiplicativo que  $E(\varepsilon) = 1$ , a estimativa do erro-padrão de  $\hat{\beta}_0$  pode ser obtida por:

$$s(\hat{\beta}_0) = \pm \hat{\beta}_0 \times [e^{s(\hat{\theta}_0)} - 1] \quad (8).$$

Pressupondo-se que o parâmetro  $\beta_0$  (Equação 1) pode ser estudado considerando-se que o mesmo possui distribuição normal assintótica, uma aproximação para o estimador dos limites do intervalo de confiança  $(1 - \alpha)$  seria dado por (Equação 8):

$$IC(\beta_0)_{1-\alpha} = \hat{\beta}_0 \pm t_{\frac{\alpha}{2}} \times s(\hat{\beta}_0) \quad (9);$$

em que:  $IC(\beta_0)_{1-\alpha}$  = intervalo de confiança para o parâmetro  $\beta_0$  ( $EL_m$ ) com índice de confiança  $(1 - \alpha)$ ;  $t_{\frac{\alpha}{2}}$  = valor da estatística t padronizada bilateral com  $(n - 2)$  graus de liberdade.

A estimativa de exigência de EM para manutenção ( $EM_m$ ) é obtida iterativamente por intermédio da equação (1), considerando-se o ponto em que a PC se igual ao consumo de EM:

$$EM_m = Y = f(X|Y_M = X_M) \quad (10);$$

em que:  $Y_M$  e  $X_M$  = valores de Y e X em que a PC e o consumo de EM se equivalem (Equação 1).

Após a obtenção da estimativa de  $EM_m$  por intermédio da equação (1), este valor pode ser transformado aplicando-se seu logaritmo natural, permitindo que o mesmo seja inserido e estudado segundo a equação (2):

$$\ln EM_m = \ln \hat{Y}_M = \hat{Z}_M \quad (11).$$

Considerando que os parâmetros e os erros da equação (2) podem ser estudados segundo as propriedades da distribuição normal, faz-se (MYERS, 1990):

$$s^2(\hat{Z}_M) = s_e^2(\hat{\theta}_0 + \hat{\beta}_1 \times X_M) = \left[ \frac{1}{n} + \frac{(X_M - \bar{X})^2}{SQDX} \right] \times s_e^2 \quad (12).$$

Desta forma, o erro-padrão do valor estimado  $\hat{Z}_M$  é dado por:

$$s(\hat{Z}_M) = \sqrt{\left[ \frac{1}{n} + \frac{(X_M - \bar{X})^2}{SQDX} \right] \times s_e^2} \quad (13).$$

Considerando-se a pressuposição de erro multiplicativo assumido para a equação (1) e assumindo-se no caso de erro multiplicativo que  $E(\varepsilon) = 1$ , a estimativa do erro-padrão de  $\hat{Y}_M$  pode ser obtida por:

$$s(\hat{Y}_M) = \pm \hat{Y}_M \times [e^{s(\hat{Z}_M)} - 1] \quad (14).$$

Pressupondo-se que os valores preditos pelo modelo não linear (Equação 1) podem ser estudados considerando-se que os mesmos possuam distribuição normal assintótica, uma aproximação para o estimador dos limites do intervalo de confiança  $(1 - \alpha)$  seria dado por (Equação 14):

$$IC(Y_M)_{1-\alpha} = \hat{Y}_M \pm t_{\frac{\alpha}{2}} \times s(\hat{Y}_M) \quad (15);$$

em que:  $IC(Y_M)_{1-\alpha}$  = intervalo de confiança para  $Y_M$  ( $EM_m$ ) com índice de confiança  $(1 - \alpha)$ ;  $t_{\frac{\alpha}{2}}$  = valor da estatística t padronizada bilateral com  $(n - 2)$  graus de liberdade.

A eficiência de uso da  $EM_m$  para manutenção ( $k_m$ ) é dada por (NRC, 2000; MARCONDES et al., 2010):

$$\hat{k}_m = \frac{EL_m}{EM_m} \quad (16).$$

Em virtude de  $k_m$  ser obtida pela razão entre duas estimativas pontuais, não se possibilita a obtenção direta de estimativa para o intervalo de confiança deste parâmetro.

Desta forma, para se investigar a relação entre os intervalos de confiança de  $EL_m$ ,  $EM_m$  e  $k_m$ , um banco de dados relativos a estes parâmetros foi levantado na literatura nacional a partir de 41 experimentos (Tabela 1; SALVADOR, 1980; TEIXEIRA et al., 1987; GONÇALVES et al., 1991; LANA et al., 1992; PIRES et al., 1993; CASTILLO et al., 1997; ARAÚJO et al., 1998; PAULINO et al., 1999; ROCHA; FONTES, 1999; SIGNORETTI et al., 1999; FREITAS et al., 2000; ALMEIDA et al., 2001; VÉRAS et al., 2001; SILVA et al., 2002; VELOSO et al., 2002; ZERVOUDAKIS et al., 2002; PAULINO et al., 2004; BACKES et al., 2005; PAULINO, 2006; CHIZZOTTI et al., 2007; GUIMARÃES FILHO, 2008; PAIXÃO, 2008; ALMEIDA et al., 2009; MARCONDES et al., 2009; MORAES et al., 2009; SALES et al., 2009; GIONBELLI, 2010; AMARAL, 2012; FONSECA et al., 2012a; FONSECA et al., 2012b; MACHADO et al., 2012; PAULA, 2012; PORTO et al., 2012; ROCHA et al., 2012; SILVA et al., 2012; LIMA, 2013; ROTTA et al., 2013; SILVA, 2013; VALENTE et al., 2013; BONILHA et al., 2014; PRADOS et al., 2015).

As médias, variâncias e covariâncias obtidas a partir do banco de dados (Tabela 1) foram utilizadas como estimativas iniciais dos parâmetros populacionais. A partir disto, um banco de dados (população) contendo 100.000 informações de  $EL_m$  e  $EM_m$  foi simulado por intermédio do programa @Risk for Excel 5.5.1 (Palisade Corporation, Ithaca, NY, EUA) assumindo-se distribuição normal bivariada. Desta forma, produziu-se concomitantemente o mesmo número de valores simulados para  $k_m$ .

Tabela 1 - Estatísticas descritivas para o banco de dados relativo às exigências de energia líquida ( $EL_m$ ) e metabolizável ( $EM_m$ ) para manutenção e eficiência de uso da energia metabolizável para manutenção ( $k_m$ ) em bovinos utilizado para simulação populacional

Item	Parâmetro		
	$EL_m$ (Mcal/kg PCVZ <sup>0,75</sup> )	$EM_m$ (Mcal/kg PCVZ <sup>0,75</sup> )	$k_m$
Média	0,0745	0,1280	0,6420
Desvio-padrão	0,0174	0,0396	0,0862
Amplitude	0,034-0,124	0,083-0,270	0,403-0,844
n	41	27	27



A partir do banco de dados da população simulada foram tomadas 100 amostras aleatórias contendo 100 informações cada por intermédio do procedimento SURVEYSELECT do SAS 9.4. Desta forma, construiu-se um novo banco de dados contendo informações referentes às médias e desvios padrões amostrais para  $EL_m$ ,  $EM_m$  e  $k_m$ , o qual foi utilizado para o estudo das propriedades dos intervalos de confiança para cada parâmetro. Previamente ao estudo, verificou-se por intermédio dos testes de  $\chi^2$  e de Kolmogorov-Smirnoff que os conjuntos formados pelas médias das amostras poderiam ser estudados segundo a distribuição normal de probabilidade ( $P > 0,05$ ).

Por outro lado, a conversão das exigências de EL em exigências de EM para ganho demanda o conhecimento da eficiência de uso da EM para ganho de peso ( $k_g$ ). Uma aproximação para estimação do  $k_g$  é obtida por intermédio do ajuste de equação de regressão da energia retida no corpo vazio em função do consumo de EM (FERRELL; OLTJEN, 2008). Assim, faz-se:

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \times X_i + \varepsilon_i \quad (17);$$

em que:  $Y_i$  = energia retida no corpo do animal  $i$  (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>);  $\beta_0$  = intercepto;  $\beta_1$  = coeficiente de inclinação;  $X_i$  = consumo de EM (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>); e  $\varepsilon_i$  = erro aleatório não observável, pressuposto NID (0;  $\sigma^2$ ).

Desta forma,  $k_g$  é dado por:

$$k_g = \hat{\beta}_1 \quad (18).$$

Considerando que os erros possuem distribuição normal (Equação 17), o intervalo de confiança  $(1 - \alpha)$  para  $k_g$  pode ser definido por (DRAPPER; SMITH, 1966; MYERS, 1990; CECON et al., 2012):

$$IC(k_g)_{1-\alpha} = \hat{\beta}_1 \pm t_{\frac{\alpha}{2}} \times s(\hat{\beta}_1) \quad (19);$$

$$s(\hat{\beta}_1) = \sqrt{\frac{s_\varepsilon^2}{SQDX}} \quad (20);$$

$$s_\varepsilon^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n-2} = \frac{SDQY - \hat{\beta}_1 \times SPDXY}{n-2} \quad (21).$$

Para ilustração dos procedimentos aqui propostos utilizou-se banco de dados oriundos da base do sistema BR-CORTE formado por 158 animais Nelore machos não castrados, sendo todos manejados em confinamento e avaliados em sistema de abate comparativo (Tabela 2). Para todas as demonstrações utilizou-se  $\alpha = 0,05$ .

Tabela 2 - Estatísticas descritivas para as variáveis utilizadas no ajustamento das equações de regressão

Item	Variável			
	CEM	PC	ln(PC)	ER
Média	0,2289	0,1830	-1,7309	0,0458
s <sup>2</sup>	0,0587	0,0481	0,2560	0,0459
n	158	158	158	158
Amplitude	0,117-0,468	0,087-0,392	-2,442-0,936	-0,097-0,170
Somadas de quadrados e produtos				
	CEM	PC	ln(PC)	ER
CEM	0,5408	0,3445	1,7720	0,1963
PC	-	0,3634	1,8961	-0,0190
ln(PC)	-	-	10,2732	-0,1241
ER	-	-	-	0,2152

CEM, consumo de energia metabolizável (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>); PC, produção de calor (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>); ln(PC), logaritmo natural da produção de calor; ER, energia retida (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>).

### 3 Resultados e Discussão

A avaliação das amostras aleatórias tomadas da população simulada (n = 100.000) indicou que as EL<sub>m</sub> e EM<sub>m</sub> podem ser estudadas utilizando-se a distribuição normal de probabilidade (P>0,05). Esta afirmativa é reforçada pelo comportamento gráfico sigmoide dos limites inferiores dos intervalos de confiança gerados para cada uma das variáveis (Figuras 1 e 2), o qual é característico de variáveis que seguem a distribuição normal de probabilidade (STEEL et al., 1997). O conceito teórico de intervalo de confiança indica que cada intervalo gerado possui (1 - α) de probabilidade de ser um entre os infinitos intervalos possíveis de serem gerados e que conterá em seu interior o valor do parâmetro populacional (BUSSAB; MORETTIN, 1987; STEEL et al., 1997). Assim, a proporção de intervalos gerados que contemplaram a média populacional em seu interior aproximou-se do que seria esperado em função do índice de confiança utilizado (1 - α = 0,95; Figuras 1 e 2).

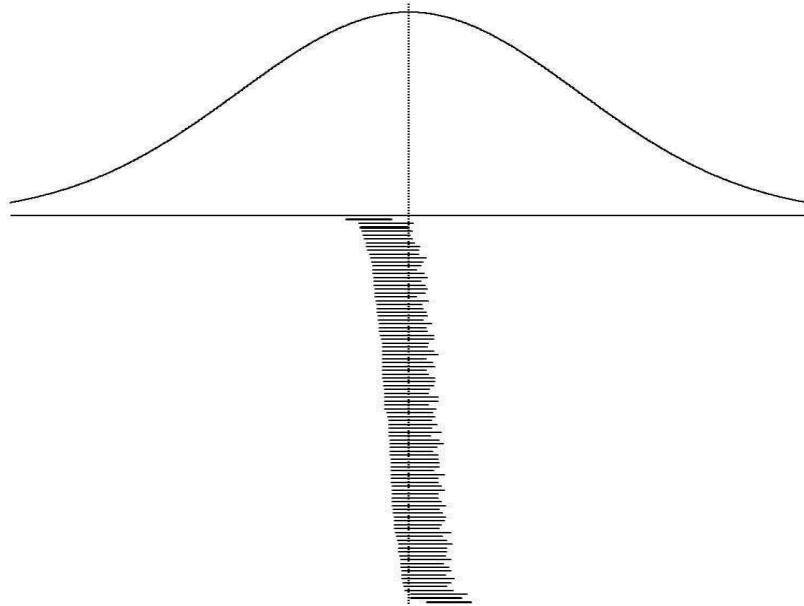


Figura 1 - Distribuição populacional a partir de dados simulados das exigências de energia líquida para manutenção (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>) em bovinos de corte ( $\mu = 0,0740$ ;  $\sigma^2 = 0,000302$ ). As linhas abaixo correspondem aos intervalos de confiança ( $1 - \alpha = 0.95$ ) construídos a partir de 100 amostras aleatórias ( $n = 100$ ), nos quais 96 contemplaram a média populacional em seu interior.

A avaliação dos valores de  $k_m$  obtidos a partir da razão dos valores de  $EL_m$  e  $EM_m$  indicou que há possibilidade de se estudar este parâmetro utilizando-se as propriedades da distribuição normal de probabilidade ( $P > 0,05$ ), a despeito do mesmo ser produzido a partir da razão entre duas variáveis com distribuição normal. No entanto, em condições experimentais, são obtidos valores pontuais de  $k_m$  sem que se obtenha diretamente uma estimativa da variância, a qual permitirá a estimação de intervalos de confiança para este parâmetro.

Contudo, sendo  $k_m$  a razão entre duas variáveis com distribuição normal de probabilidade, uma aproximação para a variância de  $k_m$  pode ser obtida a partir das informações de  $EL_m$  e  $EM_m$  utilizando-se a expansão de Taylor (STUART; ORD, 2009), a qual resulta em:

$$s^2(\hat{k}_m) = \frac{(EL_m)^2}{(EM_m)^2} \times \left[ \frac{s^2(EL_m)}{(EL_m)^2} - 2 \times \frac{C\acute{O}V(EL_m, EM_m)}{EL_m \times EM_m} + \frac{s^2(EM_m)}{(EM_m)^2} \right] \quad (22).$$

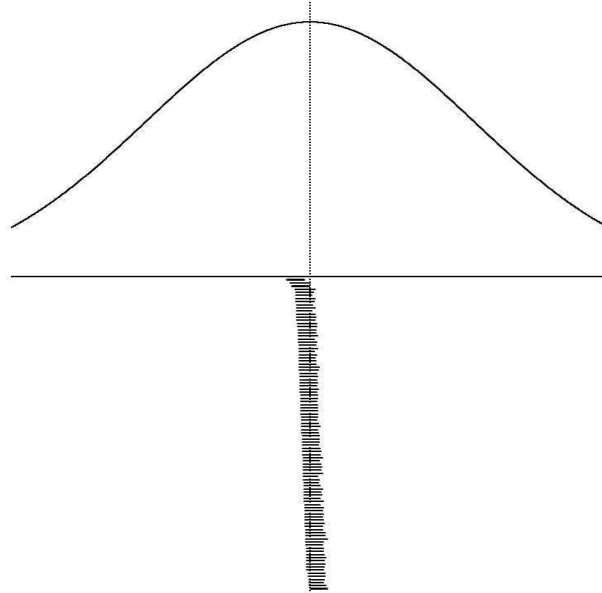


Figura 2 - Distribuição populacional a partir de dados simulados das exigências de energia metabolizável para manutenção (Mcal/kg PCVZ<sup>0,75</sup>) em bovinos de corte ( $\mu = 0,1274$ ;  $\sigma^2 = 0,001560$ ). As linhas abaixo correspondem aos intervalos de confiança ( $1 - \alpha = 0,95$ ) construídos a partir de 100 amostras aleatórias ( $n = 100$ ), nos quais 97 contemplaram a média populacional em seu interior.

Um empecilho de ordem prática que surge para a utilização da equação (22) é a impossibilidade de obtenção de uma estimativa da covariância entre  $EL_m$  e  $EM_m$  a partir de dados de um único experimento. Assim, propõe-se neste estudo uma adaptação da referida equação utilizando-se a correlação entre  $EL_m$  e  $EM_m$  obtida a partir dos 41 estudos avaliados ( $r = 0,85$ ; Tabela 1). Desta forma, faz-se:

$$s^2(\hat{k}_m) = \frac{(EL_m)^2}{(EM_m)^2} \times \left[ \frac{s^2(EL_m)}{(EL_m)^2} - 2 \times \frac{0,85 \times \sqrt{s^2(EL_m) \times s^2(EM_m)}}{EL_m \times EM_m} + \frac{s^2(EM_m)}{(EM_m)^2} \right] \quad (23).$$

A média dos desvios-padrão para  $k_m$  obtidos por intermédio da equação (23) para as 100 amostras aleatórias tomadas da população simulada (0,001403) mostrou-se muito próxima da média dos desvios-padrão obtidos diretamente dos valores amostrais (0,001388). Adicionalmente, verificou-se que o número de intervalos de confiança gerados para  $k_m$  com a aplicação da equação (25) situou-se próximo da proporção esperada em função do índice de confiança utilizado (Figura 3), o que parece indicar a validade de sua utilização.

Estimando-se as exigências de energia líquida a partir do conjunto de dados obtidos do Sistema BR-CORTE (Tabela 2), faz-se a partir das equações (3) e (4) e dos dados expostos na Tabela 2:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{SPDXZ}{SQDX} = \frac{1,7720}{0,5408} = 3,2766 \quad (24);$$

$$\hat{\theta}_0 = \bar{Z} - \beta_1 \times \bar{X} = -1,7307 - 3,2766 \times 0,2289 = -2,4807 \quad (25).$$

Assim, estima-se a  $EL_m$  como (Equações 1 e 7):

$$EL_m = \hat{\beta}_0 = e^{\hat{\theta}_0} = e^{-2,4807} = 0,0836 \quad (26);$$

$$PC = 0,0836 \times e^{3,2766 \times CEM} \quad (27).$$

Estimando-se o erro padrão de  $\hat{\theta}_0$ , faz-se (Equações 5 e 7 e Tabela 2):

$$\sum_{i=1}^{158} (Z_i - \hat{Z}_i)^2 = SDQZ - \hat{\beta}_1 \times SPDZX = 10,2732 - 3,2766 \times 1,7720 = 4,4671 \quad (28);$$

$$s_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^{158} (Z_i - \hat{Z}_i)^2}{158 - 2} = \frac{4,4671}{156} = 0,028635 \quad (29);$$

$$s(\hat{\theta}_0) = \sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{X}^2}{SQDX}\right) \times s_e^2} = \sqrt{\left(\frac{1}{158} + \frac{0,2289^2}{0,5408}\right) \times 0,028635} = 0,054365 \quad (30).$$

A partir de (30) derivam-se a variância e o intervalo de confiança para  $EL_m$  (Equações 9 e 10):

$$s(\hat{\beta}_0) = \pm \hat{\beta}_0 \times [e^{s(\hat{\theta}_0)} - 1] = \pm 0,0836 \times [e^{0,054365} - 1] = \pm 0,0047 \quad (31);$$

$$s^2(EL_m) = 0,0047^2 = 0,000022 \quad (32);$$

$$IC(EL_m)_{0,95} = \hat{\beta}_0 \pm t_{\frac{\alpha}{2}} \times s(\hat{\beta}_0) = 0,0836 \pm 1,975 \times 0,0047 = 0,0836 \pm 0,0093 \quad (33a);$$

$$IC(EL_m)_{0,95} : [0,0743 \leq EL_m \leq 0,0929] \quad (33b).$$

Por intermédio de procedimento iterativo aplicado à equação (27) obtém-se (Equações 10 e 11):

$$EM_m = \hat{Y}_M = 0,1266 \quad (34);$$

$$\ln EM_m = \ln \hat{Y}_M = \hat{Z}_M = \ln(0,1266) = -2,06672 \quad (35).$$

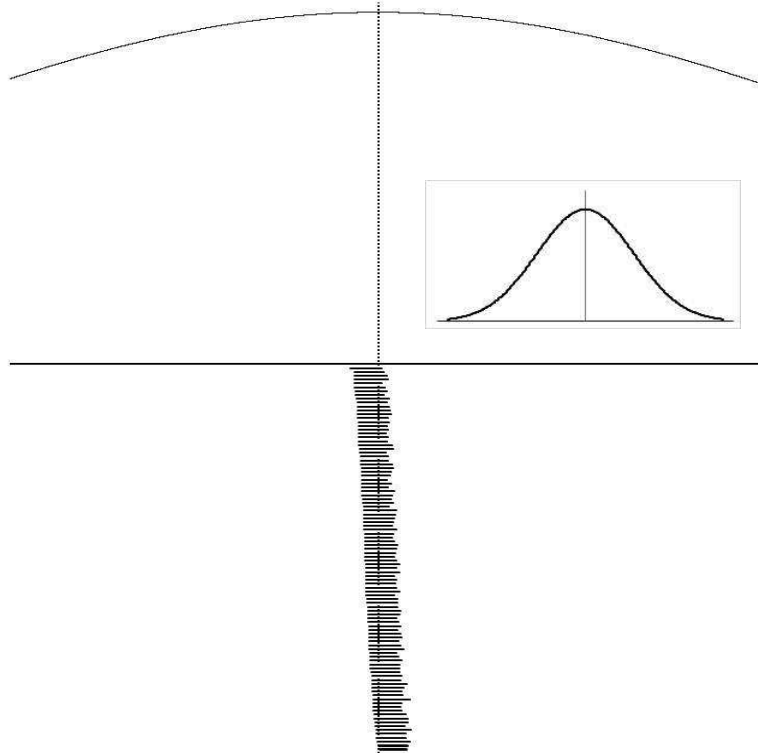


Figura 3 - Distribuição populacional a partir de dados simulados da eficiência de uso da energia metabolizável para manutenção ( $k_m$ ) em bovinos de corte ( $\mu = 0,5809$ ;  $\sigma^2 = 0,0014009$ ). As linhas abaixo correspondem aos intervalos de confiança ( $1 - \alpha = 0.95$ ) construídos a partir de 100 amostras aleatórias ( $n = 100$ ) utilizando-se a razão entre as médias das exigências de energia líquida e metabolizável para manutenção e a derivação de variância populacional apresentada na equação (23). Noventa e oito intervalos contemplaram a média populacional em seu interior.

Por intermédio das pressuposições apresentadas nas equações (13), (14), (15) e (29) e Tabela 2, estimam-se a variância e o intervalo de confiança de  $EM_m$  por:

$$s(\hat{Z}_M) = \sqrt{\left[ \frac{1}{n} + \frac{(X_M - \bar{X})^2}{SQDX} \right] \times s_e^2} = \sqrt{\left[ \frac{1}{158} + \frac{(0,1266 - 0,2289)^2}{0,5408} \right] \times 0,028635} = 0,027118 \quad (36);$$

$$s(EM_m) = s(\hat{Y}_M) = \pm \hat{Y}_M \times [e^{s(\hat{Z}_M)} - 1] = \pm 0,1266 \times [e^{0,027118} - 1] = \pm 0,003480 \quad (37);$$

$$s^2(EM_m) = 0,003480^2 = 0,000012 \quad (38);$$

$$IC(EM_m)_{0,95} = \hat{Y}_M \pm t_{\frac{0,05}{2}} \times s(\hat{Y}_M) = 0,1266 \pm 1,975 \times 0,003480 = 0,1266 \pm 0,0069 \quad (39a);$$

$$IC(EM_m)_{0,95} : [0,1197 \leq EM_m \leq 0,1335] \quad (39b).$$

A partir dos resultados obtidos nas equações (26) e (34), estima-se a eficiência de uso da EM para manutenção como (Equação 16):

$$\hat{k}_m = \frac{EL_m}{EM_m} = \frac{0,0836}{0,1266} = 0,6603 \quad (40).$$

A partir da demonstração exposta na Equação (23) e utilizando-se as estimativas obtidas nas equações (26), (32), (34) e (38) estimam-se a variância e o intervalo de confiança de  $k_m$  como:

$$s^2(\hat{k}_m) = \frac{(EL_m)^2}{(EM_m)^2} \times \left[ \frac{s^2(EL_m)}{(EL_m)^2} - 2 \times \frac{0,85 \times \sqrt{s^2(EL_m) \times s^2(EM_m)}}{EL_m \times EM_m} + \frac{s^2(EM_m)}{(EM_m)^2} \right] \quad (41a);$$

$$s^2(\hat{k}_m) = \frac{(0,0836)^2}{(0,1266)^2} \times \left[ \frac{0,000022}{(0,0836)^2} - 2 \times \frac{0,85 \times \sqrt{0,000022 \times 0,000012}}{0,0836 \times 0,1266} + \frac{0,000012}{(0,1266)^2} \right] \quad (41b);$$

$$s^2(\hat{k}_m) = 0,000561 \Rightarrow s(\hat{k}_m) = 0,023687 \quad (41c);$$

$$IC(k_m)_{0,95} = \hat{k}_m \pm t_{\frac{0,05}{2}} \times s(\hat{k}_m) = 0,6603 \pm 1,975 \times 0,023687 = 0,6603 \pm 0,0468 \quad (42a);$$

$$IC(k_m)_{0,95} : [0,6135 \leq k_m \leq 0,7071] \quad (42b).$$

Desenvolvendo-se raciocínio similar para  $k_g$  e utilizando-se as equações (3) e (18) e os dados expressos na Tabela 2, faz-se:

$$\hat{k}_g = \hat{\beta}_1 = \frac{SPDXY}{SDQX} = \frac{0,1963}{0,5408} = 0,3630 \quad (43).$$

A partir das equações (19) a (21) e utilizando-se os dados expostos na Tabela 2, estimam-se o erro-padrão e o intervalo de confiança de  $k_g$  como:

$$\sum_{i=1}^{158} (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = SDQY - \hat{\beta}_1 \times SPDXY = 0,2152 - 0,3630 \times 0,1963 = 0,1439 \quad (44);$$

$$s_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^{158} (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{158 - 2} = \frac{0,1439}{156} = 0,000922 \quad (45);$$

$$s(\hat{\beta}_1) = s(\hat{k}_g) = \sqrt{\frac{s_e^2}{SDQX}} = \sqrt{\frac{0,000922}{0,5408}} = 0,04130 \quad (46);$$

$$IC(k_g)_{0,95} = \hat{k}_g \pm t_{\frac{0,05}{2}} \times s(\hat{k}_g) = 0,3630 \pm 1,975 \times 0,04130 = 0,3630 \pm 0,0816 \quad (47a);$$

$$IC(k_g)_{0,95} : [0,2814 \leq k_g \leq 0,4446] \quad (47b).$$

O método aqui proposto para estimação da variância e do intervalo de confiança de  $k_g$  é exato devido à natureza linear da relação entre o consumo de EM e a energia retida no CVZ (Equação 17).

Contudo, o procedimento de linearização por anamorfose aplicado à equação (1) poderia ser criticado, uma vez que a minimização dos erros ocorre em uma escala transformada, o que poderia implicar em estimativas não otimizadas dos parâmetros do modelo (MYERS, 1990). Contudo, com a pressuposição de erro multiplicativo (Equação 1) e sendo o modelo de relativa simplicidade matemática, pode-se entender que as estimativas dos parâmetros e de seus respectivos intervalos de confiança apresentem confiabilidade que se aproxime dos índices de confiança nominais adotados. A obtenção direta de intervalos de confiança para parâmetros (e.g., ELM) ou para valores preditos (e.g., EMm) por modelos não lineares é complexa e demanda conhecimento avançado de álgebra matricial e de algoritmos iterativos (SOUZA, 1998). Desta forma, os métodos aqui propostos têm por principal objetivo permitir a obtenção de informações de variância e de intervalos de confiança para o uso da energia em bovinos de forma mais acessível por pesquisadores da área de nutrição de ruminantes. Há de se ressaltar que, apesar do conjunto de dados utilizado para demonstração restringir-se a um único grupo genético e condição sexual, que os valores obtidos para os limites dos intervalos de confiança estimados mostraram-se biologicamente coerentes com os valores expressos por diferentes sistemas nutricionais (NRC, 2000; CSIRO, 2007; MARCONDES et al., 2010).

A aplicação dos intervalos de confiança aqui propostos (Equações 9, 15, 19 e 42) poderá constituir ferramenta útil para o cotejamento entre diferentes trabalhos de pesquisa e para a comparação de diferentes situações alimentares, condições sexuais e grupos genéticos tanto de forma intra-experimental, como na construção de bancos de dados para composição de sistemas nutricionais.



## 4 Conclusões

Aproximações para intervalos de confiança para as exigências de energia líquida e metabolizável para manutenção e para as eficiências de uso da energia metabolizável para manutenção e para ganho em bovinos de corte intervalos são apresentadas, demonstradas e discutidas, fornecendo ferramentas com índice de confiança adequado para o desenvolvimento de trabalhos em exigências nutricionais de bovinos.

## Agradecimentos

Ao CNPq, FAPEMIG e INCT Ciência Animal pelo suporte financeiro para a realização deste trabalho.

BONFÁ, H. C.; DETMANN, E.; CECON, P. R.; VALADARES FILHO, S. C.; REGADAS FILHO, J. G. L. Approaches to confidence intervals for the energy requirements of beef cattle. *Rev. Bras. Biom.*, São Paulo, v.33, n.2, p.216-233, 2015.

- **ABSTRACT:** *The objective of this study was to propose approaches to the confidence intervals for the net and metabolizable energy requirements for maintenance and for the efficiency of utilization of metabolizable energy for maintenance and weight gain in beef cattle. A simulated population of 100,000 animals was used to demonstrate the distributional properties of the energy requirements. Approaches to the confidence intervals were proposed and demonstrated using the properties of the normal distribution, and using approaches based on anamorphosis and on Taylor's series. A dataset of 158 animals was used to demonstrate the application of the proposed approaches. The results demonstrated the feasibility of use of such approaches, which are relevant tools for the practice of inductive statistics and for the inter- and intra-experimental comparisons.*
- **KEYWORDS:** *energy efficiency, inductive statistics, metabolizable energy, net energy, nutrient requirement*

## 5 Referências Bibliográficas

AGRICULTURAL AND FOOD RESEARCH COUNCIL – AFRC. *Energy and protein requirements of ruminants*. Wallingford: CAB International, 1993. 159p.

ALMEIDA, M. I. V.; FONTES, C. A. A.; ALMEIDA, F. Q.; VALADARES FILHO, S. C.; CAMPOS, O. F. Conteúdo corporal e exigências líquidas de energia e proteína de novilhos mestiços Holandês-gir em ganho compensatório. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.30, n.1, p.205-214, 2001.

ALMEIDA, V. V. S.; QUEIROZ, A. C.; SILVA, F. F.; SILVA, R. R.; OLIVEIRA, A. C.; SOUZA, D. R. Body composition and energy and protein requirements of grazing Nelore steers. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.38, n.7, p.1347-1354, 2009.

AMARAL P. M. *Desempenho e exigências nutricionais de bovinos mestiços Holandês x Zebu alimentados com dietas contendo diferentes níveis de proteína*. 2012. 69f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2012.

ARAÚJO, G. G. L.; SILVA, J. F. C.; VALADARES FILHO, S. C.; CAMPOS, O. F.; CECON, P. R.; SIGNORETTI, R. D.; TURCO, S. H. N. Composição corporal e exigências

líquidas de energia e proteína de bezerros alimentados com dietas contendo diferentes níveis de volumoso. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.27, n.5, p.1013-1022, 1998.

BACKES, A. A.; PAULINO, M. F.; ALVEZ, D. D.; RENNÓ, L. N.; VALADARES FILHO, S. C.; LANA, R. P. Composição corporal e exigências energéticas e protéicas de bovinos mestiços leiteiros e zebu, castrados, em regime de recria e engorda. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v. 34, n.1, p. 257-267, 2005.

BLAXTER, K. L. *The energy metabolism of ruminants*. 3.ed. Springfield: Charles C. Thomas, 1962. 329p.

BONILHA, E. F. M.; BRANCO, R. H.; BONILHA, S. F. M.; ARAÚJO, F. L.; CYRILLO, J. N. S. G.; MAGNANI, E. Body chemical composition, tissue deposition rates and gain composition of young Nellore cattle selected for postweaning weight. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.43, p.175-182, 2014.

BUSSAB, W. O.; MORETTIN, P. A. *Estatística básica*. 4 ed. São Paulo: Atual, 1987. 321p.

CASTILLO, L. H. E.; FONTES, C. A. A.; JORGE, A. M.; RODRIGUES, M. P.; FREITAS, J. A.; QUEIROZ, A. C. Exigências nutricionais de bovinos não castrados em confinamento. 1. Conteúdo corporal e exigências líquidas de proteína e energia para ganho de peso. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.26, n.6, p.575-583, 1997.

CECON, P. R.; SILVA, A. R. S.; NASCIMENTO, M.; FERREIRA, A. *Métodos estatísticos*. Viçosa: Editora UFV, 2012. 229p.

CHIZZOTTI, M. L.; VALADARES FILHO, S. C.; TEDESCHI, L. O.; CHIZZOTTI, F. H. M.; CARSTENS, G.E. Energy and protein requirements for growth and maintenance of F1 Nellore x Red Angus bulls, steers, and heifers. *Journal of Animal Science*, Champaign, v.85, n.8, p.1971-1981, 2007.

COMMONWEALTH SCIENTIFIC AND INDUSTRIAL RESEARCH ORGANISATION - CSIRO. *Nutrient requirements of domesticated ruminants*. Collingwood: CSIRO Publishing, 2007. 296p.

DRAPPER, N.R.; SMITH, H. *Applied regression analysis*. New York: John Wiley & Sons, 1966. 407p.

FERRELL, C.L.; OLTJEN, J.W. Net energy systems for beef cattle - concepts, application, and future models. *Journal of Animal Science*, Champaign, v.86, n.10, p.2779-2794, 2008.

FONSECA, M. A.; VALADARES FILHO, S. C.; HENRIQUES, L. T.; PAULINO, P. V. R.; DETMANN, E.; FONSECA, E. A.; BENEDETI, P. D. B.; SILVA, L. D. Exigências nutricionais de bezerros nelores lactentes. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.41, n.5, p.1212-1221, 2012a.

FONSECA, M. A.; VALADARES FILHO, S. C.; HENRIQUES, L. T.; PAULINO, P. V. R.; DETMANN, E.; BENEDETI, P. D. B.; SILVA, L. D.; AMARAL, P. M. Exigências nutricionais de vacas nelores primíparas lactantes. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.41, n.5, p.1222-1230, 2012b.

FREITAS, J. A.; FONTES, C. A. A.; SOARES, J. E.; JORGE, A. M.; ESTRADA, L. H. C. Composição corporal e exigências de energia para manutenção de bovinos (zebuínos e mestiços) e bubalinos não-castrados em confinamento. *Arquivos de Ciências Veterinárias e Zoologia da Unipar*, Umuarama, v.3, n.1, p.19-29, 2000.

- GIONBELLI, M. P. *Desempenho produtivo e exigência nutricionais de fêmeas Nelore em crescimento*. 2010. 106f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2010.
- GONÇALVES, L. C.; SILVA, J. F. C.; VALADARES FILHO, S. C.; CASTRO, A. C. G. Exigências de energia para cinco grupos genéticos de novilhos. *Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.20, n.3, p.421-429, 1991.
- GUIMARÃES FILHO, C.C. *Composição corporal e exigências nutricionais de bezerras holandesas do nascimento aos 100 dias de idade*. 2008. 53f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2008.
- KLEIBER, M. *The fire of life: An introduction to animal energetics*. New York: John Wiley & Sons, 1961. 454p.
- LANA, R. P.; FONTES, C. A. A.; PERON, A. J.; PAULINO, M. F.; QUEIROZ, A. C.; SILVA, D. J. Composição corporal e do ganho de peso e exigências de energia, proteína e macroelementos minerais (Ca, P, Mg, Na e K), de novilhos de cinco grupos raciais. 2. Exigência de energia e proteína. *Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.21, n.3, p.528-537, 1992.
- LIMA, J. C. M. *Consumo e exigência de energia de bezerras da raça Holandesa*. 2013. 42f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2013.
- LOFGREEN, G.P.; GARRETT, W.N. A system for expressing the net energy requirements and feed values for growing and finishing beef cattle. *Journal of Animal Science*, Champaign, v.27, n.3, p.793-806, 1968.
- MACHADO, P. A. S.; VALADARES FILHO, S. C.; VALADARES, R. F. D.; PAULINO, M. F.; PAULINO, P. V. R.; MARCONDES, M. I. Desempenho e exigências de energia e proteína de bovinos de corte em pasto suplementados. *Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia*, Belo Horizonte, v.64, n.3, p.683-692, 2012.
- MARCONDES, M. I.; VALADARES FILHO, S. C.; PAULINO, P. V. R.; VALADARES, R. F. D.; PAULINO, M. F.; NASCIMENTO, F. B.; FONSECA, M. A. Exigências nutricionais de proteína, energia e macrominerais de bovinos Nelore de três classes sexuais. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.38, n.8, p.1587-1596, 2009.
- MARCONDES, M. I.; CHIZZOTTI, M. L.; VALADARES FILHO, S. C.; GIONBELLI, M. P.; PAULINO, P. V. R.; PAULINO, M. F. Energy requirements of zebu beef cattle. In: VALADARES FILHO, S. C.; MARCONDES, M. I.; CHIZZOTTI, M. L.; PAULINO, P. V. R. (Eds.) *Nutrient requirements of zebu beef cattle - BR-CORTE*. 2 ed. Viçosa: Editora UFV, 2010. p.81-106.
- MORAES, E. H. B. K.; PAULINO, M. F.; MORAES, K. A. K.; FIGUEIREDO, D. M.; VALADARES FILHO, S. C.; PAULINO, P. V. R.; COUTO, V. R. M. Exigências de energia de bovinos de corte em pastejo. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.38, n.5, p.933-940, 2009.
- MYERS, R.H. *Classical and modern regression with applications*. Boston: PWS-Kent Publishing Co., 1990. 488p.
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL - NRC. *Nutrients requirements of beef cattle*. 7 ed. Washington, D.C.: Academic Press, 2000. 244p.

- PAIXÃO, M. L. *Desempenho produtivo e exigências nutricionais de bovinos de corte em pastagens de Brachiaria decumbens, com suplementação proteica*. 2008. 110f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2008.
- PAULA, N. F. *Crescimento de bovinos de corte no sistema pasto/suplemento submetidos a diferentes planos nutricionais*. 2012. 115f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2012.
- PAULINO, M. F.; FONTES, C. A. A.; JORGE, A. M.; GOMES Jr., P. Composição corporal e exigências de energia e proteína para ganho de peso de bovinos de quatro raças zebuínas. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.28, n.3, p.627-633, 1999.
- PAULINO, P. V. R.; COSTA, M. A. L.; VALADARES FILHO, S. C.; PAULINO, M. F.; VALADARES, R. F. D.; MAGALHÃES, K. A.; MORAES, E. H. B. K.; PORTO, M. O.; ANDREATTA, K. Exigências nutricionais de zebuínos. I. Energia. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.33, n.3, p.781-791, 2004.
- PAULINO, P. V. R. *Desempenho, composição corporal e exigência nutricionais de bovinos Nelore de diferentes classes sexuais*. 2006. 167f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2006.
- PIRES, C. C.; FONTES, C. A. A.; GALVÃO, J. G.; QUEIROZ, A. C.; PEREIRA, J. C.; PAULINO, M. F. Exigências nutricionais de bovinos de corte em acabamento. II. Exigências de energia para manutenção e ganho de peso. *Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.22, n.1, p.121-132, 1993
- PORTO, M. O.; VALADARES FILHO, S. C.; PAULINO, M. F.; VALENTE, E. E. L.; SALES, M. F. L.; CAVALI, J.; COUTO, V. R. M.; DETMANN, E. Nutritional requirements of energy, protein and macrominerals for maintenance and weight gain of young crossbred Nelore Holstein bulls on pasture. *Revista Brasileira de Zootecnia*, v. 41, n.5, p.734-745, 2012
- PRADOS, L. F.; VALADARES FILHO, S. C.; DETMANN, E.; ZANETTI, D.; SANTOS, S. A.; SATHLER, D. F. T.; MARIZ, L. D. S.; BORGES, A. L. C. C.; NUNES, A. N.; RODRIGUES, F. C.; AMARAL, P. M. Energy and protein requirements of  $\frac{3}{4}$  Zebu  $\times$   $\frac{1}{4}$  Holstein crossbreeds fed different calcium and phosphorus levels in the diet. *Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia*, Belo Horizonte, 2015 (in press).
- ROCHA, A. A.; PAULINO, M. F.; FERNANDES, H. J.; BARROS, L. V.; LOPES, S. A.; GALON, L.; SILVA, A. G.; ALMEIDA, D. M. Net requirements of energy, protein and macrominerals for weight gain of grazing beef cattle castrated at different ages, with and without supplementation. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.2, n.2, p.707-713, 2012.
- ROCHA, E. O.; FONTES, C. A. A. Composição corporal, composição do ganho de peso e exigências nutricionais de novilhos de origem leiteira. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.28, n.1, p.159-168, 1999.
- ROTTA, P. R.; VALADARES FILHO, S. C.; DETMANN, E.; COSTASILVA, L. F. C.; VILLADIEGO, F. A. C.; GALINDO, E. M.; SILVA, F. A. S. Nutrient requirements of energy and protein for Holstein Zebu. *Semina. Ciências Agrárias*, Londrina, v.34, n.5, p.2523, 2013.

SALES, M. F. L.; PAULINO, M. F.; VALADARES FILHO, S. C.; PAULINO, P. V. R.; PORTO, M. O.; COUTO, V. R. M. Composição corporal e requisitos energéticos de bovinos de corte suplementados sob pastejo. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.38, n.7, p.1355-1362, 2009.

SALVADOR, M. *Exigência de energia e proteína para engorda de novilhos azebuados*. 1980. 70f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 1980.

SIGNORETTI, R. D.; SILVA, J. F. C.; VALADARES FILHO, S. C.; PEREIRA, J. C.; ARAÚJO, G. G. L.; QUEIROZ, A. C. Composição corporal e exigências líquidas de energia e proteína de bezerros da raça holandesa alimentados com dietas contendo diferentes níveis de volumoso. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.28, n.1, p.195-204, 1999.

SILVA, A. L. *Desempenho e exigências nutricionais de energia e proteína para bezerros mestiços Holandês×Gir lactentes sob diferentes planos de alimentação*. 2013. 58f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2013.

SILVA, F. F.; VALADARES FILHO, S. C.; ÍTAVO, L. C. V.; VELOSO, C. M.; PAULINO, M. F.; CECON, P. R.; PAULINO, P. V. R.; MORAES, E. H. B. K. Composição corporal e requisitos líquidos e dietéticos de macroelementos minerais de bovinos Nelore não-castrados. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.31, n.2, p.757-764, 2002.

SILVA, L. F. C.; VALADARES FILHO, S. C.; ZANETTI, D.; ROTTA, P. P.; MARCONDES, M. I.; PRADOS, L. F.; PAULINO, M. F.; AZEVEDO, H. O. Energy and protein nutritional requirements for Nellore bulls. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.41, n.5, p.1516-1524, 2012.

SOUZA, G. S. *Introdução aos modelos de regressão linear e não-linear*. Brasília: EMBRAPA-SPI, 1998. 489p.

STEEL, R.G.D.; TORRIE, J.H., DICKEY, D.A. *Principles and procedures of statistics: a biometrical approach*. 3.ed. New York: McGraw-Hill, 1997. 666p.

STUART, A.; ORD, K. *Kendall's Advanced Theory of Statistics: Volume 1: Distribution Theory*. New York: Oxford University press Inc., 2009. 676p.

TEIXEIRA, J. C.; SILVA, J. F. C.; GARCIA, J. A.; SILVA, M. A. Exigências de energia e proteína composição e área corporal e principais cortes da carcaça de seis grupos genéticos de bovídeos. II. Exigências de energia e proteína. *Revista da Sociedade Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.16, n.2, p.181-192, 1987

VALENTE, E. E. L.; PAULINO, M. F.; DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S. C.; CARDENAS, J. E. G.; DIAS, I. F.T. Requirement of energy and protein of beef cattle on tropical pasture. *Acta Scientiarum. Animal Sciences*, Maringá, v.35, n.2, p.417-424, 2013.

VELOSO, C. M.; VALADARES FILHO, S. C.; GESUALDI Jr., A.; SILVA, F. F.; PAULINO, M. F.; VALADARES, R. F. D.; CECON, P. R.; PAULINO, P. V. R. Composição corporal e exigências energéticas e proteicas de bovinos F1 Limousin x Nelore, não-castrados, alimentados com rações contendo diferentes níveis de concentrado. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.31, n.3, p.1273-1285, 2002

VERAS, A. S. C.; VALADARES FILHO, S. C.; SILVA, J. F. C.; PAULINO, M. F.; CECON, P. R.; FERREIRA, M. A.; OLIVEIRA, S. R.; MORAES, E. H. B. K. Eficiência de utilização da energia metabolizável para manutenção e ganho de peso e exigências de energia metabolizável e de nutrientes digestíveis totais de bovinos Nelore não-castrados. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.30, n.3, p.904-910, 2001.

ZERVOUDAKIS, J. T.; PAULINO, M. F.; DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S. C.; LANA, R. P.; CECON, P. R.; QUEIROZ, D. S.; MOREIRA, A. L. Conteúdo corporal e exigências líquidas de proteína e energia de novilhos suplementados no período das águas. *Revista Brasileira de Zootecnia*, Viçosa, v.31, n.1, p.530-537, 2002.

Recebido em 05.02.2015

Aprovado após revisão em 01.04.2015

## CAPÍTULO 2

### ASSESSMENT OF HYPOTHESES TEST FOR THE COMPONENTS OF MEAN SQUARE ERROR OF PREDICTION\*

Edenio DETMANN<sup>1</sup>  
Hugo Colombarolli BONFÁ<sup>2</sup>  
Paulo Roberto CECON<sup>3</sup>  
Fabyano Fonseca e SILVA<sup>4</sup>

- **ABSTRACT:** The analysis of mean square error of prediction is helpful to compare measured values with values simulated by mathematical models. Such analysis is based on the orthogonal decomposition of this quantity into three components which will indicate the probable constraints of the model concerning bias, unequal variance, and incomplete covariation when contrasted to actual values. However, such analysis has been carried out as a descriptive procedure without an adequate hypotheses test framework. Thus, we aimed to develop a single hypothesis test to evaluate the statistical significance of mean square error of prediction components based on likelihood ratio test and chi-square distribution. This proposal was applied to a dataset obtained by simulating characteristics of cattle diets using two different models. We concluded that this test might help the modeler to focus on the real significant constraints of his model and to work on doing the necessary modifications on its mathematical structure in order to improve the accuracy and precision of the simulated values.
- **KEYWORDS:** inference, mathematical models, simulation, validation

#### 1 Introduction

A mathematical model is an equation or a set of equations which represents the behavior of a system (THORNLEY; FRANCE, 2007). Modelling should be seen as a central and integral part of scientific method. However, model evaluation is not a wholly process. Models can be perceived as hypotheses expressed in mathematics and should therefore be subject to the usual process of hypothesis evaluation (FRANCE; KEBREAB, 2008).

The model adequacy evaluation is an essential step in the modeling process because it indicates the levels of precision and accuracy of the model predictions. This is an important phase either to build up confidence in the current model or to allow

---

\* Artigo submetido à Revista Brasileira de Biometria.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: detmann@ufv.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: hugo.bonfa@ufv.br

<sup>3</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Estatística, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: cecon@ufv.br

<sup>4</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: fabyano@ufv.br

selection of alternative models (TEDESCHI, 2006). An ideal testing procedure is one in which the model is used to anticipate behavior of the simulated system under circumstances not previously studied (BALDWIN, 1995) and using a different dataset (GAUCH Jr. et al, 2003). Thus, if the model anticipation is poor, further model refinement is required (BALDWIN, 1995).

As summarized by Tedeschi (2006), several techniques are available to assess model adequacy to ensure impartiality during the decision process of accepting or rejecting the suitability of a given mathematical model. Among those techniques, the analysis of the mean square error of prediction (MSEP) and its components have been applied by several modelers in order to depict different aspects of the model failure to reproduce the real world (KOBAYASHI; SALAM, 2000; GAUCH Jr. et al., 2003; TEDESCHI, 2006).

The analysis of MSEP and its components was firstly applied by Theil (1966) and posteriorly refined by other authors (BIBBY; TOUTENBURG, 1977; KOBAYASHI; SALAM, 2000; GAUCH Jr. et al., 2003; KOBAYASHI, 2004). Such analysis allows orthogonally decomposing the MSEP into three components, which in turn will indicate the probable constraints of the model concerning bias, unequal variance, and incomplete covariation when contrasted to actual values.

However, in spite providing good information with regards model accuracy and precision, the components of MSEP have been interpreted just as descriptive statistics. Such approach sometimes may produce restricted conclusions because the information about significance of each component is not available. Therefore, the information produced from MSEP components could be more helpful when using an adequate hypothesis test besides the mathematical calculations themselves. Under this context, the objective of this work was to develop and present a single hypothesis test to assess the statistical significance of components of the mean square error of prediction.

## 2 Derivation of the method

The prediction error of a model when contrasted to an actual (or measured) value is calculated as:

$$e_i = x_i - y_i \quad (1),$$

where  $e_i$  is the prediction error for the  $i$ -th data, and  $x_i$  and  $y_i$  are the simulated value and measured value, respectively.

According to Kobayashi and Salam (2000), the  $n$  prediction errors obtained in the evaluation or validation of a model can be summarized by the MSEP, whose estimator obtained by the maximum likelihood method is:

$$MSEP = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i^2 \quad (2).$$

The MSEP is proportional to the dissimilarity between simulated values and measured values. Nonetheless, it is not able to qualitatively point out which are the main constraints of the simulated values obtained by the model. To overcome this situation, the MSEP should be decomposed to improve the understanding about the discrepancies between simulated and measured values. Initially, the MSEP (Equation 2) can be partitioned into two components (KOBAYASHI; SALAM, 2000) as follow:

$$MSEP = (\bar{x} - \bar{y})^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) - (y_i - \bar{y})]^2 \quad (3),$$



where  $\bar{x}$  and  $\bar{y}$  are the means of  $x_i$  and  $y_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ), respectively.

The first term of the right side of Equation (3) represents the bias of the simulation from the measurements and can be denoted as square of bias (SB), namely:

$$SB = (\bar{x} - \bar{y})^2 \quad (4).$$

The second term of the right side of Equation (3) is the difference between the simulation and the measurement with regards to the deviations from the means and is denoted as mean square variation (MSV), namely:

$$MSV = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [(x_i - \bar{x}) - (y_i - \bar{y})]^2 \quad (5).$$

Higher MSV values indicate that the model failed to predict the variability of the measurement around the mean. Furthermore, it must be emphasized that SB and MSV are orthogonal and can be addressed separately (KOBAYASHI; SALAM, 2000).

The MSV may be further partitioned into two different components (KOBAYASHI; SALAM, 2000). The final resultant of such partitioning is:

$$MSV = (SD_s - SD_m)^2 + 2 \times SD_s \times SD_m \times (1 - r) \quad (6),$$

where  $SD_s$  and  $SD_m$  are the standard deviations of simulated and measured values, respectively, and  $r$  is the correlation coefficient between the simulated and measured values. It should be noted that all calculations of variances and covariance must be performed using the total number of values ( $n$ ) as denominator because prediction errors, and not experimental errors, are evaluated. In this case, the sum of all simulated errors are not necessarily equal to zero, which only must be observed when simple deviations around a mean of a sample are evaluated.

The first term of the right side of Equation (6), which is named SDDSD, indicates the difference in the magnitude of fluctuation between the simulation and measurement, which means that there was an unequal variation of simulated and measured values (BIBBY; TOUTENBURG, 1977; KOBAYASHI; SALAM, 2000). Accordingly, this term specifies that the model failed to reproduce the dispersion of the values around the mean at the same extent of that simulated for measured values. Namely:

$$SDDSD = (SD_s - SD_m)^2 \quad (7).$$

The second term of the right side of Equation (6) is essentially the lack of positive correlation weighed by the standard deviations, denoted as LCS. Higher LCS values mean that the model failed to simulate the pattern of the fluctuation across the  $n$  measurements (KOBAYASHI; SALAM, 2000), or that there is an incomplete covariation between simulated and measured values (BIBBY; TOUTENBURG, 1979). Namely:

$$LCS = 2 \times SD_s \times SD_m \times (1 - r) \quad (8).$$

From the Equations (3), (4), (6), (7), and (8) it may be perceived that MSEP is orthogonally partitioned into three different components as follow:

$$MSPE = SB + SDDSD + LCS \quad (9).$$

Under the assumption that prediction errors (Equation 1) can be studied according to the properties of the normal distribution, the MSEP (Equation 2) could be interpreted as the variance of prediction errors:

$$MSEP = \hat{\sigma}_e^2 \quad (10).$$

From this, it is assumed that MSEP can be studied following the properties of  $\chi^2$  distribution (SEARLE et al., 1992). Namely:

$$\frac{n \times \hat{\sigma}_e^2}{E(\hat{\sigma}_e^2)} \sim \chi_n^2 \quad (11).$$

In spite of components SDSD and LCS are not entirely independent as they have the same constituents (Equations 7 and 8), the orthogonal partition of MSEP allows addressing separately for each constituent. Under the assumption that MSEP is a variance and that the different constituents can be study separately, it can be assumed that each constituent of MSEP can be considered as a variance component and would present the same distributional properties of the total variance. From this, it can be written:

$$\sigma_e^2 = \sigma_{SB}^2 + \sigma_{SDSD}^2 + \sigma_{LCS}^2 \quad (12).$$

From Equation (12) it is assumed that variance  $\sigma_e^2$  corresponds to a parametric space  $\Omega$  composed by three components which are presupposed independent to each other.

The general hypotheses to be addressed to this problem encompass the evaluation of significance associated with each component of the parametric space  $\Omega$ . Generically, the null and alternative hypotheses are written as follow:

$$H_0 : \sigma_j^2 = 0 \quad (13a),$$

$$H_a : \sigma_j^2 > 0 \quad (13b),$$

where  $\sigma_j^2$  is the j-th component of the parametric space  $\Omega$  to be tested.

By considering the hypotheses aforementioned (Equation 13), it is mandatory to define two different parametric spaces:

$$\Omega = \sigma_e^2 \quad (14),$$

$$\Omega^R = \sigma_e^2 - \sigma_j^2 \quad (15),$$

where  $\Omega$  corresponds to whole parametric space in which all components are present, and  $\Omega^R$  is the restricted parametric space in which the component to be tested is not taken into account.

Therefore, the general hypotheses described in Equation (13) are based on the evaluation of the similarity of the restricted and whole parametric spaces. If there is similarity of these parametric spaces,  $H_0$  is considered to be true (Equation 13a) and the evaluated component is supposed to be non-significant.

The statistics of the likelihood ratio test for this problem would be (RAO, 1973; REGAZZI; SILVA, 2004; ARCHONTOULIS; MIGUEZ, 2015):

$$\Lambda = \left( \frac{{}^R \hat{\sigma}_e^2}{\hat{\sigma}_e^2} \right)^{\frac{n}{2}} = \left( \frac{\hat{\sigma}_e^2 - \hat{\sigma}_j^2}{\hat{\sigma}_e^2} \right)^{\frac{n}{2}} \quad (16),$$

where  ${}^R \hat{\sigma}_e^2$  is the estimate of MSEP when the restriction established by the general hypotheses is taken into account (Equations 13 and 15).

For large samples, the probability distribution of  $[-2 \times \log_e(\Lambda)]$  is approximately  $\chi^2$  with  $\nu$  degrees of freedom, being  $\nu$  the number of components in the parametric space  $\Omega$  minus the number of components in the parametric space  $\Omega^R$ . Therefore, according to the hypotheses showed in Equation (13),  $\nu = 1$  when each component is tested individually. In this way, it can be written:

$$-2 \times \log_e (\Lambda) = -n \times \log_e \left( \frac{\hat{\sigma}_e^2 - \hat{\sigma}_j^2}{\hat{\sigma}_e^2} \right) \sim \chi_{(1)}^2 \quad (17).$$

### 3 Evaluation of the statistical efficiency of the method

In order to evaluate the statistical efficiency of the method, two different scenarios for each component were simulated. The first scenario was simulated to check the ability of the method to point out a lack of significance for each component when the null hypothesis (Equation 13a) is false. On the other hand, the second scenario aimed to check if the method is able to point out correct decision when the null hypotheses (Equation 13a) is true. For each scenario, populations composed by one million records each ( $n = 1,000,000$ ) were simulated according to a bivariate normal distribution  $[(x_i, y_i) \sim N(\mu_{x_p}, \mu_{y_p}, \rho_{xy}, \sigma_{x_p}^2, \sigma_{y_p}^2)]$ . The different scenarios were established by varying the mean ( $\mu_{x_p}, \mu_{y_p}$ ), variance ( $\sigma_{x_p}^2, \sigma_{y_p}^2$ ) and correlation ( $\rho_{xy}$ ) of the normal bivariate distribution according to the values expressed in Table 1.

Table 1 - Characteristics of the bivariate populations simulated to evaluate the statistical efficiency of the method

Component	$x_i$		$y_i$		$\rho$
	$\mu$	$\sigma^2$	$\mu$	$\sigma^2$	
Scenario 1 – $H_0$ is false					
SB	1.0	1.0	1.5	1.0	1.0
SDSD	1.0	1.0	1.0	2.5	1.0
LCS	1.0	1.0	1.0	1.0	0.9
Scenario 2 – $H_0$ is true					
SB	1.0	1.0	1.0	2.5	0.9
SDSD	1.0	1.0	1.5	1.0	0.9
LCS	1.0	1.0	1.5	2.5	1.0

SB, square of bias; SDSD, the difference in the magnitude of fluctuation between the simulation and measurement; LCS, the lack of positive correlation weighed by the standard deviations;  $H_0$ , null hypothesis;  $\mu$ , population mean;  $\sigma^2$ , variance;  $\rho$ , correlation.

All simulations and statistical evaluations were performed using the statistical software R, version 3.2.3. The function “mvrnorm” in the MASS package (version 7.3-45) was used to simulate the bivariate normal populations.

To evaluate the frequencies of correct or incorrect decisions within each scenario, one hundred random samples of each population were taken, creating one hundred datasets with one hundred records each ( $n = 100$ ). These datasets were individually submitted to the hypotheses test (Equation 17) by considering  $\alpha = 0.05$ . The results were computed by each component, and the frequency of acceptance and rejection of null hypothesis was computed for both scenarios (Table 2).

The frequencies of acceptance of null hypothesis when this is true varied from 97 to 100%, averaging 99% (Table 2). This value represents an indicator of confidence coefficient of the test and its complement (1%) was lower than the nominal  $\alpha$  value proposed for the simulation. On the other hand, the frequencies of rejection of null hypothesis when this is false varied from 95 to 100%, averaging 97%. This value is an indicator of the power of the test and its complement (3%) represents an approaching

to the type II error (KAPS; LAMBERSON, 2004), which could be assumed of low magnitude.

In this sense, from simulations results, it can be concluded the method proposed here seems present adequate levels of confidence and adequate power to point out which of the MSEP components are really significant.

Table 2 - Frequencies (%) of the decisions based on hypotheses test carried out using the method on the information obtained from simulated populations in different scenarios

Decision	Scenario	
	H <sub>0</sub> is true	H <sub>0</sub> is false
	SB	
Accept	97	5
Reject	3	95
	SDSD	
Accept	100	4
Reject	0	96
	LCS	
Accept	100	0
Reject	0	100

SB, square of bias; SDSD, the difference in the magnitude of fluctuation between the simulation and measurement; LCS, the lack of positive correlation weighed by the standard deviations; H<sub>0</sub>, null hypothesis.

#### 4 Example of application of the method

To demonstrate the method here proposed, it was utilized a dataset of the dietary total digestible nutrients (TDN) content in cattle diets from the chemical composition of the feeds fitted by two different mathematical models. The first mathematical model (Model I) was proposed by the NRC (2001) and the second mathematical model (Model II) was proposed by Detmann et al. (2008). Details of the models and their components can be found in Detmann et al. (2008).

First, the homoscedasticity of the MSEP obtained with both models (Table 3) can be evaluated by using the F statistics, as follow:

$$\hat{F} = \frac{>MSEP}{<MSEP} = \frac{MSEP_I}{MSEP_{II}} = \frac{6505.8}{3156.2} = 2.0613 \quad (18).$$

The F statistics obtained in Equation (18) presents 107 degrees of freedom (*d.f.* = *n*) for both numerator and denominator, which corresponds to an approximate P value of 0.0001. Thus, one can infer that Model II presented lower (or more homogeneous) MSEP compared to Model I.

The evaluation of the SB component for both models (Table 3, Equation 17) gives:

$$\hat{\chi}_{SB}^2 = -2 \times \log_e(\Lambda) = -n \times \log_e\left(\frac{MSEP - SB}{MSEP}\right) \quad (19a),$$

$$\hat{\chi}_{SB(I)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{6505.8 - 1390.0}{6505.8}\right) \cong 25.71 \quad (\text{P value} < 0.001) \quad (19b),$$

$$\hat{\chi}_{SB(II)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{3156.2 - 76.4}{3156.2}\right) \cong 2.62 \quad (\text{P value} = 0.105) \quad (19c).$$

Table 3 - Decomposition of the mean square error of prediction obtained for the content of total digestible nutrients (g/kg of dry matter) in cattle diets fitted by two different models ( $n = 107$ ; Detmann et al., 2008)

Item	Observed values	Predicted values	
		Model I	Model II
Mean	645.1	607.8	653.8
Standard deviation	68.8	73.7	49.7
Linear correlation	-	0.4976	0.6026
MSPE	-	6505.8	3156.2
SB	-	1390.0	76.4
SDSD	-	24.1	365.2
LCS	-	5091.7	2714.6

MSEP, mean square error of prediction; SB, square of bias; SDSD, the difference in the magnitude of fluctuation between the simulation and measurement; LCS, the lack of positive correlation weighed by the standard deviations.

The evaluation of the SDSD component for both models (Table 3, Equation 17) gives:

$$\hat{\chi}_{SDSD}^2 = -2 \times \log_e(\Lambda) = -n \times \log_e\left(\frac{MSEP - SDSD}{MSEP}\right) \quad (20a),$$

$$\hat{\chi}_{SDSD(I)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{6505.8 - 24.1}{6505.8}\right) \cong 0.39 \quad (\text{P value} = 0.532) \quad (20b),$$

$$\hat{\chi}_{SDSD(II)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{3156.2 - 365.2}{3156.2}\right) \cong 13.15 \quad (\text{P value} < 0.001) \quad (20c).$$

The evaluation of the LCS component for both models (Table 3, Equation 17) gives:

$$\hat{\chi}_{LCS}^2 = -2 \times \log_e(\Lambda) = -n \times \log_e\left(\frac{MSEP - LCS}{MSEP}\right) \quad (21a),$$

$$\hat{\chi}_{LCS(I)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{6505.8 - 5091.7}{6505.8}\right) \cong 163.30 \quad (\text{P value} < 0.001) \quad (21b),$$

$$\hat{\chi}_{LCS(II)}^2 = -107 \times \log_e\left(\frac{3156.2 - 2714.6}{3156.2}\right) \cong 210.43 \quad (\text{P value} < 0.001) \quad (21c).$$

By assuming  $\alpha = 0.05$ , it can be inferred that Model I presents constraints associated with bias (SB) and incomplete covariation (LCS) ( $P < 0.05$ ), despite of produces simulated data with a range of variation similar to that one observed for actual values. On the other hand, Model II simulates accurately the real values, but it presents constraints associated with simulating equal variance (SDSD) and also produces simulated data with incomplete covariation (LCS) with real data ( $P < 0.05$ ).

From the results presented in Equations (19), (20), and (21), it was possible to point out that evaluated models present different characteristics with regards the simulation constraints. Such information would be helpful to the modelers guide the efforts to improve the mathematical structure of each model.

## 5 Discussion

The simulation vs. measurement based on MSEP is straightforward, where the whole MSEP indicates the overall deviation of the model output from the measurement, and the MSEP components will represent the different aspects of the overall deviation. Thus, for direct comparisons between model output and measurement, the MSEP-based analysis seems better than the commonly practiced correlation-regression analysis (KOBAYASHI; SALAM, 2000) because such analysis tends to focus more on the fitting of the regression than do on the actual limitations of the model itself. However, a single decomposition of the MSEP without guidance based on inductive statistics can be difficult for the true identification of the model's constraints because the modeler will not have tools to make decisions about the actual relevance of each component to the overall value of MSEP.

Regazzi and Silva (2004) have used the likelihood ratio test based on  $\chi^2$  distribution to evaluate the equality of parameters in non-linear models. The test developed by these authors and the hypotheses test proposed here have been based on the same statistics (Equation 16). They worked with a great number of simulated samples and found that occurrence of type I error decreases and becomes closer to the chosen  $\alpha$  value as the sample size increases. This statement along with simulation presented here (Table 3) seems to give a theoretical support that the likelihood ratio test here proposed can be useful also to evaluate the significance of the MSEP components. On the other hand, other statistical approaches to evaluate components of MSEP have been proposed (*e.g.*, KOBAYASHI; SALAM, 2000). Nonetheless, those approaches demand an estimate of error variance which would only be obtained when experimental replications are available. It is rather difficult to obtain as most models are either evaluated or validated by using samples of measured values without any experimental structure (*i.e.*, without replicates). Therefore, the approach here presented is simpler with regards pre-requisites for applying, because an estimate of error variance is not necessary (Equation 17).

The model evaluation or validation is a step that assures if the model yields simulated results in quantitative agreement with results obtained in studies of the real system or, in other words, the model accurately simulates reality and does so for the right reasons (BALDWIN, 1995). The identification and acceptance of wrongness of a model is an important step towards the development of more reliable and accurate models. The assessment of the adequacy of mathematical models is only possible through the use of a combination of several statistical analyses and proper investigation regarding the purposes for which the mathematical model was initially conceptualized and developed for. The usefulness of a model should be assessed for its sustainability for a particular purpose (TEDESCHI, 2006). From these statements, it is understood that association of statistical tests with the algebraic decomposition of MSEP might help the modeler to focus on the real significant constraint of his model and to work on doing the necessary modifications on the mathematical structure of the model for improving the accuracy and precision of the simulated values.

In spite of the results obtained here, it must be emphasized that the hypothesis test based on  $\chi^2$  distribution should be seen as a relative inference tool rather than an absolute diagnostic of the model. This statement means that the results obtained by its application will point out the main actual constraint of the model and, therefore, which

are the main refinements to be done on the mathematical structure of the model. More refined evaluations of the model predictions must be performed by using simultaneously several mathematical approaches for that.

## 6 Conclusions

The test of hypothesis based on likelihood ratio can be properly used to evaluate the statistical significance of the components of the mean square error of prediction. This test might help the modeler to focus on the real significant constraints of his model and to work on doing the necessary modifications on its mathematical structure in order to improve the accuracy and precision of the simulated values.

## Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge to the Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) and Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Ciência Animal (INCT - Ciência Animal) for financial support.

- DETMANN, E.; BONFÁ, H. C.; CECON, P. R.; SILVA, F. F. Proposição de teste de hipóteses para os componentes do quadrado médio do erro de predição. *Rev. Bras. Biom.*, Lavras, v.XX, n.X, p.XXX-XXX, 201X.
- *RESUMO: A avaliação do quadrado médio do erro de predição constitui importante ferramenta para a comparação de valores reais com valores simulados por modelos matemáticos. Esta avaliação está baseada na decomposição original do quadrado médio do erro de predição em três componentes, os quais indicarão os prováveis entraves do modelo em relação ao viés, variâncias heterogêneas e incompleta covariação em relação aos valores reais. Contudo, esta análise tem sido conduzida como um procedimento descritivo, sem a orientação dada por um teste de hipóteses adequado. Desta forma, objetivou-se desenvolver um teste de hipóteses simples para a avaliação dos componentes do quadrado médio do erro de predição baseando-se no teste da razão de verossimilhança e na distribuição de qui-quadrado. Esta aproximação foi aplicada sobre um conjunto de dados obtido pela simulação de características da dieta de bovinos utilizando-se dois diferentes modelos matemáticos. Concluiu-se que o teste proposto pode auxiliar profissionais na área de modelagem para a identificação dos entraves ou limitações reais dos modelos desenvolvidos, orientando-os no desenvolvimento de modificações necessárias na estrutura matemática dos modelos de forma a ampliar a exatidão e a precisão dos valores simulados.*
- *PALAVRAS-CHAVE: inferência, modelos matemáticos, simulação, validação*

## 7 References

- ARCHONTOULIS, S. V.; MIGUEZ, F. Nonlinear regression models and applications in agricultural research. *Agron. J.*, Madison, v.107, p.786-798, 2015.
- BALDWIN, R. L. *Modeling ruminant digestion and metabolism*. London: Chapman & Hall, 1995. 587p.
- BIBBY, J.; TOUTENBURG, H. *Prediction and improved estimation in linear models*. New York: John Wiley & Sons, 1977. 188p.
- DETMANN, E.; VALADADES FILHO, S. C.; PINA, D. S.; HENRIQUES, L. T.; PAULINO, M. F.; MAGALHÃES, K. A.; SILVA, P. A.; CHIZZOTTI, M. L. Prediction of the energy value of cattle diets based on the chemical composition of the

feeds under tropical conditions *Anim. Feed Sci. Technol.*, Amsterdam, v.143, p.127-147, 2008.

FRANCE, J.; KEBREAB, E. Introduction. In: FRANCE, J.; KEBREAB, E. (Eds.) *Mathematical modelling in animal nutrition*. Wallingford: CAB International, 2008. p.1-11.

GAUCH Jr., H. G.; HWANG, J. T. G.; FICK, G. W. Model evaluation by comparison of model-based predictions and measured values. *Agron. J.*, Madison, v.95, p.1442-1446, 2003.

KAPS, M.; LAMBERSON, W. *Biostatistics for animal science*. Wallingford: CABI Publishing, 2004. 445p.

KOBAYASHI, K. Comments on another way of partitioning mean square deviation proposed by Gauch et al. (2003). *Agron. J.*, Madison, v.96, p.1206-1208, 2004.

KOBAYASHI, K.; SALAM, M. U. Comparing and measured values using mean squared deviation and its components. *Agron. J.*, Madison, v.92, p.345-352, 2000.

NATIONAL RESEARCH COUNCIL – NRC. *Nutrient requirements of dairy cattle*. 7 ed. Washinton D. C., 2001. p.381.

RAO, C. R. *Linear statistical inference and its application*. 2 ed. New York: John Wiley & Sons, 1973. 656p.

REGAZZI, A. J.; SILVA, C. H. O. Test for parameters equality in nonlinear regression models. I. Data in the randomized complete design. *Rev. Mat. Estat.*, São Paulo, v.22, p.33-45, 2004.

SEARLE, S. R.; CASELLA, G.; McCULLOCH, C. E. *Variance components*. New York: John Wiley & Sons, 1992. 501p.

TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of linear models. *Agr. Syst.*, Amsterdam, v.89, p.225-247, 2006.

THEIL, H. 1966. *Applied economic forecasting*. Amsterdam: North Holland Publishing Co., 1966. 474p.

THORNLEY, J. H. M., FRANCE, J. *Mathematical models in agriculture*. Quantitative methods for the plant, animal and ecological sciences. 2 ed. Wallingford: CAB International, 2007. 906p.

Received in xx.xx.20xx

Approved after revised in xx.xx.20xx



## CAPÍTULO 3

### Bayesian and frequentist approaches for fitting the gamma-time-dependent model to describe neutral detergent fiber degradation\*

Hugo Colombarolli BONFÁ<sup>1</sup>  
Edenio DETMANN<sup>2</sup>  
Fabyano Fonseca e SILVA<sup>3</sup>  
Janderson Florêncio FIGUEIRAS<sup>4</sup>  
Luiz Eduardo MORAES<sup>5</sup>

- **ABSTRACT:** The aim of this study was to evaluate and compare the efficiency of the Bayesian and frequentist approach to describe the rumen degradation of neutral detergent fiber by using a gamma-time dependent model. A simulated data was composed by four scenarios: regular restriction in the number of incubation times, random loss of incubation times, loss of specific parts of the degradation curves, variation in the precision of the incubations procedures. The scenarios was divided in four subset each, and the subsets was simulated ten time in order to allow a more huge evaluation of the ability of different approaches to adjust in front of different scenarios. Two real datasets was used to evaluate the inferences approaches, these real datas encompassed the evaluation of NDF degradation of a tropical grass (*Brachiaria decumbes*). The model was adjusted according their characteristic approach and compared by plots and assessors. The bayesian approach and frequentist approach presented reliable estimates of the degradation parameters for the majority of the datas tested. Therefore, in specific cases with short random records number, the bayesian approach showed greater bias of the estimates of incubation residue and estimates of degradation rate without a biological coherence of the parameters, compared to frequentist inference. In another words, the bayesian approach fitted with prior diffuse, presented less flexible than frequentist inference. Nevertheless, it is emphasized the importance of the background information before the modeling, especially for the bayesian approach, in order to define proper prior distributions. Future thorough studies about the influence of non-informative prior for the parameters are necessary.
- **KEYWORDS:** gamma-time-dependent, in situ method, inference, ruminal degradation

---

\* Artigo submetido à Revista Brasileira de Biometria.

<sup>1</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: hugo.bonfa@ufv.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: detmann@ufv.br

<sup>3</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: fabyanofonseca@ufv.br

<sup>4</sup> Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Zootecnia, CEP: 36570-900, Viçosa, MG, Brasil. E-mail: janderson.figueiras@gmail.com

<sup>5</sup> University of California - Davis, Departamento de Ciência Animal, CA 95616, Davis, CA, Estados Unidos da América. E-mail: lemoraes@ucdavis.edu

### 1 Introduction

The utilization of the frequentist inference, or the classical inference, was almost unanimous among the scientists in the early years of twentieth century. However, with the computational improving, the Bayesian inference reappeared as a viable alternative

to statistical modeling and analysis. Bayesian inference was avoided by researchers for a long time because of the highly complex mathematical resolution, which was not considered viable to be made by using simple algebraic algorithms (LESAFFRE; LAWSON, 2012). However, at early 1960's, the Bayesian inference reappeared in a theoretical paper (JEFFREYS, 1961), but just became widely available to be used from 1990's (GELFAND et al., 1990), when complex integration resolutions could be solved by simulation.

One of the most important objectives of the statistics is to adjust or build models. When classical frequentist inference is applied on data, population parameters are considered fixed effects; so the information about the parameters is only obtained by sampling. However, when using Bayesian inference, the population parameters are considered random effects and can be described probabilistically. Therefore, for the process of Bayesian estimation, a smaller dataset would be required than do the frequentist inference. In other words, the model fit by Bayesian method presents lower dependence from data size compared to the frequentist approach (BEAUMONT; RANNALA, 2004). Recently, it has got more difficult to perform experiments with a great number of animals because the high labor, high cost and, mainly, the stricter ethical regulations. In a particular way, experiments where a surgical intervention is necessary have been more affected by the ethical committee exigencies. From this, it can be stated that evaluation of the rumen kinetic parameters (*i.e.*, degradation and transit) is one of the most affected evaluations, because the majority of the experiments are performed by using *in situ* methodology. Therefore, more flexible statistical approaches in terms of number of experimental animals have been demanded.

When studies on ruminal kinetics are performed in the tropics, the degradation of the neutral detergent fiber (NDF) must be considered one of the most relevant information as NDF is the main source of energy for cattle production (DETMANN et al., 2008) and around 90 to 95% of its utilization occur in the rumen (HUHTANEN et al., 2010). The ruminal degradation pattern of NDF is described by nonlinear models and follows the action-mass law. The rumen kinetics of NDF is typically a time-dependent process as the probability of a fiber particle either escapes to the lower-gut or be degraded by microorganisms varies along the residence time in the rumen. The inclusion of time-dependency of the rumen kinetics in the nonlinear description is most commonly incorporated by using gamma time-dependent models (ELLIS et al., 1994).

However, the adjusting of nonlinear models can be complexed, mainly for rumen kinetics data, because the errors may not follow a normal distribution. Sometimes, the normal distribution is supposed to be asymptotically achieved. However, the actual data number is normally low. On the other hand, the pattern of degradation or transit is described along time, which creates a typical heteroscedasticity or a "funnel" effect (DETMANN et al., 2001) and a dependency between errors. As an alternative to the frequentist approach, the Bayesian methodology does not require the assumption of normality as a necessary condition and the inferences on the parameters are made on their *a posteriori* distribution. In this case, a model is supposed for each dataset and the parameters of each model are compared based on their *a posteriori* distributions (ROSSI et al., 2010).

However, it seems necessary to evaluate the model adjustment capacity and to compare the parameter estimates obtained by Bayesian and frequentist approach, in order to clarify the advantages, disadvantages, and limitations of each approach for ruminal degradation modeling. Therefore, the aim of this study was to evaluate and to compare the efficiency of the Bayesian and frequentist approaches to describe the ruminal degradation of neutral detergent fiber by using a gamma time-dependent model.

## 2 Materials and methods

### 2.1 Model applied to interpret ruminal degradation of NDF

The basic model applied to interpret the ruminal degradation profile of NDF was based on a gamma-2 order of time-dependency according to derivations of Van Milgen et al. (1991):

$$R(t) = U \times (1 + c \times t) \times \exp(-c \times t) + I \quad (1),$$

where  $R(t)$  is the residue of NDF at incubation time  $t$  (%);  $U$  is the potentially degradable fraction of NDF (%);  $c$  is the common rate of lag and degradation ( $\text{h}^{-1}$ ); and  $I$  is the asymptote reached when  $t \rightarrow \infty$ , which means the undegradable fraction of NDF (%).

It must be noted that parameters  $U$  and  $I$  represent the two fractions of the NDF, and their sum must reproduce the total NDF (100%), as this fiber analytical approach does not encompass a soluble fraction (MERTENS, 2005).

### 2.2 Simulated data

The simulated data used for the model adjusting and evaluation by the two statistical approaches consisted of a main database split into four scenarios and four subsets for each scenario. Each complete scenario consisted of 145 observations simulated according to the model described in Equation (1). The values of the parameters of the Equation (1) were assumed to be the average values obtained in a previous work carried out by Figueiras (2013), who evaluated the degradation of NDF from a tropical grass in cattle under grazing. The average values were 62.92, 37.08, and 0.059 for  $U$ ,  $I$ , and  $c$ , respectively. Each subset was simulated according to a theoretical hour-by-hour incubation design, then varying from 0 to 144 hours of incubation. From the whole subsets ( $n = 145$ ), different scenarios were produced as described below.

**Scenario A – Regular restriction in the number of incubation times:** the subsets were produced to simulate a decrease in the number of incubation times; however, presenting an equal time interval between incubation points. Therefore, the four subsets represented sampling designs with degradation times equally spaced in 3, 6, 12 and 24 hours (subsets A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, A<sub>3</sub>, and A<sub>4</sub>, respectively). In this way, these subsets were composed by 48, 24, 12 and 6 incubation points, respectively. To simulate this scenario, the standard deviation of the residual random error among incubation points was assumed to be equal to 1.0.

**Scenario B – Random loss of incubation times:** the subsets were produced to simulate different degrees of random losses of incubation times. Therefore, the four subsets represented sampling designs with degradation times randomly distributed from 0 to 144 hours of incubation. In this sense, these subsets were composed by 48, 24, 12 and 6 incubation points (subsets B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, B<sub>3</sub>, and B<sub>4</sub>, respectively). To simulate this scenario, the standard deviation of the residual random error among incubation points was assumed to be equal to 1.0.

**Scenario C – Loss of specific parts of the degradation curves:** the subsets were produced to simulate the loss of incubation points located at the same part of the degradation curve. This scenario was composed by four subsets (C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, and C<sub>4</sub>), where each subset consisted of 75% of the total subset record number. Each subset was divided into four parts (four quarters); three of these parts composed each subset. Therefore, each subset have 108 records, where the first subset consist in the main

database without the first part (without initial quarter), the second subset consist, of the main database without the second part (without second quarter) and so on. To simulate this scenario, the standard deviation of the residual random error among incubation points was assumed to be equal to 1.0.

**Scenario D – Variation in the precision of the incubation procedures:** the subsets were produced to simulate obtaining information with different levels of precision. This scenario was composed by four subsets (D<sub>1</sub>, D<sub>2</sub>, D<sub>3</sub>, and D<sub>4</sub>) with 145 records each. However, they were simulated considering the standard deviation of the residual random error among incubation points of 2.0, 2.5, 3.0, and 3.5, respectively.

For all scenarios, each subset was simulated ten times in order to allow a more robust evaluation of the ability of different approaches to adjust in front of different scenarios.

The objective of the four scenarios were: A, to evaluate circumstances where minimal sampling procedures are demanded; B, to evaluated circumstances where an intense loss of information occurred; C, to evaluate the robustness of the statistical approach regarding the loss of a specific sequential number of samples; and D, to evaluate the robustness of the statistical approach when a low-precision dataset are available to estimate the parameters (Figure 1).

### 2.3 Real data

After the evaluation of simulated data, two real datasets were used to evaluate the Bayesian and frequentist approaches. Both datasets encompassed the evaluation of NDF degradation of a tropical grass (*Brachiaria decumbens*) in two experiments carried out according to complete 5 × 5 Latin square design with five treatments, which consisted of different supplementation schemes for growing cattle under grazing (FIGUEIRAS, 2013). The NDF degradation was measured within each experimental period (five for each experiment) according to the incubation times: 0, 3, 6, 9, 12, 24, 36, 48, 60, 72, 96, 120, and 144 hours. Therefore, ten different adjustments were performed (one for each treatment). In spite of few losses of bags (incubation points), each adjustment was performed, on average, with  $n = 65$ . Details of the treatments and incubation procedures can be found in Figueiras (2013).

### 2.4 Model adjustment

The adjustment of the models following the frequentist approach was performed according the ordinary least squares method with the solutions obtained by the Gauss-Newton algorithm using the lme4 package from the R software (BATES et al., 2015). The significance of the parameters was checked using the asymptotic confidence intervals.

For the adjustment according to Bayesian approach, the variance components were defined by  $\tau = \frac{1}{\sigma^2} \sim Gam(10^{-3}, 10^{-3})$ . Gamma and uniform distributions are standard choices of diffuse informative prior distributions to the variance components of model (GELMAN et al., 2004). Considering that rumen kinetics data errors may not follow a normal distribution, the choice of priors distributions for the variance components was based on the construction of minimally informative priors. For model parameters was specifies prior distributions:  $U, I, c \sim Gam(10^{-3}, 10^{-3})$  where *Gam* denotes the gamma distribution (for which *Gam*(*a*, *b*) has mean =  $a/b$  and variance =  $a/b^2$ ).

The *a posteriori* distribution was simulated by Monte Carlo Markov Chain (MCMC) process by using the statistical software WinBUGS (LUNN et al., 2009). Briefly, the *a posteriori* distribution is simulated by the MCMC method by constructing Markov Chains, for which partial distributions approximate the posterior density, and using Monte Carlo integration to compute integrals and expectations. The Monte Carlo error approximation is reduced by increasing the number of samples up to a point at which no further gain in accuracy is achieved in the approximation of the posterior summaries. Two chains with overdispersal initial values were determined for each parameter and chain mixing, auto-correlation, posterior distribution, and the Heildelberger-Welch diagnostic (HEIDELBERGER; WELCH, 1992). A minimum of 500,000 iterations was determined by the simulation, of which 200,000 iterations composed a burn-in period, and after the burn-in period 300,000 iterations were saved to obtain posterior distribution estimates. The chains were thinned by a factor of 100, totaling 3,000 simulated values in a final sample.

In the Bayesian approach, the *a posteriori* probabilities of the parameters were calculated as the proportion of chain iterations of the MCMC sampling method spent in each subset.

## 2.5 Evaluation of adjustment and comparison of parameter estimates

The quality of the adjustments was evaluated through the asymptotic standard deviation of the residual error (ASDR) using the likelihood estimator as follow:

$$ASDR = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2}{n}} \quad (2),$$

where  $\hat{Y}_i$  is the predict value,  $Y_i$  is the simulated or real (observed), and  $n$  is the number of records.

Specifically for the simulated dataset, the accuracy of the estimates for each parameter was evaluated by computing the bias ( $B$ ). Such an assumption was based on the fact that estimates of the parameters obtaining by each method should converge to the parametric values used to simulate the scenarios and subsets. The average estimates of  $B$  (%) were calculated as:

$$B = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{\theta}_i - \theta)}{\theta} \times 100 \quad (3),$$

where  $\hat{\theta}_i$  is the estimate of the parameter in the evaluation  $i$  for an specific scenario and subset ( $i = 1, 2, \dots, 10$ ), and  $\theta$  is the parametric value.

The pattern of the average difference between the estimates of the parameters obtained by Bayesian and frequentist approaches was evaluated by using a paired t-test ( $\alpha = 0.05$ ).

When necessary, descriptive plots were also drawn to a better understanding of the pattern of results.

The statistical computations was performed using the R statistical software (R Development Core Team, 2015), except the MCMC method that was performed in the R statistical software (R Development Core Team, 2015) assisted by statistical software WinBUGS (LUNN et al., 2000).

## 3 Results

### 3.1 Simulated data

In the Bayesian simulation, the samples came from 300,000 iterations, already discounting the burn-in period, which resulted in 3,000 total record iterations. This total record number in each subset was verified for convergence of chains by the Heidelberger-Welch diagnostic. From this diagnostic, it was not registered any non-convergence in the subsets. Thus, 3,000 record iterations were sufficient to achieve convergence. Similarly, the frequentist approach did not show any case of unsuccessful convergence. During the model fitting, it was not determined any border for the parameters estimate, in order to evaluate if the approaches would be able to estimate the parameters in accordance with the biological coherence borders.

At first glance, both inferences showed a similar performance. On average, the parameters estimates, precision (Table 1) and bias, and the residual error (Table 2) were very similar to each other when both methods were numerically contrasted. It is important to note that for most subsets the sums of the potentially degradable and undegradable fractions ( $U+I$ , Table 1) were very close to 100%, which agreed with the biological and chemical assumptions of NDF degradation and added reliability to the model adjustments (Table 1). However, subset  $B_4$ , which was developed to test the highest level of random loss of incubation points, showed discrepant values for  $U+I$  for both approaches (103.57 for Bayesian and 103.09 for frequentist). In a particular way, the adjustment of the subset  $B_4$  through Bayesian approach lead to estimates of parameter  $c$  that did not match any expected biological pattern (Table 1) and with a highly prominent bias (Table 2).

In spite of being very similar, the estimates of the undegradable fraction  $I$  differed between Bayesian and frequentist approaches ( $P<0.05$ ). On average,  $I$  fraction was higher for the frequentist approach (Table 3). It must be emphasized that this pattern was kept even when not considering subset  $B_4$  in the paired t-test (data not shown). There was no difference between approaches with regard parameters  $U$  and  $c$  ( $P\geq 0.16$ ).

### 3.2 Real dataset

In general, the pattern of the results regarding  $U+I$  obtained for the real dataset followed what has been observed for the simulated dataset (Table 4). There was little variation among treatments within each experiment for the frequentist approach, and for Experiment 2 when Bayesian approach was applied. However, the Bayesian approach tended to over and underestimate the fractions  $U$  and  $I$  for treatments 2 and 5 within Experiment 1, respectively (Table 4), when compared with the other treatments and with the estimates obtained with frequentist approach. It must be pointed out that those treatments were the ones with the lowest precision among all evaluated treatments.

In spite of that behavior, there were no differences between approaches with regard the parameter estimates ( $P\geq 0.19$ , Table 3). Nonetheless, similarly to the simulated dataset, the average estimates of parameter  $I$  were numerically higher for the frequentist approach (Table 3). The relevance of this pattern will be discussed with more details in the next section.

## 4 Discussion

The essence of the Bayesian method is there is no logical distinction between model parameters and data (BEAUMONT; RANNALA, 2004). Both of them are random variables with a joint probability distribution that is specified by each evaluated model. The aim of the Bayesian inference is to calculate the posterior distribution of the parameters, the conditional distribution of parameters given a data, assisted by a prior distribution. Conversely, the frequentist approach is based on maximizing the probability of the data given the parameters (that is, maximizing the likelihood as a function of the parameter for a fixed dataset).

In fact, both inferences aim to estimate the parameters with the least possible error. The Bayesian inference has a specific advantage comparing to frequentist inference that is to consider the *a priori* information (SILVA et al., 2011; 2013). However, it is common in practice to utilize a default or objective prior distribution. Then, the Bayes theorem would not provide any guarantee as to performance (BAYARRI; BERGER, 2004). Another problem is the choice of an improper prior distribution. In this case, the Bayes theorem may generate an incorrect performance and, consequently, an improper posterior distribution.

In terms of mathematic, the results coming from frequentist inference and Bayesian inference with non-informative priors would tend to be the same. Browne and Draper (2006) compared the Bayesian approach (without prior influence) and frequentist approach (likelihood-based) in different types of models and concluded that both methods lead to similar and unbiased estimates. Such a conclusion agrees, in general, with the results obtained for the scenarios A, C, and D, where both approaches seems to present similar robustness in front of an organized minimal sampling (Scenario A); an loss of an entire section of the curve, but preserving the other parts (Scenario C); and a dataset with increased random error (Scenario D).

However, the choice of non-informative prior distribution can affect the inferences; noticeably in cases where the number of records/groups evaluated are small or when the variance of the records/group is close to zero (GELMAN, 2004; 2006). For instance, the uniform distribution is commonly considered an improper prior distribution for the variance parameter. The uniform distribution  $(0, A)$  (*i.e.* uniform distribution with values in the range 0 and  $A$ ) can produce a limited proper posterior distribution as  $A \rightarrow \infty$ , as long as the number of records/groups. Thus, for a finite but sufficiently large  $A$ , the inferences are not sensitive to the choice of  $A$  (GELMAN, 2006). In order to evaluate both inferences as balanced as possible in this paper, it was used a “weakly informative prior” gamma distribution  $(U, I, c \sim \text{Gam}(10^{-3}, 10^{-3}))$  for the parameters. The choice of gamma distribution was based on the fact that only positive values belongs to this distribution and none parameter of the evaluated model can assume negative values (Equation 1).

However, the constraint arisen from limit data availability along with using a non-informative prior distribution seemed to affect the estimates for subset  $B_4$ , leading to great bias of the estimates of incubation residue (Figure 2) and estimates of degradation rate without a biological coherence (Tables 1 and 2). It should be noted that a similar pattern was not observed for frequentist approach (Figure 3). When random losses are simulated, it is not possible to assure where the remained incubation points would be located regarding time. Therefore, it is possible to happen that points may be located very close to each other, which could cause a lack of agreement between the real information and the *a priori* distribution used here. Therefore, it may suggest that under a high level of random loss of incubations points, a more detailed study of the *a priori* distribution (maybe coming from information from other studies or meta-analyses)

must be done to assure reliability and accuracy of predicted values. It must be highlighted that utilization of Bayesian approach to rumen kinetics is not a routine in nutritional studies and knowledge on distribution of the related parameters is not available yet.

In spite of the previous discussion, one constraint was observed for Bayesian approach. The evaluation of simulated dataset showed a systematic underestimation of undegradable fraction of NDF (Tables 1, 2, and 3). The dimension of fractions  $U$  and  $I$  are inherent to the feed and cannot be influenced by dietary characteristics (DETMANN et al., 2008). In other words, when a diet favors or disfavors the ruminal degradation of fiber, its effects would be perceived only on degradation rate. In spite of a non-significant difference between the approaches evaluated here, the evaluation of the real dataset showed numerically lower estimates of fraction  $I$  when the Bayesian approach was used (Tables 3 and 4). The fraction  $I$  was evaluated in both experiments by Figueiras (2013) using a long-term incubation procedure (288 hours) as recommended by Valente et al. (2011). This procedure is used based on the minimal time necessary to incubation residue becomes statistically similar to the residue theoretically obtained at infinite time. Figueiras (2013) found estimates for  $I$  fraction of 29.68 and 33.76% in Experiments 1 and 2, respectively. From this, it is noted that frequentist approach produced estimated closer to that values (26.31 and 32.61%) when compared to Bayesian approach (22.51 and 32.48%). Moreover, the high variation among treatments for the estimates of  $U$  and  $I$  fractions in Experiment 1 (Table 4) indicates problems with regard Bayesian approach. The forage evaluated within each experiment was the same. Therefore, variations between treatments must be only minimal and random as the dimensions of the fractions are inherent to the feed itself and cannot vary according to different supplements.

Mertens (2005) highlighted that the final points of an incubation procedure should provide information that allow a good adjustment of the model regarding asymptote. In other words, at least the final incubation point should be located on a specific time in order to give reliable information of the dimension of undegradable fraction and allow a more accurate adjustment. The endpoint at 144 hours seemed a good procedure when the frequentist approach was used, but not when Bayesian approach was applied. It may be a reflex of the lack of a more reliable *a priori* information, as discussed before.

## 5 Conclusions

The Bayesian approach and frequentist approach presented reliable estimates for the majority of the datas tested. Therefore, in specific cases with short random records number, the bayesian approach showed greater bias of the incubation residue estimates and estimates of degradation rate without a biological coherence, compared to frequentist inference. In another words, the bayesian approach fitted with non-informative prior, presented less flexible than frequentist inference. Nevertheless, it is emphasized the importance of the background information before the modeling, especially in a Bayesian approach, in order to define proper prior distributions. Future thorough studies about the influence of non-informative prior correlated to parameters estimated are necessary.

## Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge to the Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Fundação de Amparo à Pesquisa



do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) and Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Ciência Animal (INCT - Ciência Animal) for financial support.

- BONFÁ, H. C.; DETMANN, E.; SILVA, F. F.; FIGUEIRA, J. F. Comparação da abordagem bayesiana e frequentista para ajuste de modelos não-lineares: uma aplicação ao modelo gama-tempo-dependente para descrição de degradação da fibra em detergente neutro. *Rev. Bras. Biom.*, Lavras, v.XX, n.X, p.XXX-XXX, 201X.
- **RESUMO:** *Objetivou-se avaliar e comparar a eficiência das inferências Bayesiana e frequentista frente a descrição da degradação ruminal da fibra em detergente neutro utilizando um modelo do tipo gama-tempo-dependente. Um banco de dados simulado composto por quatro cenários foi utilizado: restrição regular do número de tempos de incubação, perda aleatória de tempos de incubação, perda de partes específicas das curvas de degradação, variação na precisão dos procedimentos de incubação. Os cenários foram divididos em quatro subconjuntos cada, os subconjuntos foram simulados dez vezes, permitindo uma ampla avaliação da capacidade de ajuste das diferentes abordagens frente os diferentes cenários. Dois bancos de dados reais foram utilizados para avaliar as abordagens, os dados reais foram compostos da degradação da NDF de uma gramínea tropical (*Brachiaria decumbes*). O modelo foi ajustado de acordo com as características de cada abordagem e comparados via gráficos e avaliadores. A abordagem bayesiana e a abordagem frequentista apresentaram estimativas confiáveis para a maioria dos dados avaliados. Entretanto, a abordagem bayesiana apresentou um grande viés das estimativas do resíduo e das estimativas da taxa de degradação de incubação, não apresentando uma coerência biológica para os parâmetros, em comparação com a abordagem frequentista. Ou seja, a abordagem bayesiana ajustada com priores não informativas, apresentou-se menos flexível do que a abordagem frequentista. No entanto, ressalta-se a importância das informações a priori, especialmente para a abordagem bayesiana, a fim de definir priors apropriadas ao modelo. Estudos futuros mais aprofundados sobre a influência das priors não informativas sobre a estimativa de parâmetros são necessários.*
- **PALAVRAS-CHAVE:** *gama-tempo-dependente, inferência, degradação ruminal, método in situ*

## 6 References

- BATES, D.; MACHLER, M.; BOLKER, B. M.; WALKER, S. C. Fitting linear mixed-effects models using lme4. *J. Stat. Softw.*, v.67, n.1, p.1-48, 2015.
- BAYARRI, M. J.; BERGER, J. O. The interplay of bayesian and frequentist analysis. *Stat. Sci.*, v.19, n.1, p.58-80, 2004.
- BEAUMONT, M. A.; RANNALA, B. The bayesian revolution in genetics, *Nat. Rev.*, v.5, p.251-261, 2004.
- BROWNE, W. J.; DRAPER, D. A comparison of bayesian and likelihood-based methods for fitting multilevel models. *Bayesian Anal.*, v.1, n.3, p.473-514, 2006.
- DETMANN, E.; CECON, P. R.; PAULINO, M. F.; ZERVOUDAKIS, J. T.; VALADARES FILHO, S. C.; ARAÚJO, C. V. Estimação de parâmetros de cinética de trânsito de partículas em bovinos sob pastejo por diferentes sequências amostrais. *R. Bras. Zootec.*, v.30, p.222-230, 2001.
- DETMANN, E.; PAULINO, M.F.; VALADARES FILHO, S.C. Avaliação nutricional de alimentos ou de dietas? Uma abordagem conceitual. In: SIMPÓSIO DE PRODUÇÃO DE GADO DE CORTE, 6, 2008, Viçosa. *Anais...* Viçosa: DZO-UFV, 2008. p.21-52.
- ELLIS, W. C.; MATIS, J. H.; HILL, T. M.; MURPHY, M. R. Methodology for estimating digestion and passage kinetics of forages. In: FAHEY JR., G. C. (Eds.) *Forage quality, evaluation, and utilization*. Madison: Am. Soc. Agron., 1994. p.682-756.

- FIGUEIRAS, J. F. *Desempenho nutricional de bovinos em pastejo suplementados durante os períodos de transição seca-águas e de águas*. 2013. 73f. Tese (Doutorado em Zootecnia) – Departamento de Zootecnia, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2013.
- GELFAND, A. E.; HILLS, S.; RACINE POON, A.; SMITH, A. E. M. Illustration of Bayesian inference in normal data models using Gibbs sampling. *J. Amer. Stat. Assoc.*, v.85, p.972-985, 1990.
- GELMAN, A. Prior distributions for variance parameters in hierarchical models. *Bayesian Anal.*, v.1, n.3, p.515-533, 2006.
- GELMAN, A.; CARLIN, J.; STERN, H.; RUBIN, D. *Bayesian data analysis*. 3<sup>rd</sup> ed. Texts in Statistical Science. Chapman and Hall, London, UK. 2004, 656p.
- HEIDELBERGER, P.; WELCH, P. *Simulation run length control in the presence of an initial transient*, *Oper. Res.*, v.31, p.1109–114, 1992.
- HUHTANEN, P.; AHVENJÄRVI, S.; BRODERICK, G. A.; REYNAL, S. M.; SHINGFIELD, K. J. Quantifying ruminal digestion of organic matter and neutral detergent fiber using the omasal sampling technique in cattle - a meta-analysis. *J. Dairy Sci.*, v.93, p.3203-3215, 2010.
- JEFFREYS, H. *Theory of probability*. Oxford: Clarendon, 1961, 325p.
- LESAFFRE, E.; LAWSON, A. B. *Bayesian Biostatistics*. United Kingdom: John Wiley & Sons, 2012, 516p.
- LUNN, D. J.; SPIEGELHALTER, D.; THOMAS, A.; BEST, N. The BUGS project: evolution, critique, and future directions. *Stat. Medic.*, v.28, p.3049-3067. 2009.
- MERTENS, D. R. Rate and extent of digestion. In: DIJKSTRA, J.; FORBES, J. M.; FRANCE, J. (Eds.) *Quantitative aspects of ruminant digestion and metabolism*. Wallingford: CAB International, 2nd ed, 2005. p.13-47.
- ROSSI, M. R.; MARTINS, E. N.; GUEDES, T. A.; JOBIM, C. C. Bayesian analysis for comparison of nonlinear regression model parameters: an application to ruminal degradability data. *R. Bras. Zootec.*, v.39, n.2, p.419-424, 2010.
- SILVA, F. F.; SAFADI, T.; MUNIZ, J. A.; ROSA, G. J. M.; AQUINO, L. H.; MOURÃO, G. B.; SILVA, C. H. O. Bayesian analysis of autoregressive panel data model: application in genetic evaluation of beef cattle. *Sci. Agric.*, v.68, n.2, p.237-245, 2011.
- SILVA, F. F.; VIANA, J. M. S.; FARIA, V. R.; RESENDE, M. D. V. Bayesian inference of mixed models in quantitative genetics of crop species. *Theor. Appl. Genet.*, v.126, p.1749-1761, 2013.
- VALENTE, T. N. P.; DETMANN, E.; QUEIROZ, A. C.; VALADARES FILHO, S. C.; GOMES, D. I.; FIGUEIRAS, J. F. Evaluation of ruminal degradation profiles of forages using bags made from different textiles. *R. Bras. Zootec.*, v.40, n.11, p.2565-2573, 2011.
- VAN MILGEN, J.; MURPHY, L. L.; BERGER, L. L. A compartmental model to analyse ruminal digestion. *J. Dairy Sci.*, v.74, p.2515-2529, 1991.

Table 1 – Average estimates of the parameters potentially degradable fraction ( $U$ , %), common rate of lag and degradation ( $c$ ,  $h^{-1}$ ), undegradable fraction ( $I$ , %) obtained on simulated data using the Bayesian or frequentist approaches

Scenario <sup>1</sup>	Bayesian <sup>2, 3</sup>				Frequentist <sup>2, 3</sup>			
	$U$	$c$	$I$	$U+I$	$U$	$c$	$I$	$U+I$
A <sub>1</sub>	63.00 (0.79)	0.058 (0.002)	36.99 (1.10)	99.99	62.97 (0.48)	0.058 (0.001)	37.06 (0.234)	100.04
A <sub>2</sub>	63.11 (2.41)	0.065 (0.105)	36.15 (2.66)	99.27	62.78 (0.67)	0.059 (0.001)	37.19 (0.333)	99.97
A <sub>3</sub>	62.96 (1.69)	0.071 (0.587)	37.21 (0.75)	100.17	63.05 (0.83)	0.059 (0.001)	37.22 (0.437)	100.27
A <sub>4</sub>	62.69 (2.31)	0.061 (0.244)	37.09 (1.78)	99.77	62.70 (0.94)	0.059 (0.001)	37.24 (0.526)	99.94
B <sub>1</sub>	63.30 (0.56)	0.059 (0.001)	37.08 (0.25)	100.38	63.30 (0.55)	0.059 (0.001)	37.08 (0.242)	100.39
B <sub>2</sub>	63.53 (2.79)	0.169 (3.205)	35.16 (3.42)	98.69	63.40 (0.69)	0.059 (0.001)	37.05 (0.344)	100.46
B <sub>3</sub>	62.44 (3.04)	0.063 (0.453)	36.98 (1.13)	99.42	62.58 (1.33)	0.057 (0.002)	36.99 (0.546)	99.57
B <sub>4</sub>	67.05 (21.34)	1.131 (11.427)	36.52 (4.62)	103.57	65.74 (4.19)	0.060 (0.003)	37.35 (0.710)	103.09
C <sub>1</sub>	62.93 (3.79)	0.058 (0.023)	36.93 (1.11)	99.85	62.94 (3.44)	0.058 (0.001)	37.02 (0.176)	99.96
C <sub>2</sub>	63.12 (0.82)	0.058 (0.002)	36.90 (1.11)	100.02	63.03 (0.30)	0.059 (0.001)	37.06 (0.135)	100.09
C <sub>3</sub>	63.05 (0.49)	0.058 (0.001)	37.01 (0.28)	100.06	63.05 (0.30)	0.058 (0.001)	37.01 (0.163)	100.07
C <sub>4</sub>	62.98 (0.48)	0.059 (0.005)	37.10 (0.43)	100.08	62.97 (0.30)	0.059 (0.001)	37.11 (0.206)	100.09
D <sub>1</sub>	63.24 (0.62)	0.059 (0.002)	36.95 (0.42)	100.18	63.24 (0.59)	0.059 (0.001)	36.96 (0.281)	100.19
D <sub>2</sub>	63.18 (1.02)	0.058 (0.002)	36.76 (1.07)	99.94	63.11 (0.72)	0.059 (0.001)	36.93 (0.343)	100.04
D <sub>3</sub>	63.26 (0.88)	0.059 (0.001)	36.98 (0.42)	100.25	63.27 (0.87)	0.059 (0.001)	36.99 (0.417)	100.26
D <sub>4</sub>	63.04 (1.29)	0.059 (0.002)	37.08 (1.39)	100.12	62.97 (0.98)	0.060 (0.001)	37.28 (0.461)	100.25

<sup>1</sup> See text for details about scenarios.

<sup>2</sup> The values correspond to the average of ten adjustments for each subset within each scenario.

<sup>3</sup> The values between parentheses correspond to the standard deviation among adjusted models ( $n = 10$ ).

Table 2 – Asymptotic standard deviation of residual error (ASDR) for the adjusted model and average bias ( $B$ , %) for the estimates of the parameters potentially degradable fraction ( $U$ , %), common rate of lag and degradation ( $c$ ,  $h^{-1}$ ), undergradable fraction ( $I$ , %) obtained on simulated data using the Bayesian or frequentist approaches

Scenario <sup>1</sup>	Bayesian <sup>2,3</sup>				Frequentist <sup>2,3</sup>			
	ASDR	$B$			ASDR	$B$		
		$U$	$c$	$I$		$U$	$c$	$I$
A <sub>1</sub>	0.982	0.130 (0.47)	-0.380 (0.784)	-0.237 (0.439)	0.982	0.085 (0.480)	-0.246 (0.867)	-0.043 (0.547)
A <sub>2</sub>	2.617	0.303 (1.54)	5.716 (15.932)	-3.331 (10.553)	0.850	-0.218 (0.626)	0.081 (0.885)	0.286 (0.443)
A <sub>3</sub>	2.402	0.067 (1.77)	7.093 (21.490)	0.339 (0.703)	1.007	0.202 (1.707)	0.237 (1.623)	0.367 (0.707)
A <sub>4</sub>	1.363	-0.370 (2.35)	2.712 (5.450)	-0.004 (1.689)	1.158	-0.341 (2.169)	0.269 (1.180)	0.420 (0.938)
B <sub>1</sub>	1.150	0.602 (0.73)	0.478 (1.270)	-0.0002 (0.573)	1.150	0.610 (0.734)	0.485 (1.272)	0.006 (0.570)
B <sub>2</sub>	6.547	0.963 (2.14)	18.539 (32.591)	-10.255 (31.930)	1.321	0.767 (0.670)	0.567 (1.648)	-0.076 (0.800)
B <sub>3</sub>	6.130	-0.763 (2.24)	5.469 (13.104)	-0.285 (1.375)	4.456	-0.536 (2.228)	-2.055 (2.860)	-0.265 (1.341)
B <sub>4</sub>	4.520	6.562 (10.62)	29.10 (35.139)	-1.722 (4.842)	0.974	4.485 (7.483)	2.912 (4.628)	0.665 (2.525)
C <sub>1</sub>	1.177	0.014 (6.61)	-0.664 (3.996)	-0.422 (0.730)	1.163	0.028 (6.608)	-0.544 (3.872)	-0.161 (0.603)
C <sub>2</sub>	1.243	0.324 (0.53)	-0.146 (1.247)	-0.503 (1.307)	1.205	0.181 (0.307)	0.173 (0.829)	-0.059 (0.347)
C <sub>3</sub>	1.179	0.200 (0.25)	-0.050 (0.513)	-0.190 (0.328)	1.180	0.209 (0.255)	-0.039 (0.510)	-0.175 (0.323)
C <sub>4</sub>	1.173	0.092 (0.34)	0.226 (0.675)	0.063 (0.450)	1.173	0.088 (0.332)	0.199 (0.546)	0.090 (0.393)
D <sub>1</sub>	1.852	0.507 (0.89)	0.206 (1.684)	-0.370 (0.923)	1.851	0.506 (0.886)	0.219 (1.708)	-0.339 (0.929)
D <sub>2</sub>	2.583	0.410 (1.07)	-0.245 (2.756)	-0.892 (1.842)	2.569	0.305 (1.030)	0.083 (2.367)	-0.408 (0.869)
D <sub>3</sub>	2.806	0.545 (1.38)	0.066 (1.595)	-0.273 (1.114)	2.805	0.556 (1.378)	0.066 (1.594)	-0.253 (1.108)
D <sub>4</sub>	3.624	0.194 (0.84)	1.209 (2.892)	-0.010 (1.312)	3.642	0.083 (0.873)	1.572 (2.700)	0.513 (1.150)

<sup>1</sup> See text for details about scenarios.

<sup>2</sup> The values correspond to the averages of ten adjustments for each subset within each scenario.

<sup>3</sup> The values between parentheses correspond to standard deviation of bias among ten adjustments.

Table 3 - Paired t-test to compare the estimates of the parameters potentially degradable fraction ( $U$ , %), common rate of lag and degradation ( $c$ , h<sup>-1</sup>), undegradable fraction ( $I$ , %) obtained using the Bayesian or frequentist approaches for simulated and real dataset

Parameters	Bayesian	Frequentist	t-test		
	Mean		$n$	$s(\bar{d})$	P value
Simulated values					
$U$	63.33±2.89	63.20±1.09	16	0.396	0.226
$c$	0.069±0.346	0.059±0.001		0.027	0.166
$I$	36.80±1.38	37.10±0.34		0.533	0.040
Real values					
$U$	68.51±4.30	66.917±3.57	10	3.859	0.223
$c$	0.051±0.045	0.051±0.009		0.003	0.919
$I$	27.50±4.18	29.46±3.28		4.452	0.197

Table 4 - Estimates of the parameters potentially degradable fraction ( $U$ , %), common rate of lag and degradation ( $c$ ,  $h^{-1}$ ), undegradable fraction ( $I$ , %) obtained on real data (two experiments and five treatments per experiment) using the Bayesian or frequentist approaches

Real data	Bayesian					Frequentist				
	$U$	$c$	$I$	$U+I$	ASDR <sup>1</sup>	$U$	$c$	$I$	$U+I$	ASDR
Exp. 1										
T <sub>1</sub>	69.09±3.94	0.042±0.005	28.02±3.95	97.12	9.691	68.60±3.55	0.043±0.004	28.75±3.34	97.35	9.686
T <sub>2</sub>	76.96±5.07	0.043±0.379	19.45±5.23	96.41	10.309	75.66±3.97	0.037±0.003	21.09±3.94	96.75	8.576
T <sub>3</sub>	71.77±4.62	0.035±0.004	27.99±4.88	99.76	9.248	70.85±3.88	0.036±0.003	29.16±3.88	100.01	9.239
T <sub>4</sub>	77.76±4.15	0.038±0.004	25.53±4.20	103.29	9.408	77.10±3.74	0.038±0.003	26.42±3.67	103.52	9.403
T <sub>5</sub>	83.22±11.73	0.027±0.029	11.58±12.52	94.80	15.555	70.72±7.87	0.033±0.006	26.12±8.06	96.83	15.120
Exp. 2										
T <sub>1</sub>	58.19±2.84	0.060±0.006	35.37±2.53	93.57	8.394	58.14±2.69	0.060±0.005	35.54±2.17	93.69	8.392
T <sub>2</sub>	61.50±2.60	0.063±0.005	32.34±2.04	93.85	7.297	61.51±2.32	0.063±0.005	32.46±1.83	93.97	7.295
T <sub>3</sub>	64.72±2.84	0.072±0.007	30.65±2.12	95.38	8.346	64.73±2.61	0.072±0.058	30.76±1.95	95.49	8.345
T <sub>4</sub>	60.52±2.87	0.070±0.007	33.52±2.32	94.05	8.890	60.51±2.79	0.070±0.006	33.65±2.10	94.16	8.889
T <sub>5</sub>	61.38±2.36	0.060±0.005	30.51±2.00	91.90	7.138	61.35±2.29	0.060±0.004	30.63±1.85	91.98	7.137

<sup>1</sup> Asymptotic standard deviation of residual error (ASDR) for the adjusted model.

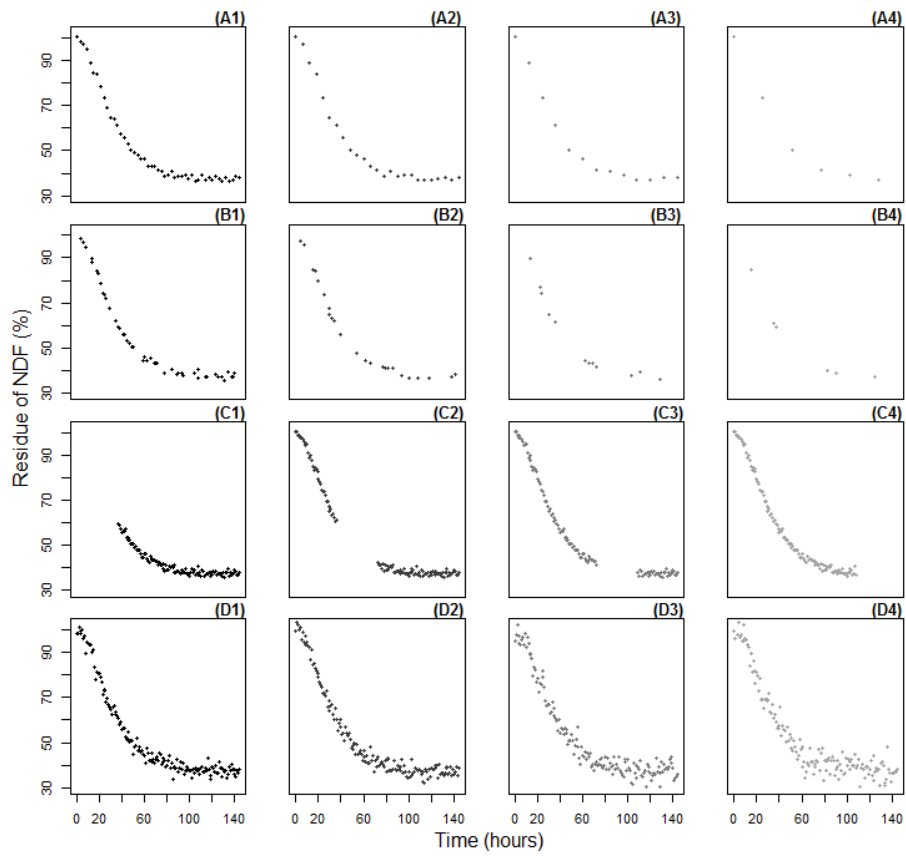


Figure 1. Examples of the simulated scenarios: A, regular restriction in the number of incubations times; B, random loss of incubation times; C, loss of specific parts of the degradation curves; and D, variation in the precision of the incubation procedures.

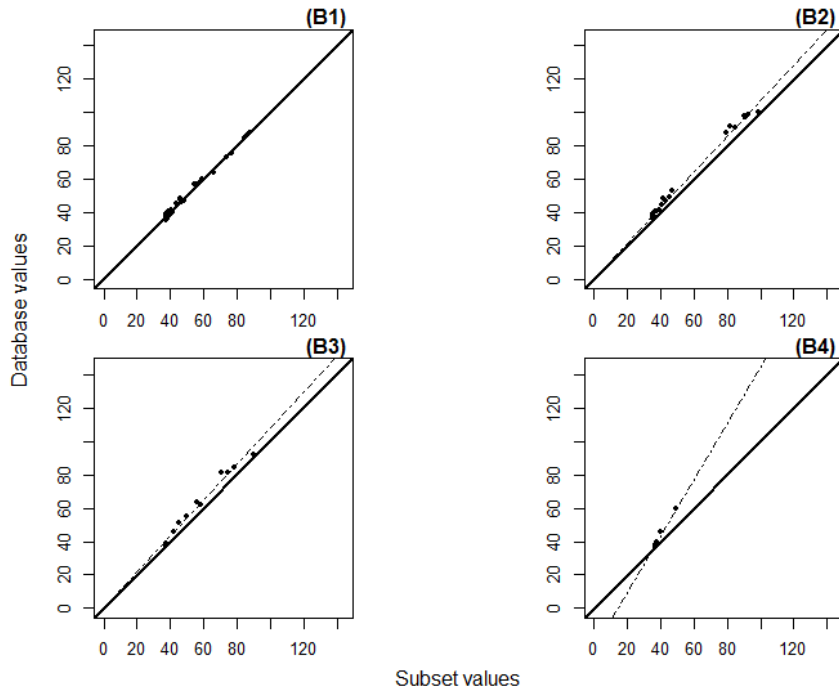


Figure 2. Descriptive relationship between actual (from subsets) and predicted according to Bayesian approach (from model adjustment) of the NDF residues as a function of time for scenario B. The solid lines represent the equality line.



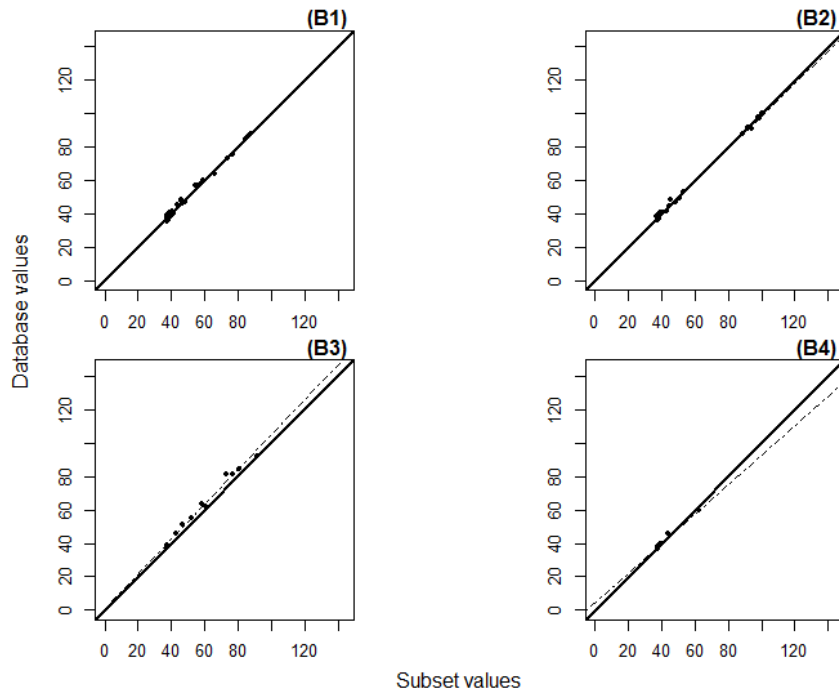


Figure 3. Descriptive relationship between actual (from subsets) and predicted according to frequentist approach (from model adjustment) of the NDF residues as a function of time for scenario B. The solid lines represent the equality line.

## Appendix

```
Code for R Software.
### BAYESIANA AND FREQUENTISTA APPROACH: ###
### APPLYING TO A GAMMA-TIME-DEPENDENT MODEL ###

# Determinining library
Dir <- setwd("C:/Users/ ")

# Simulation #
# Van Milgen et al., (1991) ->  $y = \beta \cdot (1 + \lambda \cdot \text{time}) \cdot \exp(-\lambda \cdot \text{time}) + \sigma + \text{error}$ 
# Values: Figueiras (2013) Thesis #

for(i in 1:10) # Loop 1
{
  beta = 62.92
  sigma = 37.08
  lambda = 0.059
  time = seq(0, 144, 1)
  error = rnorm(mean=0, sd=1, n=length(time))
  y = beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) + sigma + error

  Y=as.data.frame(rbind(y,time))
  Yt = as.data.frame(t(Y))

# Graphic #
plot(Yt$y ~ Yt$time)

# Building scenarios #
# A = Regular restriction in the number of incubation times #
# A1 = 3-3 hours -> n=48
# A2 = 6-6 hours -> n=24
# A3 = 12-12 hours -> n=12
# A4 = 24-24 hours -> n=6

A1 = Yt[seq(1,145,3),]
A2 = Yt[seq(1,145,6),]
A3 = Yt[seq(1,145,12),]
A4 = Yt[seq(1,145,24),]

par(mfrow=c(2,2),mar=c(4,4,1.6,0.5), pty="s")
plot(A1$y ~ A1$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="blue", pch=20)
plot(A2$y ~ A2$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="red", pch=20)
plot(A3$y ~ A3$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="green", pch=20)
plot(A4$y ~ A4$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="purple", pch=20)
```

```

# B = Random loss of incubation times #
# B1 = 33% of total n -> n=48
# B2 = 16% of total n -> n=24
# B3 = 8% of total n -> n=12
# B4 = 4% of total n -> n=6

B1 = Yt[sample(1:145, 48,replace=F),]
B2 = Yt[sample(1:145, 24,replace=F),]
B3 = Yt[sample(1:145, 12,replace=F),]
B4 = Yt[sample(1:145, 6,replace=F),]

par(mfrow=c(2,2),mar=c(4,4,1.6,0.5), pty="s")
plot(B1$y ~ B1$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="blue", pch=20)
plot(B2$y ~ B2$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="red", pch=20)
plot(B3$y ~ B3$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="green", pch=20)
plot(B4$y ~ B4$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="purple", pch=20)

# C = Loss of specific parts of the degradation curves #
# C1 = 75% of total n; 2th,3th and 4th part -> n=108
# C2 = 75% of total n; 1th,3th and 4th part -> n=108
# C3 = 75% of total n; 1th,2th and 4th part -> n=108
# C4 = 75% of total n; 1th,2th and 3th part -> n=108

C1 = subset(Yt, time>=37)
C2 = subset(Yt, 36>=time | time>=73)
C3 = subset(Yt, 72>=time | time>=109)
C4 = subset(Yt, 108>=time)

par(mfrow=c(2,2),mar=c(4,4,1.6,0.5), pty="s")
plot(C1$y ~ C1$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="blue", pch=20)
plot(C2$y ~ C2$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="red", pch=20)
plot(C3$y ~ C3$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="green", pch=20)
plot(C4$y ~ C4$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="purple", pch=20)

# D = Variation in the precision of the incubation procedures #
# D1 = error: sd=2 -> n=144
# D2 = error: sd=2.5 -> n=144
# D3 = error: sd=3 -> n=144
# D4 = error: sd=3.5 -> n=144

error1 = rnorm(mean=0, sd=2, n=length(time))
error2 = rnorm(mean=0, sd=2.5, n=length(time))
error3 = rnorm(mean=0, sd=3, n=length(time))
error4 = rnorm(mean=0, sd=3.5, n=length(time))

D1 = as.data.frame(t(rbind(y=beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) + sigma +
error1,time)))

```

```

D2 = as.data.frame(t(rbind(y=beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) + sigma +
error2,time)))
D3 = as.data.frame(t(rbind(y=beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) + sigma +
error3,time)))
D4 = as.data.frame(t(rbind(y=beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) + sigma +
error4,time)))

par(mfrow=c(2,2),mar=c(4,4,1.6,0.5), pty="s")
plot(D1$y ~ D1$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="blue", pch=20)
plot(D2$y ~ D2$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="red", pch=20)
plot(D3$y ~ D3$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="green", pch=20)
plot(D4$y ~ D4$time, xlim=range(0,144),ylim=range(35,100), col="purple", pch=20)

# Merging Datas #
library(plyr)
Yc=join_all(list(Yt,A1,A2,A3,A4,B1,B2,B3,B4,C1,C2,C3,C4,D1,D2,D3,D4),by="time")
colnames(Yc)[1:18]=c("Y","time","A1","A2","A3","A4","B1","B2","B3","B4","C1","C2",
"C3","C4","D1","D2","D3","D4")

# Plot with all scenarios #

par(mfrow=c(4,4), mar = c(0,0,1.4,1),oma = c(3.6,3,0,0), pty="s")
# Scenario A #
plot(A1$y ~ A1$time, xlim=range(0,144), xaxt='n', ylim=range(30,102), col="gray0",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (A1)")
plot(A2$y ~ A2$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray25", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (A2)")
plot(A3$y ~ A3$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray50", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (A3)")
plot(A4$y ~ A4$time, xlim=range(0,135),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray65", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (A4)")
# Scenario B #
plot(B1$y ~ B1$time, xlim=range(0,144),xaxt='n',ylim=range(30,102), col="gray0",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (B1)")
plot(B2$y ~ B2$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray25", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (B2)")
plot(B3$y ~ B3$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray50", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (B3)")
plot(B4$y ~ B4$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray65", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (B4)")
# Scenario C #
plot(C1$y ~ C1$time, xlim=range(0,144),xaxt='n',ylim=range(30,102), col="gray0",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (C1)")
plot(C2$y ~ C2$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray25", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (C2)")
plot(C3$y ~ C3$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray50", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (C3)")

```

```

plot(C4$y ~ C4$time, xlim=range(0,144),yaxt='n', xaxt='n',ylim=range(30,102),
col="gray65", pch=20, ylab="", xlab="", main=" (C4)")
# Scenario D #
plot(D1$y ~ D1$time, xlim=range(0,144),ylim=range(30,102), col="gray0", pch=20,
ylab="", xlab="", main=" (D1)")
mtext(" Time
(hours)",side=1, line=2.5)
mtext(" Residue
of NDF (%)",side=2, line=2.5)
plot(D2$y ~ D2$time, xlim=range(0,144),yaxt='n',ylim=range(30,102), col="gray25",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (D2)")
plot(D3$y ~ D3$time, xlim=range(0,144),yaxt='n',ylim=range(30,102), col="gray50",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (D3)")
plot(D4$y ~ D4$time, xlim=range(0,144),yaxt='n',ylim=range(30,102), col="gray65",
pch=20, ylab="", xlab="", main=" (D4)")

#####
# Modeling - Bayesian Model #
#####

# Library load #
library(BRugs)

# Start of the loop
# Selecting Dataset/Subset
for(data in
c("A1","A2","A3","A4","B1","B2","B3","B4","C1","C2","C3","C4","D1","D2","D3","D
4" )) # Loop 2
{
eval(parse(text=paste("dat=",data,sep="")))

# Van Milgen et al., (1991) Adapted -> y = beta*(1 + lambda*time)*exp(-lambda*time) +
sigma + error

# Building the dataset #
dd <- list(y=dat$y,
x=dat$time,
N=nrow(dat))

bugsData(dd , fileName = file.path(getwd(), "dataDeg.txt"))

# Creating the inits #
inits <- list(
list(tau=runif(1, 0, 5), lambda=runif(1, 0, 5), sigma=runif(1, 0, 5),
beta=runif(1, 0, 5)),

```

```

list(tau=runif(1, 0, 5), lambda=runif(1, 0, 5), sigma=runif(1, 0, 5),
     beta=runif(1, 0, 5)))

bugsInits(inits, numChains=2, fileName=c(file.path(getwd(), "Inits1.txt"),
                                       file.path(getwd(), "Inits2.txt")))

# Building the Model #
Degmodel <- function()
{
  for(i in 1:N)                                # Loop 3
  {
    y[i] ~ dnorm(mu[i], 1/tau)
    mu[i] <- beta*(1+lambda*x[i])*exp(-lambda*x[i])+sigma
  }
  sigma ~ dgamma(0.001, 0.001) # non-informative gamma distribution
  lambda ~ dgamma(0.001, 0.001) # non-informative gamma distribution
  beta ~ dgamma(0.001, 0.001) # non-informative gamma distribution
  tau ~ dgamma(0.001, 0.001) # non-informative gamma distribution
}                                             # Loop 3 ends

writeModel(Degmodel, file.path(getwd(), "DegModel.txt"))

# Bayesian using Open Bugs #
modelCheck("DegModel.txt")                # check model file
modelData("dataDeg.txt")                  # read data file
modelCompile(numChains=2)                  # compile model with 2 chains
modelInits(c("Inits1.txt","Inits2.txt"))  # read init data file

modelUpdate(200000)                        # burn in
samplesSet(c("beta", "lambda", "sigma"))  # parameters monitored
modelUpdate(300000, thin=100)              # iterations

# Sumarized results
# samplesStats("*")
eval(parse(text=paste("Stats_",data,"<- samplesStats('*)',sep='\"")

# Export the iterations data's
samplesCoda("beta",paste(Dir,"/beta/",sep="\"")
samplesCoda("lambda",paste(Dir,"/lambda/",sep="\"")
samplesCoda("sigma",paste(Dir,"/sigma/",sep="\"")

# Graphics #
# samplesHistory("beta")
# samplesHistory("lambda")
# samplesHistory("sigma")
# samplesHistory("*", mfrow = c(3,1))

```

```

# Library load #
library(boa)

# Building data's to Convergence Diagnostics
beta1 <- read.table("beta/CODAchain1.txt", sep="")
beta2 <- read.table("beta/CODAchain2.txt", sep="")
lambda1 <- read.table("lambda/CODAchain1.txt", sep="")
lambda2 <- read.table("lambda/CODAchain2.txt", sep="")
sigma1 <- read.table("sigma/CODAchain1.txt", sep="")
sigma2 <- read.table("sigma/CODAchain2.txt", sep="")

coda <-
as.matrix(data.frame(beta1[,2],beta2[,2],lambda1[,2],lambda2[,2],sigma1[,2],sigma2[,2]))
# Create a matrix data
colnames(coda)[1:6] =
paste(c("beta1","beta2","lambda1","lambda2","sigma1","sigma2"),data,sep="_") #
Rename the col's
rownames(coda)=beta1[,1] # Rename the
row's

# Convergence Diagnostics - Heidelberger and Welch (1992) (error=0.1, alpha=0.05) #
eval(parse(text=paste("Diag_",data,"<- boa.handw(coda,0.1,0.05)",sep="")))

# Asymptotic standard deviation of the residual error (ASDR) #
y_b = (samplesStats(*)[[1]][1])*(1 + (samplesStats(*)[[1]][2])*dat$time)*exp(-
(samplesStats(*)[[1]][2])*dat$time) + (samplesStats(*)[[1]][3])

ASDR <- eval(parse(text=paste("ASDR_",data,"<- (sum((dat$y-
y_b)^2)/(length(dat$y))^0.5",sep="")))

# Bias (B) #
V_1<-eval(parse(text=paste("V_beta_", data,
"<- (((samplesStats(*)[[1]][1])-beta)/(length(dat$y))",sep=""))) # Bias beta
V_2<-eval(parse(text=paste("V_lambda_", data,
"<- (((samplesStats(*)[[1]][2])-lambda)/(length(dat$y))",sep=""))) # Bias lambda
V_3<-eval(parse(text=paste("V_sigma_", data,
"<- (((samplesStats(*)[[1]][3])-sigma)/(length(dat$y))",sep=""))) # Bias sigma

# Assessors (As) #
As <- data.frame(ASDR,V_1,V_2,V_3)
colnames(As)[1:4]=c("ASDR","Bias_beta", "Bias_lambda", "Bias_sigma")

eval(parse(text=paste("As_", data, " <- As",sep="")))

#####
# Modeling - Frequentist Model #
#####

```

```

# Van Milgen et al., (1991) Adapted ->  $y = \beta \cdot (1 + \lambda \cdot \text{time}) \cdot \exp(-\lambda \cdot \text{time}) + \sigma + \text{error}$ 

# Library load #
library(lme4)

# Renaming the parameters #
beta_=beta
lambda_=lambda
sigma_=sigma
t=dat$time

# Building the model #
start = c(beta_=beta, lambda_=lambda, sigma_=sigma)
model = ~ beta_*(1 + lambda_*t)*exp(-lambda_*t) + sigma_
model_d = deriv(model, namevec=c("beta_", "lambda_", "sigma_"),
                function.arg=c("input", "beta_", "lambda_", "sigma_"))

M_y = nls(y ~ model_d(time, beta_, lambda_, sigma_), data=dat, start=start)

eval(parse(text=paste("Stats2_", data, "<- coef(summary(M_y))", sep="")))

# Asymptotic standard deviation of the residual error (ASDR) #
ASDR2 <- eval(parse(text=paste("ASDR_", data, "<- (sum((dat-
predict(M_y))^2)/(length(dat$y))^0.5", sep="")))

# Bias (B) #
V2_1 <- eval(parse(text=paste("V2_beta_", data,
                             "<- (((coef(summary(M_y))[[1]]-beta)/(length(dat$y)))", sep=""))) #
Bias beta
V2_2 <- eval(parse(text=paste("V2_lambda_", data,
                              "<- (((coef(summary(M_y))[[2]]-lambda)/(length(dat$y)))", sep=""))) #
Bias lambda
V2_3 <- eval(parse(text=paste("V2_sigma_", data,
                              "<- (((coef(summary(M_y))[[3]]-sigma)/(length(dat$y)))", sep=""))) #
Bias sigma

# Assessors (As) #
As2 <- data.frame(ASDR2, V2_1, V2_2, V2_3)
colnames(As2)[1:4]=c("ASDR2", "Bias2_beta", "Bias2_lambda", "Bias2_sigma")

eval(parse(text=paste("As2_", data, "<- As2", sep="")))
} # Loop 2 ends

# Compiling #

```



```

Stats_f                                                                 <-
rbind(A1=Stats_A1,A2=Stats_A2,A3=Stats_A3,A4=Stats_A4,B1=Stats_B1,B2=Stats_B2
,B3=Stats_B3,B4=Stats_B4,

C1=Stats_C1,C2=Stats_C2,C3=Stats_C3,C4=Stats_C4,D1=Stats_D1,D2=Stats_D2,D3=S
tats_D3,D4=Stats_D4)

Stats2_f                                                                 <-
rbind(A1=Stats2_A1,A2=Stats2_A2,A3=Stats2_A3,A4=Stats2_A4,B1=Stats2_B1,B2=St
ats2_B2,B3=Stats2_B3,B4=Stats2_B4,

C1=Stats2_C1,C2=Stats2_C2,C3=Stats2_C3,C4=Stats2_C4,D1=Stats2_D1,D2=Stats2_D
2,D3=Stats2_D3,D4=Stats2_D4)

As_f                                                                 <-
rbind(A1=As_A1,A2=As_A2,A3=As_A3,A4=As_A4,B1=As_B1,B2=As_B2,B3=As_B3,
B4=As_B4,

C1=As_C1,C2=As_C2,C3=As_C3,C4=As_C4,D1=As_D1,D2=As_D2,D3=As_D3,D4=A
s_D4)

As2_f                                                                 <-
rbind(A1=As2_A1,A2=As2_A2,A3=As2_A3,A4=As2_A4,B1=As2_B1,B2=As2_B2,B3=
As2_B3,B4=As2_B4,

C1=As2_C1,C2=As2_C2,C3=As2_C3,C4=As2_C4,D1=As2_D1,D2=As2_D2,D3=As2_
D3,D4=As2_D4)

# Exporting Results (.csv" format) #
write.csv(Stats_f[i],"Stats_f.csv")
write.csv(Stats2_f[i],"Stats2_f.csv")
write.csv(As_f[i],"As_f.csv")
write.csv(As2_f[i],"As2_f.csv")

eval(parse(text=paste("Stats_f_", i , " <- Stats_f",sep="")))
eval(parse(text=paste("Stats2_f_", i , " <- Stats2_f",sep="")))
eval(parse(text=paste("As_f_", i , " <- As_f",sep="")))
eval(parse(text=paste("As2_f_", i , " <- As2_f",sep="")))
} # Loop 1 ends

```