

PAULIANE PUCETTI

**CONSTRUÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELOS DE REGRESSÃO A PARTIR DE
ESPECTROS NIR PARA PREDIZER A DEGRADABILIDADE DE SILAGEM DE
MILHO E A COMPOSIÇÃO DE SILAGEM DE MILHO, FEZES E DIGESTA DE
BOVINOS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do programa de Pós-Graduação em Zootecnia, para obtenção do título de Magister Scientiae.

Orientador: Sebastião de Campos Valadares filho

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2020**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa

T

P977c
2020
Pucetti, Pauliane, 1995-
Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para prever a degradabilidade de silagem de milho e a composição de silagem de milho, fezes e digesta de bovinos / Pauliane Pucetti. – Viçosa, MG, 2020.
70 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Sebastião de Campos Valadares Filho.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.
Inclui bibliografia.

1. Bovinos - Alimentação e rações. 2. Quimiometria.
3. Calibração. 4. Espectroscopia de infravermelho.
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Zootecnia.
Programa de Pós-Graduação em Zootecnia. II. Título.

CDD 22. ed. 636.20855

PAULIANE PUCETTI

CONSTRUÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELOS DE REGRESSÃO A PARTIR DE
ESPECTROS NIR PARA PREDIZER A DEGRADABILIDADE DE SILAGEM DE
MILHO E A COMPOSIÇÃO DE SILAGEM DE MILHO, FEZES E DIGESTA DE
BOVINOS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de
Viçosa, como parte das exigências do programa de
Pós-Graduação em Zootecnia, para obtenção do
título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 03 de março de 2020.

Assentimento:


Pauliane Pucetti
Autora


Sebastião de Campos Valadares Filho
Orientador

Ao meu pai Sebastião Pucetti (in memoriam)
e meu irmão Robson Pucetti (in memoriam), que
sempre me apoiaram e nunca perderam a fé nos meus sonhos.

Dedico.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Agradeço a Deus, pelo conforto nos momentos mais difíceis da minha vida.

A Universidade Federal de Viçosa, pelos ensinamentos e oportunidades oferecidos; em especial ao Departamento de Zootecnia.

Ao CNPq, Capes, INCT–Ciência Animal e Fapemig pelo financiamento desta pesquisa.

Ao Professor Sebastião de Campos Valadares Filho por ser uma grande inspiração, pelos ensinamentos, pela disponibilidade e apoio que sempre demonstrou.

Aos Doutores Mario Chizzotti, Fabyano, Reinaldo Teófilo e Jussara Roque, obrigado pela disponibilidade para me avaliarem nesta banca.

A minha mãe Joana Darc de Fátima Pucetti, exemplo de força, amor e dedicação, por nunca ter medido esforços para me apoiar na realização dos meus sonhos.

Aos meus irmãos Rodrigo, Aline, Kênia, Graciane, Luana pelo apoio, amor, carinho, proteção e por todo cuidado e incentivo para buscar os meus objetivos de vida.

A Jussara, pela colaboração nas análises estatísticas concedidas que possibilitaram a realização deste trabalho.

Aos funcionários do DZO: Monteiro, Mario, Zezé, Mauro, Matheus, Edson, Alda e Fernanda por toda ajuda durante a execução deste projeto.

Aos amigos, estagiários e bolsistas de iniciação científica da Equipe Labnur que contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho: Julia T, Markin, Herlon, Zanetti, Breno, Letícia, Flávia, Nathália, Bruno, Kellen, Gyliard, Fernandinho, Isadora, Germano, André, Pivotto, Junia e Julia.

Aos amigos Júlia, Ana Clara, Herlon, Jessiquinha, Markin, Layla e Kassia por tornarem essa caminhada mais fácil, com conselhos, brincadeiras, risadas e todos os bons momentos.

A todos os demais familiares e amigos, que de alguma forma estiveram ao meu lado, fornecendo suporte emocional, que foram fundamentais para conclusão desta etapa.

BIOGRAFIA

PAULIANE PUCETTI, Filha de Joana Darc de Fátima Pucetti e Sebastião Pucetti, nasceu em Ubá, Minas Gerais, em 20 de novembro de 1995.

Em janeiro de 2018, graduou-se em Zootecnia pela Universidade Federal de Viçosa.

Em março de 2018, iniciou o curso de Mestrado em Zootecnia, pelo Departamento de Zootecnia da Universidade Federal de Viçosa, concentrando seus estudos na área de Avaliação de alimentos, Produção e Nutrição de Ruminantes, submetendo-se à defesa da dissertação em 03 de março de 2020.

RESUMO

PUCETTI, Pauliane, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, março de 2020. **Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para prever a degradabilidade de silagem de milho e a composição de silagem de milho, fezes e digesta de bovinos.** Orientador: Sebastião de Campos Valadares Filho.

O objetivo deste estudo foi desenvolver e validar modelos de regressão para prever a composição de amostras de silagem de milho (SM), fezes e digesta omasal de bovinos e prever parâmetros de degradabilidade ruminal in situ da silagem de milho a partir da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR). Foram utilizadas 94 amostras de SM, 498 amostras de fezes de bovinos, 60 amostras de fase sólida e 74 amostras de fase líquida de digesta omasal de bovinos para desenvolver e validar os modelos. No entanto, apenas 23 amostras de SM foram utilizadas para desenvolver e validar os modelos para prever a degradabilidade ruminal in situ. As propriedades avaliadas para cada tipo de amostra foram determinadas através de métodos convencionais de análise de alimentos. Todas as amostras previamente secas e moídas foram então alocadas em placas de Petri e os espectros NIR foram obtidos. Os modelos foram construídos usando a regressão por quadrados mínimos parciais (PLS), e o método de seleção de variáveis dos preditores ordenados (OPS) foi empregado. De forma geral, os modelos de regressão obtidos para prever a composição da SM, com exceção do modelo para matéria orgânica (MO), estimaram de forma adequada as propriedades estudadas. Não foi possível construir modelos de predição para as frações potencialmente degradáveis da MO e proteína bruta (PB) e para a taxa de degradação (kd) da MO. Os modelos obtidos para prever as frações solúveis da matéria seca (MS), MO e PB, as frações potencialmente degradáveis da MS e da fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), a fração indegradável da FDN e “kd” da MS, PB e FDN da SM, estimaram adequadamente tais propriedades. Os modelos de regressão obtidos para prever a composição das amostras de fezes bovinas estimaram adequadamente as propriedades avaliadas, com exceção do modelo para predição dos carboidratos não fibrosos. Os modelos obtidos para prever a composição das amostras de fase sólida da digesta omasal de bovinos estimaram adequadamente as propriedades avaliadas, com exceção do modelo para predição da PB. Considerando os modelos de regressão para estimar a composição da fase líquida da digesta omasal, apenas o modelo para predição de extrato etéreo estimou adequadamente. A utilização de modelos de regressão associados a espectroscopia NIR fornece uma boa ferramenta para avaliação nutricional, podendo substituir boa parte dos métodos convencionais de análises.

Palavras-chave: Quimiometria. Calibração. Espectroscopia.

ABSTRACT

PUCETTI, Pauliane, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, March, 2020. **Development and validation of regression models from NIR spectra to predict the degradability of corn silage, and composition of corn silage, cattle feces and digesta.** Adviser: Sebastião de Campos Valadares Filho.

The aim of this study was to develop and validate regression models to predict the composition of corn silage (CS), cattle feces, and omasal digesta, also to predict parameters of ruminal in situ degradability of corn silage by near-infrared spectroscopy (NIR). To develop and validate the models, 94 samples of CS, 498 samples of cattle feces, 60 samples of the solid phase, and 74 samples of the liquid phase of omasal digesta were used. However, only 23 samples of CS were used, to develop and validate the models to predict in situ ruminal degradability. The properties evaluated for each type of sample were determined using conventional methods of food analysis. All previously dried and ground samples were then placed in Petri dishes, where the NIR spectra were obtained. The models were developed using the regression by partial least squares (PLS), and the method of ordered predictors selection (OPS) was used. In general, the regression models obtained to predict the composition of corn silage, except the model for organic matter (OM), adequately estimated the studied properties. It was not possible to develop prediction models for the potentially degradable fractions (b) of OM and crude protein (CP) and the degradation rate (kd) of OM. The models obtained to predict the soluble fractions (a) of dry matter (DM), OM and CP, the “b” fractions of DM and “B” of neutral detergent insoluble fiber (NDF), the undegradable fraction of NDF, and “kd” of DM, CP and NDF of corn silage, adequately estimated such properties. The regression models obtained to predict the composition of cattle feces, except the model for NFC, adequately estimated the properties evaluated. The models to predict the composition of the solid phase of omasal digesta have adequately estimated the properties evaluated, except for the model to predict CP. For the liquid phase of the omasal digesta, only the regression model for ether extract estimated adequately. The use of regression models associated with NIR spectroscopy provides an alternative for nutritional assessment and can replace most of the conventional methods of analysis.

Keywords: Chemometrics. Calibration. Spectroscopy.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO GERAL	9
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	11
CAPÍTULO 1	12
Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição a composição e degradabilidade ruminal da silagem de milho	12
RESUMO.....	12
INTRODUÇÃO	14
MATERIAL E MÉTODOS	16
RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	22
CONCLUSÃO	37
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	38
CAPÍTULO 2	40
Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para prever a composição de amostras de fezes e digesta omasal de bovinos.....	40
RESUMO.....	40
INTRODUÇÃO	42
MATERIAL E MÉTODOS	43
RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	48
CONCLUSÃO	68
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	68
CONCLUSÃO GERAL	70

INTRODUÇÃO GERAL

Nas últimas décadas o Brasil se consolidou como o detentor do maior rebanho comercial do mundo, com destaque no mercado mundial de exportações de carne e com projeções de aumento significativo na produção de carne nos próximos anos (ABIEC, 2018). Além do mercado da carne, o país possui o segundo maior rebanho de gado leiteiro do mundo, com mais de 36,3 milhões de cabeças em seu território e é o sexto maior produtor de leite, com uma média de 27,4 bilhões de litros de leite por ano (ANUALPEC, 2019).

Contudo os índices produtivos nacionais são ainda relativamente baixos, apesar da melhora ocorrida nos mesmos nos últimos anos. Uma das formas para melhorar tais índices é incrementar a produtividade do rebanho brasileiro através da formulação de dietas com maior exatidão, e assim atingir melhores resultados no desempenho produtivo e a otimização do uso dos recursos.

Para uma correta e eficiente formulação de dietas, é essencial que se conheça a composição e os parâmetros digestivos dos alimentos disponíveis no momento da formulação das dietas. Os métodos convencionais de análise de alimentos são geralmente trabalhosos, caros e demorados, e dependendo do tamanho do rebanho e da quantidade diária de alimentos consumidos, os resultados das análises somente ficam prontos após todo o lote de alimento já ter sido completamente consumido.

Além da composição dos alimentos, conhecer a degradabilidade dos alimentos permite formular dietas com maior exatidão, para se atingir o desempenho esperado, em termos de proteína degradada no rúmen (PDR) e de proteína não degradada no rúmen (PNDR). A técnica *in situ*, usando sacos de náilon incubados no rúmen de animais fistulados, é útil para determinar as frações solúvel “a”, potencialmente degradável “b” e a taxa de degradação “kd” da proteína bruta (PB) dos alimentos e comparar diferentes produtos. No entanto, o método *in situ* também é trabalhoso e requer tempo para obtenção dos resultados (Petit et al., 1994).

Outra forma importante na avaliação de dietas é mensuração da digestibilidade parcial e total dos nutrientes. Para tal, é necessário medir a concentração dos mesmos em amostras de digesta e de fezes. A digestibilidade é reconhecidamente um dos primeiros parâmetros do valor nutritivo dos alimentos. Tal importância se deve ao fato de que dietas compostas por diferentes ingredientes podem possuir composições químicas semelhantes e apresentarem diferenças no desempenho dos animais, devido às diferenças na digestibilidade das mesmas.

Porém, semelhante ao que acontece com a composição dos alimentos, os métodos convencionais para mensuração desses nutrientes nessas amostras são onerosos, laboriosos e demorados. Dessa forma, é importante que métodos alternativos rápidos, acurados e robustos estejam disponíveis para estimar a composição, degradabilidade e digestibilidade dos alimentos.

Nesse contexto, análises por espectroscopia de infravermelho próximo (NIR) associadas às técnicas quimiométricas podem vir a substituir grande parte dos métodos convencionais de análise de alimentos. As vantagens da utilização destes em relação aos métodos convencionais incluem a análise múltipla dos constituintes dos alimentos, com rapidez e menores custo e labor.

Do ponto de vista ambiental, análises utilizando espectros NIR possuem características não destrutivas, exigindo o mínimo preparo da amostra, além de ser um método não poluente, por não utilizar reagentes químicos. Outra vantagem é que atualmente existem diversos modelos de espectrofotômetros NIR portáteis o que possibilita o uso da tecnologia a campo, e assim a realização de medidas em tempo real, sem a necessidade do envio das amostras para o laboratório.

A espectroscopia NIR tem sido utilizado rotineiramente para fornecer a análise nutricional de alimentos para animais em diversos países (Thomson et al., 2018). No entanto, como a composição dos alimentos varia de acordo com a região em que são produzidos, modelos de calibração gerados em outros países podem não ser adequados às condições brasileiras.

Contudo, falta informações na literatura sobre modelos de regressão disponíveis para a predição da composição da silagem de milho, fezes, digesta, e degradabilidade ruminal in situ da silagem de milho por espectrofotômetro NIR.

Mediante o exposto, assume-se como hipótese que os modelos de regressão podem prever corretamente a composição de amostras de silagem de milho, fezes e digesta omasal de bovinos e a degradabilidade ruminal in situ da silagem de milho. Dessa forma, propõe-se o desenvolvimento e validação de modelos de regressão para a predição da composição da silagem de milho, digesta omasal e fezes de bovinos e a predição de parâmetros de degradabilidade ruminal da silagem de milho por espectrofotômetro NIR.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABIEC. Estatísticas. Disponível em: <http://www.abiec.com.br/ExportacoesPorAno.aspx>. Acesso em: 02 de fevereiro 2020.
- ANUALPEC. Anuário da pecuária Brasileira. Instituto FNP e Agra FNP Pesquisas Ltda, São Paulo, Brasil. 2019.
- PETIT, H.V.; RIOUX, R.; TREMBLAY G.T. Evaluation of forages and concentrates by the in situ degradability technique. In: Reunião anual da sociedade brasileira de zootecnia, 31., 1994, Maringá, PR **Anais...** Maringá: Sociedade Brasileira de Zootecnia, p.119-133, 1994.
- THOMSON, A. L.; HUMPHRIES, D. J.; RYMERA, C. et al. Assessing the accuracy of current near infra-red reflectance spectroscopy analysis for fresh grass-clover mixture silages and development of new equations for this purpose. **Animal Feed Science and Technology**, v.239, p.94-106, 2018.

CAPÍTULO 1

Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição a composição e degradabilidade ruminal da silagem de milho

RESUMO - Objetivou-se desenvolver e validar modelos de regressão para prever os teores de matéria seca (MS), matéria seca em estufa a 105°C (MS105), matéria orgânica (MO), proteína bruta (PB), proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), extrato etéreo (EE), fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), FDN corrigida para cinzas e proteína (FDNcp), FDN indigestível (FDNi), fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), e FDA corrigida para cinzas e proteína (FDAcp), lignina, carboidratos não fibrosos (CNF) e amido da silagem de milho (SM) por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR). Também foi objetivo desse trabalho desenvolver e validar modelos de regressão para prever a degradabilidade ruminal da SM por espectroscopia NIR, onde foram avaliados os seguintes parâmetros: frações solúveis (a) da MS, MO e PB, as frações insolúveis potencialmente degradáveis (b) da MS, MO, PB e a fração potencialmente degradável (B) da FDN, a fração indegradável (I) da FDN e as taxas de degradação (kd) da MS, MO, PB e FDN da SM por espectroscopia NIR. Foram utilizadas 94 amostras para desenvolver e validar os modelos para prever a composição da SM, essas tiveram sua composição determinada através de métodos convencionais para análises de alimentos. No entanto, apenas 23 destas foram utilizadas para desenvolver e validar os modelos para prever a degradabilidade ruminal in situ da MS, MO, PB e FDN. Todas as amostras previamente secas e moídas foram então alocadas em placas de Petri, onde os espectros NIR foram obtidos. Os modelos foram construídos utilizando a regressão por quadrados mínimos parciais (PLS), e o método de seleção de variáveis dos preditores ordenados (OPS) foi empregado. De forma geral, os modelos de regressão obtidos para prever a composição da SM, com exceção do modelo para MO, estimaram de forma adequada as propriedades estudadas. Não foi possível construir modelos de predição para as frações “b” da MO e PB e para a taxa de degradação (kd) da MO. Os modelos obtidos para prever as frações “a” da MS, MO e PB, as frações “b” da MS e “B” da FDN, a fração “I” da FDN e “kd” da MS, PB e FDN da SM, estimaram adequadamente tais propriedades. Assim, conclui-se que os modelos de regressão desenvolvidos podem substituir os métodos convencionais de análise para estimar os teores de MS, MS105, PB, PIDA, PIDN, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, FDAcp, lignina, CNF, amido e as frações “a” da MS, MO e PB, frações “b” da MS e “B” da FDN e a fração “I” da FDN e “kd” da MS, PB e FDN de amostras de SM.

CHAPTER 1

Development and validation of regression models from NIR spectra to predict the composition and ruminal degradability of corn silage

ABSTRACT - The aim of this study was to develop and validate regression models to predict total dry matter (DM), DM at 105 ° C, organic matter (OM), crude protein (CP), neutral detergent insoluble protein (NDIP), acid detergent insoluble protein (ADIP), ether extract (EE), neutral detergent insoluble fiber (NDF), NDF corrected for ash and protein (NDFap), indigestible NDF (iNDF), acid detergent insoluble fiber (ADF), and ADF corrected for ash and protein (ADFap), lignin, non-fibrous carbohydrates (NFC) and starch of corn silage by Near-infrared spectroscopy (NIR). It also aimed to develop and validate regression models to predict the ruminal degradability of corn silage by NIR spectroscopy, the following parameters were evaluated: soluble fractions (a) of the total DM, OM and CP, the potentially degradable insoluble fractions (b) of total DM, OM, CP and the potentially degradable fraction (B) of the NDF, the undegradable fraction (I) of the NDF and the degradation rates (kd) of the total DM, OM, CP and NDF of the corn silage by NIR. Ninety-four samples were used to develop and validate the models to predict the composition of corn silage, their composition were determined by conventional analysis methods. However, only 23 of these were used to develop and validate the models to predict in situ ruminal degradability for DM, OM, CP, and NDF. All previously dried and ground samples were then placed in Petri dishes, where the NIR spectra were obtained. The models were developed using the regression by partial least squares (PLS), and the method of ordered predictors selection (OPS) was used. In general, the regression models obtained to predict the composition of corn silage, except the model for OM, adequately estimated the studied properties. It was not possible to develop prediction models for the “b” fractions of OM and CP and the degradation rate (kd) of OM. The models obtained to predict the “a” fraction of DM, OM and CP, the “b” fractions of DM and “B” of NDF, the “I” fraction of NDF, and “kd” of DM, CP and NDF of corn silage, adequately estimated such properties. In conclusion, regression models developed can replace the conventional methods of analysis to estimate the contents of total DM, DM at 105°C, CP, ADIP, NDIP, EE, NDF, NDFap, iNDF, ADF, ADFap, lignin, NFC, starch and the fractions “a” of DM, OM and CP, fractions “b” of DM and “B” of NDF and the “I” fractions of NDF, and “kd” of DM, CP and NDF of corn silage samples.

INTRODUÇÃO

A principal forma de criação de ruminantes utilizada no Brasil é a pasto (Moreira et al., 2015). No entanto, devido às variações climáticas ocorrentes entre as estações do ano, a principal fonte de alimentos para a bovinocultura, que são as pastagens, apresenta estacionalidade produtiva.

Uma estratégia para minimizar os impactos da sazonalidade sobre a produção de alimentos para os animais é a conservação de forragens via ensilagem. A planta do milho é uma das forrageiras mais utilizadas para a produção de silagem, devido ao seu potencial nutricional e perfil de fermentação desejável (Júnior et al., 2017). Assim, a silagem de milho é considerada um alimento com alto valor nutritivo, de fácil preparo e de grande aceitação pelos animais.

De acordo com o estudo realizado por Pinto e Millen (2018), em que 33 nutricionistas de bovinos de diferentes regiões do país foram entrevistados, a silagem de milho foi a principal fonte de forragem indicada pelos nutricionistas em confinamentos de bovinos de corte no Brasil. Em outro estudo feito por Silva et al. (2019) sobre recomendações nutricionais adotadas por 43 nutricionistas de gado leiteiro no Brasil, também foi relatado que a silagem de milho foi usada como fonte primária de forragem.

Porém a silagem de milho é um alimento que apresenta grande variabilidade nutricional, isso porque o valor nutritivo da silagem de milho depende de um conjunto de fatores, como a escolha do híbrido para o plantio, densidade da cultura, condições de crescimento, grau de maturidade e umidade da cultura quando colhida, e as condições de ensilagem (SATTER e REIS, 2012). Dessa forma o uso de valores tabelados na formulação de dietas é dificultado.

A falta de informação sobre a composição dos alimentos utilizados na formulação de dietas para bovinos representa grande desafio para os nutricionistas, uma vez que é fundamental se conhecer a composição e os parâmetros de degradação dos mesmos para o correto e eficiente balanceamento de dietas. A forma mais acurada para se ter acesso à composição dos alimentos é através dos métodos convencionais de análises de alimentos. No entanto, tais métodos são geralmente laboriosos, dispendiosos e demorados.

Além da composição dos alimentos, conhecer a degradabilidade ruminal dos alimentos permite comparar alimentos e formular dietas com maior exatidão, para se atingir o desempenho esperado. A partir do método de incubação ruminal *in situ* é possível se estimar os teores proteína degradável no rúmen (PDR) e proteína não degradável no rúmen (PNDR) por exemplo.

Entretanto, o método *in situ* também é trabalhoso e requer tempo para obtenção dos resultados (Petit et al., 1994).

Nesse contexto, análises por espectroscopia de infravermelho próximo (NIR) associadas às técnicas quimiométricas podem vir a substituir grande parte dos métodos convencionais de análise de alimentos. As vantagens da utilização da espectroscopia NIR em relação aos métodos convencionais incluem a análise múltipla dos constituintes dos alimentos, com rapidez e menores custo e labor. Outra vantagem da utilização da espectroscopia NIR, do ponto de vista ambiental, é que as análises utilizando esse sistema possuem características não destrutivas, exigindo o mínimo preparo da amostra, além de ser um método não poluente, por não utilizar reagentes químicos.

O espectrofotômetro NIR tem sido utilizado rotineiramente para fornecer a análise nutricional de alimentos para animais em diversos países (Thomson et al., 2018). No entanto, como a composição dos alimentos varia de acordo com a região em que são produzidos, modelos de calibração construídos em outros países podem não ser adequados às condições brasileiras. Além disso, atualmente há poucos relatos na literatura de estudos sobre a utilização da espectroscopia NIR para a predição da composição e degradabilidade da silagem de milho.

Mediante o exposto, assume-se como hipótese que os modelos de regressão podem prever corretamente a composição e a degradabilidade ruminal *in situ* da silagem de milho. Assim, objetivou-se nesse trabalho desenvolver modelos de regressão para a prever os teores de matéria seca (MS), matéria seca em estufa a 105°C (MS105), matéria orgânica (MO), proteína bruta (PB), proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), extrato etéreo (EE), fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), FDN corrigida para cinzas e proteína (FDN_{cp}), FDN indigestível (FDN_i), fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), e FDA corrigida para cinzas e proteína (FDA_{cp}), lignina, carboidratos não fibrosos (CNF) e amido da silagem de milho por espectroscopia NIR. Também foi objetivo desse trabalho desenvolver e validar modelos de regressão para prever a degradabilidade ruminal da silagem de milho por espectroscopia NIR, foram avaliados os seguintes parâmetros: frações solúveis (a) da MS, MO e PB, as frações insolúveis potencialmente degradáveis (b) da MS, MO, PB e a fração potencialmente degradável (B) da FDN, a fração indegradável (I) da FDN e as taxas de degradação (kd) da MS, MO, PB e FDN da silagem de milho por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR).

MATERIAL E MÉTODOS

Os ensaios de degradabilidade *in situ* e as análises laboratoriais foram conduzidas no Laboratório de Nutrição de Ruminantes (LabNur) do Departamento de Zootecnia da Universidade Federal de Viçosa (UFV), Viçosa, Minas Gerais. Os procedimentos de cuidado e manejo dos animais durante os ensaios de degradabilidade estão de acordo com as normas da Comissão de Ética no Uso de Animais de Produção (CEUAP) da Universidade Federal de Viçosa, protocolo nº 042/2019.

Obtenção e preparo das amostras

Foram coletadas 94 amostras de silagem de milho de diferentes estados do Brasil, sendo estas provenientes da Bahia, Goiás, Minas Gerais, Mato Grosso, Pernambuco, Paraná, Rio Grande do Sul e São Paulo, a fim de garantir suficiente variação da composição para construir e avaliar os modelos.

Após a coleta, as amostras foram encaminhadas para o LabNur para posteriores análises laboratoriais. As amostras foram secas em estufa com ventilação forçada (55°C) por 72 horas, posteriormente moídas em moinho de facas (Tecnal, Piracicaba, São Paulo, Brasil) com peneiras de porosidade 2 mm para o ensaio de degradabilidade *in situ* e 1 mm para as análises laboratoriais e então, armazenadas.

Ensaio de Degradabilidade *in situ*

Das 94 amostras de silagem de milho coletadas, 23 foram avaliadas no ensaio de degradabilidade *in situ*. Foram realizadas 2 corridas de incubação *in situ* utilizando-se o delineamento em quadrado latino 3 x 3, sendo as amostras divididas em 6 grupos sendo que 5 grupos continham 4 amostras de silagem de milho em cada e 1 grupo continha 3 amostras de silagem de milho, conforme a Figura 1.

Foram utilizados três bovinos machos Nelore não castrados, canulados no rúmen, provenientes do Departamento de Zootecnia. Os animais foram alojados em baias individuais de piso cimentado em sistema Tie Stall, providas de bebedouro e comedouro de concreto. Os animais receberam dieta constituída por 70% silagem de milho e 30% concentrado à base de milho, farelo de soja, farelo de trigo, ureia, sulfato de amônio, sal comum, bicarbonato e mistura mineral. O fornecimento da dieta foi feito duas vezes por dia, sendo na parte manhã às 7h fornecido todo volumoso e metade do concentrado, e na parte da tarde, fornecido o restante do concentrado, com água permanente à disposição dos animais.

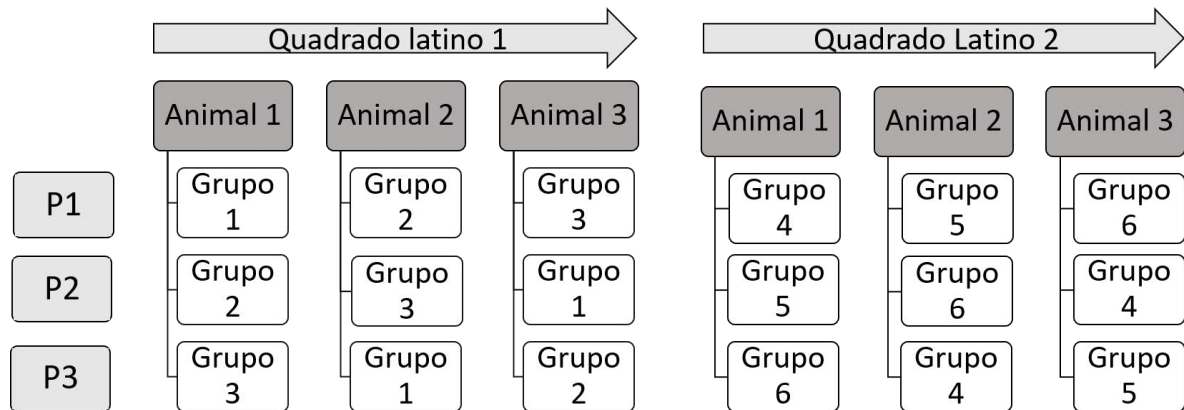


Figura 1 - Representação esquemática do processo de incubação de 23 amostras de silagem de milho divididas em 6 grupos.

Após um período de adaptação às instalações e a dieta de 30 dias, foram iniciadas as incubações nos seis períodos experimentais. Cada período experimental teve duração de quatro dias e tanto as amostras de silagem quanto os animais que receberam cada grupo de alimentos foram distribuídos ao acaso.

Os parâmetros de degradação ruminal da MS, MO, PB e FDN foram determinados utilizando sacos de náilon devidamente identificados, medindo 15 x 8 cm, com porosidade de 50 micrômetros (Sefar Nitex, Sefar, Thal, Switzerland), contendo 6,0 gramas de amostra de silagem de milho previamente moída à 2 mm. Neste procedimento, foram avaliados oito tempos de incubação 0, 3, 6, 12, 24, 48, 72 e 96 horas.

Os sacos foram introduzidos no rúmen em ordem decrescente do tempo de incubação e retirados ao mesmo tempo ao final do último dia de incubação em cada período. Foram incubados 2 sacos de náilon por amostra e por horário, totalizando 56 sacos de náilon no rúmen de cada animal por período. O tempo zero não foi incubado, sendo apenas lavado no final do processo junto com os demais sacos.

As amostras foram incubadas através da cânula ruminal, fixadas a uma corrente de aço com peso na extremidade, permitindo assim sua total imersão no conteúdo ruminal. Decorrido o tempo de incubação, os sacos foram retirados simultaneamente do rúmen dos três animais e lavados em água corrente até que essa se apresentasse cristalina, sendo então colocados em estufa de 55°C por 72 horas. Após secos, os sacos foram colocados em estufa a 105°C por duas horas e pesados em balança de precisão. Ao final destes procedimentos, os dois sacos referentes ao mesmo horário e mesma amostra foram agrupados, retirados dos sacos de náilon e colocados em sacos plásticos identificados individualmente, sendo obtida uma amostra de silagem de milho por período, animal e tempo de incubação. Os resíduos foram moídos em moinho de

facas (Tecnal, Piracicaba, São Paulo, Brasil) com peneiras de porosidade 1 mm para realização de posteriores análises.

Composição das Amostras

Para obtenção da composição das amostras de silagem, as mesmas foram moídas em moinhos de faca dotados de peneiras com crivos de diâmetro de 1 mm e então analisadas quanto aos teores de MS e MS105 segundo método INCT - CA G-003/1, MO segundo método INCT-CA M-001/1, PB segundo método INCT - CA N-001/1, EE segundo método INCT – CA G-004/1, FDN segundo método INCT - CA F-001/1, FDA segundo método INCT – CA F-003/1, e correções da FDN e FDA para proteína (PIDN e PIDA respectivamente) e cinzas (CIDN e CIDA respectivamente), segundo métodos INCT - CA N-004/1, INCT - CA N-005/1, INCT - CA M002/1, INCT - CA M003/1 e lignina segundo método INCT – CA F005/01 (Detmann et al., 2012). Os teores de FDNi foram obtidos utilizando 288 horas de incubação, conforme descrito por Casali et al. (2008). O teor de amido foi obtido utilizando a técnica descrita por Silva et al. (2019). Os CNF foram calculados conforme Detmann e Valadares Filho (2010).

As amostras dos resíduos de incubação provenientes dos ensaios de degradabilidade *in situ*, foram analisadas quanto aos teores de MS, MO, PB e FDN, utilizando as mesmas técnicas descritas anteriormente.

Parâmetros de degradação ruminal da MS, MO, PB e FDN

Os parâmetros de degradação ruminal da MS, MO e PB estimados nos ensaios *in situ* foram estimados através do modelo assintótico de primeira ordem reparametrizado por Ørskov e McDonald (1979): $\text{Deg}(t) = a + b \times (e^{-kd \times t})$, em que “Deg (t)” é a fração de MS, MO ou PB degradada no tempo “t” (%); “a” é fração solúvel em água (%); “b” é a fração insolúvel em água potencialmente degradável no rúmen; “kd” é taxa de degradação da fração “b” (h^{-1}); e “t” é a variável independente tempo (h).

Os parâmetros de degradação da fibra insolúvel em detergente neutro (FDN) estimados nos ensaios *in situ* foram calculados através do modelo logístico descrito por Van Milgen et al. (1991): $R_t = B \times (1 + \lambda \times t) \times e^{-\lambda \times t} + I$, em que “Rt” é o resíduo não-degradado de FDN no tempo “t” (%); “B” é o resíduo potencialmente degradável (%); “I” é a fração indegradável (%); “λ” é a taxa fracional conjunta de latência e degradação (h^{-1}); e “t” é variável independente tempo (h).

A taxa de degradação (kd) da FDN foi calculada com base em λ, utilizando-se as propriedades da distribuição $\Gamma(2)$ (Ellis et al., 1994): $kd = 0,59635 \times \lambda$

Os parâmetros de degradação foram estimados com programa PROC NLIN do SAS, utilizando-se algoritmo marquardt.

Análise espectrofotométrica

Foi realizada a leitura de todas as amostras de silagem de milho, para obtenção de seus espectros, usando espectrofotômetro NIR portátil (ITPhotonics S.r.l., modelo poliSPEC^{NIR} 900-1700, Breganze, Itália) com auxílio do software poliDATA (ITPhotonics S.r.l, Breganze, Itália).

As amostras previamente moídas a 1 mm foram homogeneizadas e três sub-amostras foram acondicionadas em placas de Petri (dimensão 60x15mm), sendo posteriormente feita a coleta dos espectros. Os espectros foram registrados como $\log(1/R)$, onde R é a refletância da amostra, na faixa de 902 e 1680 nm, medidos em intervalos de 2 nm. Assim, três espectros por amostra foram tomados, sendo utilizada a média para posteriores análise dos dados.

Construção e validação dos modelos de regressão

Os arquivos contendo os espectros de infravermelho das amostras avaliadas foram exportados do software poliDATA, importados para o software SensorLogic GmbH (Software + Sensor Systeme, Norderstedt, Alemanha) onde foram organizados e exportados em extensão xls, a qual foi importada pelo software Matlab 2019b (Math Works, Natick, USA). Uma matriz de dados com todos os espectros foi construída e denominada matriz **X**, que são as variáveis independentes. As linhas da matriz **X** correspondem às amostras e as colunas correspondem às variáveis (comprimento de onda).

Vinte e sete propriedades foram determinadas e denominadas como vetores **y**, sendo estas as variáveis dependentes. As propriedades avaliadas para estimar a composição da silagem de milho foram: MS, MS105, MO, PB, PIDN, PIDA, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, FDAcp, LIG, CNF e Amido. Já as propriedades relacionadas à degradação da silagem de milho foram: Fração “a” da MS, MO e PB, Fração “b” da MS, MO, PB e “B” da FDN, Fração “I” da FDN e “kd” da MS, MO, PB e FDN. Estes possuem um número de linhas igual ao número de amostras na matriz **X**. O esquema da matriz **X** e os vetores **y** para o conjunto de dados de composição e degradação podem ser visualizados nas Figuras 2 e 3 respectivamente.

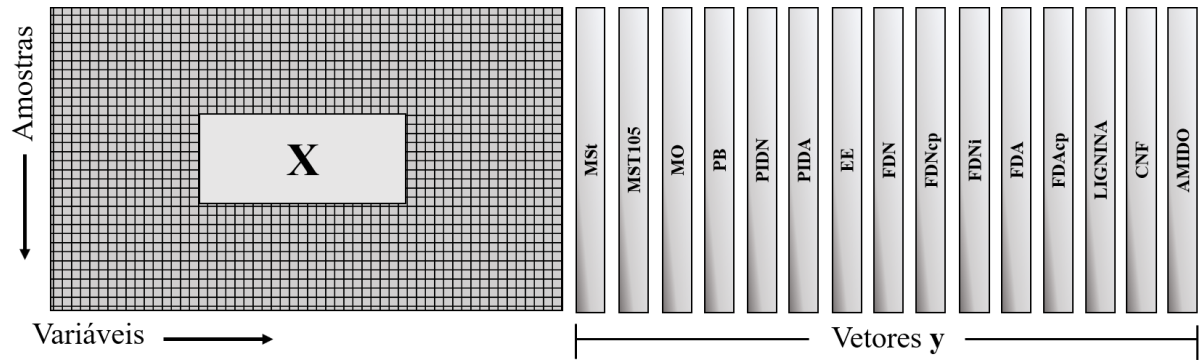


Figura 2 – Esquema com a matriz X contendo o conjunto de espectros das amostras de silagem de milho e os vetores y com os respectivos valores de cada propriedade obtidos através dos métodos convencionais de análises.

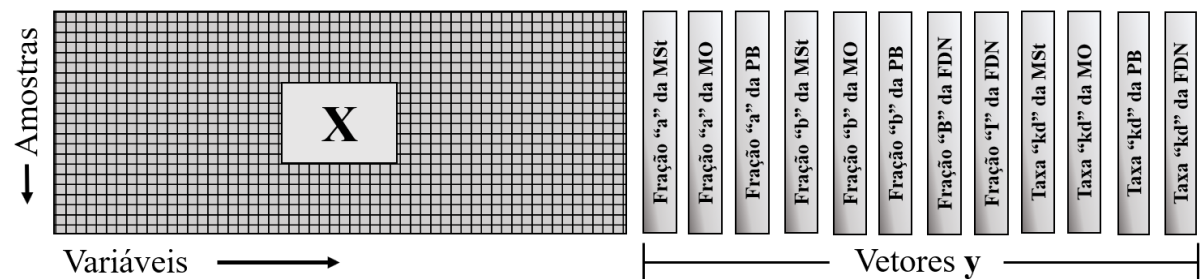


Figura 3 - Esquema com a matriz X contendo o conjunto de espectros das amostras de silagem de milho e os vetores y com os respectivos valores dos parâmetros de degradação obtidos através do ensaio in situ.

Para construção dos modelos foi utilizada a regressão por quadrados mínimos parciais (PLS), utilizando variáveis selecionadas através de três abordagens do método Seleção de Preditores Ordenados (OPS), sendo eles OPS automático (autoOPS), OPS por feedback (feedOPS), OPS por intervalos (iOPS), conforme citado por Roque et al. (2019). As três abordagens do OPS foram testadas para todos os conjuntos de dados usando todos os vetores informativos.

Foi feita a remoção de outliers e após isso, o conjunto de dados utilizado para construir o modelo referente a composição da silagem de milho, foi dividido em conjunto de calibração e validação usando o algoritmo de Kennard-Stone (Kennard & Stone, 1969), que seleciona as amostras com base em suas distâncias. Já o conjunto de dados relacionado à degradação da silagem de milho não foi dividido, devido ao pequeno número de amostras avaliadas, e o modelo foi avaliado apenas pela validação cruzada. A variável y foi centrada na média para todas as propriedades e diferentes pré-tratamentos e suas combinações foram estudadas para

cada matriz completa \mathbf{X} . Os pré-tratamentos testados foram centrar na média, autoescalar, suavização, primeira e segunda derivadas, correção do espalhamento multiplicativa (MSC), normalização, correção da linha de base, correção da variação normal padrão (SNV) e remoção de tendência. As combinações de dois, três e quatro pré-tratamentos também foram estudadas. Os pré-tratamentos que apresentaram um modelo com o menor valor da raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada (RMSECV) foram escolhidos para cada conjunto de dados.

Para a construção dos modelos, utilizou-se o conjunto de calibração. Os algoritmos OPS (autoOPS, feedOPS, iOPS) foram aplicados usando a janela de 10 e incrementos de 5 variáveis, sendo que todas as variáveis foram testadas, aplicou-se a validação cruzada randômica, onde as divisões foram definidas em 10% das linhas da matriz \mathbf{X} . No feedOPS, como critério de convergência, utilizou-se 2% como a diferença mínima entre dois RMSECVs consecutivos e dez como o número máximo de loops. No iOPS, quando se utilizou a opção de executar a seleção usando o feedOPS, os critérios de convergência foram os mesmos que os utilizados no feedOPS. A matriz \mathbf{X} completa foi dividida em intervalos de 10% do seu tamanho, limitados em pelo menos cinquenta variáveis. Além disso, o número de variáveis latentes para seleção de preditores ordenados (hOPS) foi calculado para cada intervalo no iOPS.

Uma vez construído cada um dos modelos, usou-se o conjunto de predição de cada propriedade para verificar a capacidade preditiva dos modelos e assim validar os mesmos. Os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos foram comparados. Os valores da raiz quadrada do erro quadrático médio da predição (RMSEP) e da validação cruzada (RMSECV), do coeficiente de correlação dos valores medidos e preditos pelo modelo (RP) e na validação cruzada (RCV), bem como os valores dos erros relativos das amostras foram usados como parâmetro para verificar a capacidade de predição do modelo construído.

Os dados referentes aos valores obtidos por métodos laboratoriais convencionais e aqueles preditos pelos modelos construídos para estimar a composição da silagem de milho foram exportados para o software Model Evaluation System (MES; Tedeschi 2006), onde foram comparados usando o seguinte modelo de regressão: $y = \beta_0 + \beta_1 \times x$, em que x = valores previstos; y = valores observados; β_0 e β_1 = interceptação e inclinação, respectivamente.

A regressão foi avaliada de acordo com um teste de hipótese simultânea (Mayer et al., 1994), onde: $H_0: \beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$ e H_a : não H_0 . Caso a hipótese nula não for rejeitada, pode-se concluir que os modelos estimam com precisão a composição da silagem de milho.

As estimativas também foram avaliadas usando o quadrado médio do erro de predição (MSEP) e seus componentes (Kobayashi e Salam, 2000): $MSEP = SB + MaF + MoF = 1/n \sum_{i=1} (x_i - y_i)^2$; $SB = (x_i - y_i)^2$; $MaF = (s_x - s_y)^2$; $MoF = 2s_x s_y (1 - r)$; em que x = valores previstos; y = valores observados; MSEP = quadrado médio do erro de predição; SB = quadrado do viés; MoF = componente relativo ao modelo de flutuação aleatória; MaF = componente relativo à magnitude da flutuação aleatória; s_x e s_y = desvios padrão dos valores previstos e observados, respectivamente, e r = correlação linear de Pearson entre os valores previstos e observados.

Para todos os cálculos de variância e covariância, o número total de observações foi usado como um divisor por se tratar de avaliação de erro de predição (Kobayashi e Salam, 2000).

A eficiência de predição foi determinada pela estimativa do coeficiente de correlação e concordância (CCC) ou índice de reprodutibilidade descrito por Tedeschi (2006).

Para comparações, o nível de 0,05 foi estabelecido como o nível crítico de probabilidade para erro do tipo I.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Composição da silagem de milho

Na Tabela 1 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizados em amostras de silagem de milho, o tamanho dos conjuntos de calibração e validação e os pré-tratamentos realizados em cada conjunto de dados. Em todos os casos, os modelos construídos com pré-tratamentos dos espectros apresentaram menores RMSECV, indicando um melhor ajuste e precisão dos modelos que passaram por pré-tratamentos.

Os pré-tratamentos são ferramentas matemáticas usadas para o ajuste dos modelos e correção dos erros aleatórios e erros sistemáticos (Pasquini, 2003). Estes podem agir, por exemplo, corrigindo perturbações causadas por fenômenos físicos como dispersões (MSC), igualando a magnitude das amostras através de um fator de normalização (normalização), minimizando distúrbios causados por ruídos (alisamento), dentre outros já descritos, e por esta razão o uso dos pré-tratamentos melhora a qualidade dos modelos ajustados.

Os espectros NIR das amostras ($N = 94$) de silagem de milho coletados são apresentados na **Figura 4**.

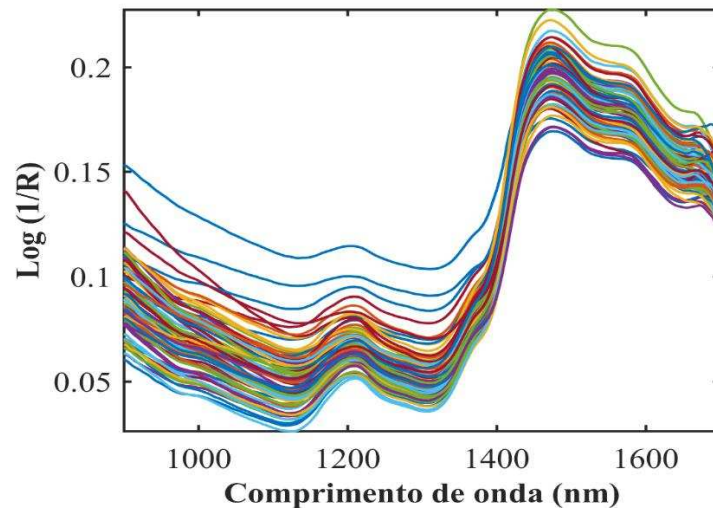


Figura 4 – Espectros NIR de amostras silagem de milho

Seleção de variáveis

A escolha adequada de variáveis na matriz de dados \mathbf{X} pode melhorar significativamente a capacidade de predição do modelo de regressão. Desta forma, a seleção de variáveis envolve a escolha de determinadas regiões do espectro (um conjunto de comprimentos de onda), que minimizam o erro na predição. Como consequência, têm-se a construção de modelos mais robustos, simples de interpretar e com melhor exatidão (Oliveira et al., 2004).

Na construção dos modelos, utilizaram-se previamente os algoritmos autoOPS, feedOPS, iOPS. Dessa forma, foi possível a seleção de regiões do espectro que apresentam informações relevantes e que melhor estão correlacionadas com as propriedades avaliadas em amostras de silagem de milho, tais regiões podem ser visualizadas na Figura 5.

O número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, número de variáveis latentes selecionadas e os parâmetros estatísticos calculados para todos os modelos estão representados na Tabela 3.

Tabela 1. - Análise descritiva dos valores obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais das amostras de silagem de milho e informações sobre conjuntos de dados usados para construir e validar os modelos de predição.

Propriedade ¹	Média	Mínimo	Máximo	Desvio Padrão	Tamanho Matriz		Pré-tratamentos ²
					Calibração	Predição	
MS	30,19	20,43	41,61	4,142	58 × 256	25 × 256	Norm + 2Der
MS105	92,36	84,67	95,45	2,171	68 × 256	17 × 256	Norm + 2Der
MO	95,58	86,26	97,71	1,710	62 × 256	23 × 256	2Der + MSC
PB	6,87	5,00	9,06	0,743	64 × 256	16 × 256	2Der + MSC
PIDN	0,87	0,45	1,68	0,251	66 × 256	16 × 256	2Der + MSC
PIDA	0,28	0,12	0,64	0,080	68 × 256	18 × 256	2Der + MSC
EE	2,38	1,26	3,76	0,542	63 × 256	16 × 256	Norm + 2Der
CNF	42,69	29,40	53,77	7,361	58 × 256	25 × 256	2Der + SNV
FDN	45,91	34,15	57,81	5,689	65 × 256	16 × 256	Norm + 2Der
FDNcp	43,73	32,92	56,33	5,852	63 × 256	16 × 256	Norm + 2Der
FDNi	15,91	10,20	23,15	2,707	60 × 256	15 × 256	Norm + 2Der
FDA	24,83	17,78	32,24	4,561	66 × 256	17 × 256	Norm + 2Der
FDAcP	23,69	17,24	31,13	4,327	63 × 256	16 × 256	Norm + 2Der
Lignina	2,46	1,16	3,91	0,569	66 × 256	17 × 256	Norm + 2Der
Amido	25,07	11,00	40,53	7,197	57 × 256	24 × 256	2Der + Detrend

¹MS = % matéria seca, MS105 = matéria seca a 105°C (% da MS), MO = matéria orgânica (% da MS), PB = proteína bruta (% da MS), PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro (% da MS), PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido (% da MS), EE = extrato etéreo (% da MS), CNF = carboidratos não fibrosos (% da MS), FDN = fibra insolúvel em detergente neutro (% da MS), FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína (% da MS), FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (% da MS), FDA = fibra insolúvel em detergente ácido (% da MS), FDAcp = fibra insolúvel em detergente ácido corrigido para cinzas e proteína (% da MS).

²Norm = normalização, 2Der: segunda derivada, MSC = correção do espalhamento multiplicativa, SNV = correção da variação normal padrão, Detrend = remoção de tendência.

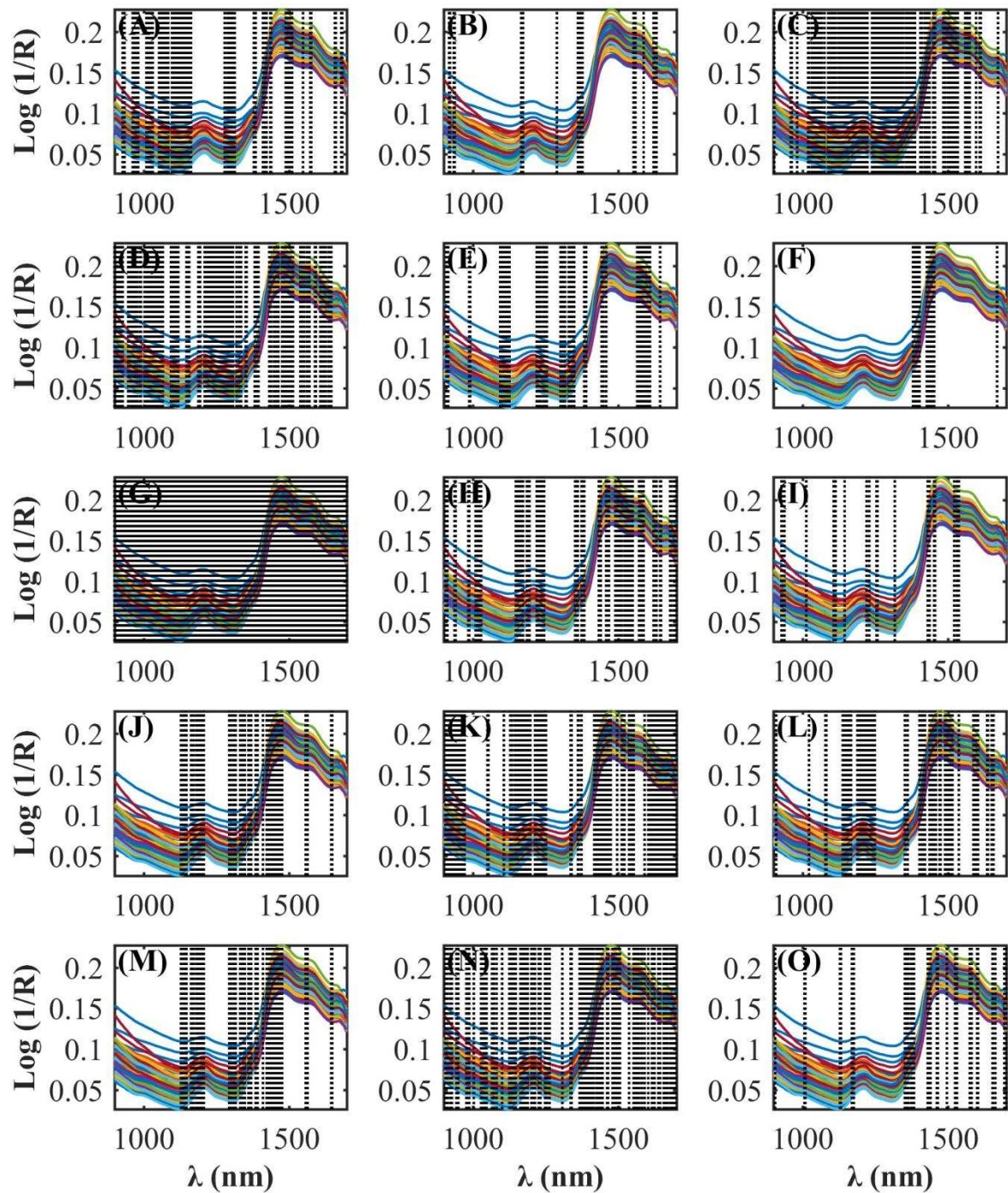


Figura 5 - Regiões do espectro das amostras de silagem de milho selecionadas pelos algoritmos OPS para construção dos modelos para predição dos teores de (A) matéria seca (MS), (B) matéria seca à 105°C (MS105), (C) matéria orgânica (MO), (D) proteína bruta (PB), (E) proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), (F) proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), (G) extrato etéreo (EE), (H) carboidratos não fibrosos (CNF), (I) fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), (J) FDN corrigida para cinzas e proteína (FDNcp), (K) FDN indigestível (FDNi), (L) fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), (M) FDA corrigida para cinzas e proteína (FDAcp), (N) lignina e (O) amido da silagem de milho.

Tabela 2. Resultados estatísticos para os modelos de predição da composição da silagem de milho.

Modelos ²	Itens ¹							
	nvars	nlv	RMSEC	RC	RMSECV	RCV	RMSEP	RP
MS	85	4	2,703	0,72	3,184	0,59	2,683	0,74
MS105	20	2	1,117	0,82	1,378	0,71	1,199	0,83
MO	134	9	0,291	0,95	0,633	0,76	0,824	0,64
PB	130	8	0,415	0,83	0,571	0,68	0,405	0,84
PIDN	60	8	0,116	0,84	0,131	0,80	0,136	0,76
PIDA	18	3	0,046	0,67	0,049	0,60	0,052	0,59
EE	256	8	0,263	0,87	0,461	0,55	0,289	0,86
CNF	86	7	1,691	0,96	2,208	0,93	2,092	0,92
FDN	20	7	1,438	0,97	1,788	0,95	1,473	0,97
FDNcp	60	8	1,180	0,94	1,374	0,92	1,387	0,91
FDNi	117	9	0,952	0,92	1,423	0,81	1,211	0,87
FDA	70	7	1,113	0,95	1,615	0,90	1,318	0,94
FDAcp	60	8	1,180	0,94	1,346	0,92	1,387	0,91
Lignina	100	10	0,087	0,99	0,312	0,82	0,253	0,91
Amido	35	9	2,485	0,93	3,262	0,88	2,900	0,91

¹nvars = número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, nlv = número de variáveis latentes, RMSEC = raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração, RC = coeficiente de correlação da calibração, RMSECV = raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada, RCV = coeficiente de correlação da validação cruzada, RMSEP = raiz quadrada do erro quadrático médio da predição, RP = coeficiente de correlação da predição;

² MS = matéria seca, MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, EE = extrato etéreo, CNF = carboidratos não fibrosos, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, FDAcp = fibra insolúvel em detergente ácido corrigido para cinzas e proteína, PB = proteína bruta, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido.

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 3, todos modelos apresentaram baixo RMSEP, sendo que desses, os desenvolvidos para estimar MO e PIDA apresentaram um coeficiente de correlação da predição mediano, enquanto os demais apresentaram alto coeficiente de correlação da predição. Os gráficos com os erros relativos da predição para cada modelo podem ser visualizados na Figura 6. Tais resultados indicam que os modelos apresentaram boa capacidade de predição.

Nas Tabelas 4, 5 e 6 encontram-se os resultados da avaliação da validação externa para cada constituinte químico analisado. Quando os coeficientes de regressão, β_0 e β_1 , são iguais a zero ou 1, respectivamente, indica a equivalência entre os valores preditos e observados. Com o CCC, é possível averiguar se o modelo está super ou subestimando os valores observados (quanto mais perto de 1, melhor é o modelo), além disso se tem idéia da precisão e acurácia do modelo. O quadrado médio do erro de predição (MSEP) considera que quanto menor, melhor é o modelo e também avalia se o erro do modelo está mais associado ao viés (SB), aos erros sistemáticos (MaF) ou aos erros aleatórios (MoF).

Os modelos construídos, estimaram com acurácia os teores de MS, MS105, EE, PB, PIDA, PIDN, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, FDAcp, LIG, CNF e amido ($P > 0,05$). Porém o modelo construído para estimar MO produziu estimativas não condizentes ao observado para tal propriedade ($P < 0,05$). Ao visualizar o CCC, pode se concluir que os modelos construídos para MS105, EE, PB, PIDN, FDN, FDNc, FDNi, FDA, FDAcp, LIG, CNF e amido estimaram com precisão e acurácia ($CCC > 0,70$), enquanto os modelos para MS, MO e PIDA apresentaram precisão intermediárias ($0,50 < CCC < 0,70$).

Para todos os modelos que estimaram com acurácia as propriedades estudadas ($P > 0,05$) verificou-se que mais de 70% do MSEP foram associados à erros aleatórios (Mof). Todavia, o modelo para a predição do teor de MO, apresentou grande parte do MSEP (42,23%) relacionado ao viés (SB) e erros sistemáticos (Maf), o que indica um problema de ajuste do modelo.

Os gráficos com os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos são apresentados na Figura 7.

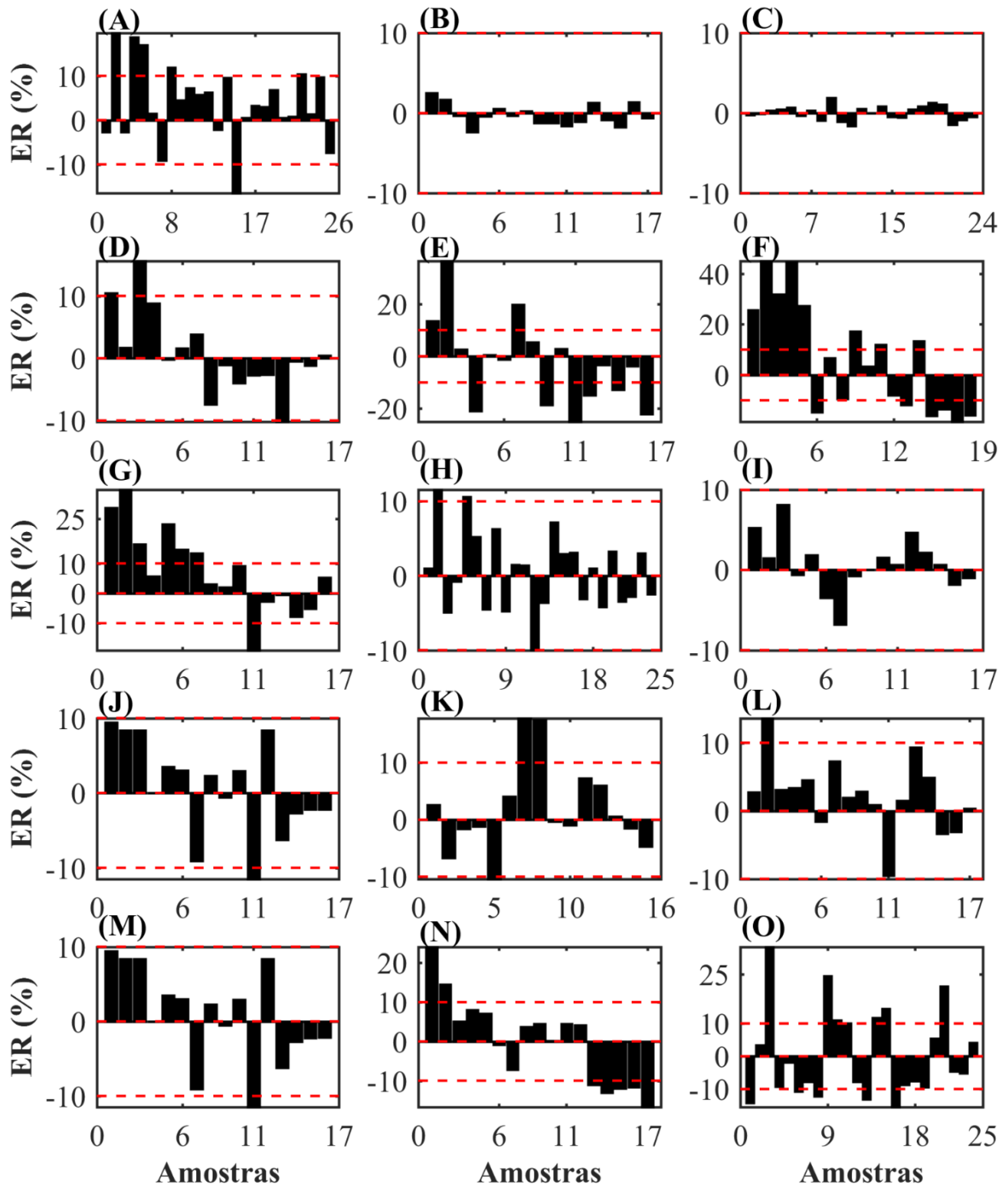


Figura 6 – Erro relativo da predição dos modelos construídos para os teores de (A) matéria seca (MS), (B) matéria seca à 105°C (MS105), (C) matéria orgânica (MO), (D) proteína bruta (PB), (E) proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), (F) proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), (G) extrato etéreo(EE), (H) carboidratos não fibrosos (CNF), (I) fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), (J) FDN corrigida para cinzas e proteína (FDNcp), (K) FDN indigestível (FDNi), (L) fibra insolúvel em detergente ácido(FDA), (M) FDA corrigida para cinzas e proteína (FDAcp), (N) lignina e (O) amido da silagem de milho.

Tabela 3. Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos para os teores (%) de MS, MS105, MO, EE e CNF da silagem de milho.

Item	MS ⁸		MS105 ⁹		MO ¹⁰		EE ¹¹		CNF ¹²	
	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴
Média	29,0	30,1	92,3	92,1	95,7	95,7	2,3	2,4	42,2	42,3
Desvio padrão	3,13	2,18	2,17	2,05	0,83	1,08	0,51	0,39	5,36	5,11
Máximo	37,2	33,6	95,3	96,2	97,4	97,7	3,1	3,2	51,3	52,9
Mínimo	23,9	25,8	87,7	88,3	94,4	93,5	1,3	1,7	30,8	32,7
R ¹	-	0,535	-	0,677	-	0,383	-	0,716	-	0,918
CCC ²	-	0,665	-	0,829	-	0,619	-	0,794	-	0,917
Regressão										
Intercepto										
Estimativa	-	-3,82	-	11,03	-	48,35	-	-0,47	-	1,37
Erro-padrão	-	6,239	-	13,844	-	12,383	-	0,452	-	3,781
Inclinação										
Estimativa	-	1,10	-	0,88	-	0,49	-	1,14	-	0,96
Erro-padrão	-	0,205	-	0,150	-	0,129	-	0,183	-	0,089
P-valor ³	-	0,204	-	0,589	-	0,003	-	0,187	-	0,882
MSEP ⁴	-	7,199	-	1,438	-	0,678	-	0,084	-	4,377
SB ⁵	-	0,870	-	0,043	-	0,002	-	0,015	-	0,018
Maf ⁶	-	0,059	-	0,055	-	0,285	-	0,003	-	0,032
Mof ⁷	-	6,270	-	1,340	-	0,392	-	0,066	-	4,327

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Matéria seca, ⁹Matéria seca à 105°C amostra, ¹⁰Matéria orgânica, ¹¹Extrato etéreo, ¹²Carboidratos não fibrosos, ¹³Medido por método laboratorial convencional, ¹⁴Predito pelo modelo construído.

Tabela 4. Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de FDN, FDNcp, FDNi, LIG e MO da silagem de milho.

Item	FDN ⁸		FDNcp ⁹		FDNi ¹⁰		FDA ¹¹		FDAcp ¹²	
	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴	Med ¹³	Pred ¹⁴
Média	45,7	45,9	23,5	23,6	15,8	16,1	24,7	25,2	23,5	23,6
Desvio padrão	5,80	5,61	3,52	3,05	2,21	2,48	3,67	3,45	3,52	3,05
Máximo	55,5	55,0	30,2	29,6	20,6	19,7	31,6	31,7	30,2	29,6
Mínimo	35,2	37,1	17,9	19,5	12,5	12,1	18,6	19,1	17,9	19,5
R ¹	-	0,929	-	0,825	-	0,743	-	0,874	-	0,825
CCC ²	-	0,965	-	0,905	-	0,860	-	0,929	-	0,905
Regressão										
Intercepto										
Estimativa	-	-0,22	-	-1,39	-	3,31	-	-0,44	-	-1,39
Erro-padrão	-	3,287	-	2,960	-	1,965	-	2,397	-	2,960
Inclinação										
Estimativa	-	1,00	-	1,06	-	0,78	-	1,00	-	1,06
Erro-padrão	-	0,071	-	0,125	-	0,120	-	0,094	-	0,125
P-valor ³	-	0,758	-	0,892	-	0,143	-	0,329	-	0,892
MSEP ⁴	-	2,168	-	1,925	-	1,466	-	1,737	-	1,925
SB ⁵	-	0,084	-	0,004	-	0,091	-	0,239	-	0,004
Maf ⁶	-	<0,001	-	0,028	-	0,289	-	<0,001	-	0,028
Mof ⁷	-	2,084	-	1,893	-	1,087	-	1,498	-	1,893

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Fibra insolúvel em detergente neutro, ⁹Fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, ¹⁰Fibra insolúvel em detergente neutro indigestível, ¹¹Fibra insolúvel em detergente ácido, ¹²Fibra insolúvel em detergente ácido corrigida para cinzas e proteína, ¹³Medido por método laboratorial convencional, ¹⁴Predito pelo modelo construído.

Tabela 5. Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de PB, PIDA, PIDN, CNF e Amido da silagem de milho.

Item	PB ⁸		PIDN ⁹		PIDA ¹⁰		Lignina		Amido	
	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²
Média	6,8	6,8	0,8	0,8	0,3	0,3	2,4	2,4	24,4	24,1
Desvio padrão	0,76	0,62	0,21	0,15	0,07	0,04	0,53	0,35	7,12	6,27
Máximo	8,1	8,1	1,4	1,1	0,4	0,4	3,3	2,8	39,4	38,7
Mínimo	5,2	5,8	0,5	0,5	0,1	0,2	1,3	1,6	12,6	11,5
R ¹	-	0,678	-	0,551	-	0,310	-	0,819	-	0,821
CCC ²	-	0,819	-	0,713	-	0,546	-	0,831	-	0,903
Regressão										
Intercepto										
Estimativa	-	-0,17	-	0,02	-	0,03	-	-0,89	-	0,57
Erro-padrão	-	1,230	-	0,188	-	0,084	-	0,394	-	2,495
Inclinação										
Estimativa	-	1,02	-	1,03	-	0,87	-	1,39	-	1,03
Erro-padrão	-	0,179	-	0,233	-	0,294	-	0,163	-	0,100
P-valor ³	-	0,966	-	0,536	-	0,735	-	0,070	-	0,893
MSEP ⁴	-	0,164	-	0,019	-	0,003	-	0,064	-	8,412
SB ⁵	-	0,001	-	0,002	-	<0,001	-	0,002	-	0,046
Maf ⁶	-	<0,001	-	<0,001	-	<0,001	-	0,017	-	0,040
Mof ⁷	-	0,163	-	0,017	-	0,003	-	0,045	-	8,326

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Proteína bruta, ⁹Proteína insolúvel em detergente neutro, ¹⁰Proteína insolúvel em detergente ácido, ¹¹Medido por método laboratorial convencional, ¹²Predito pelo modelo construído.

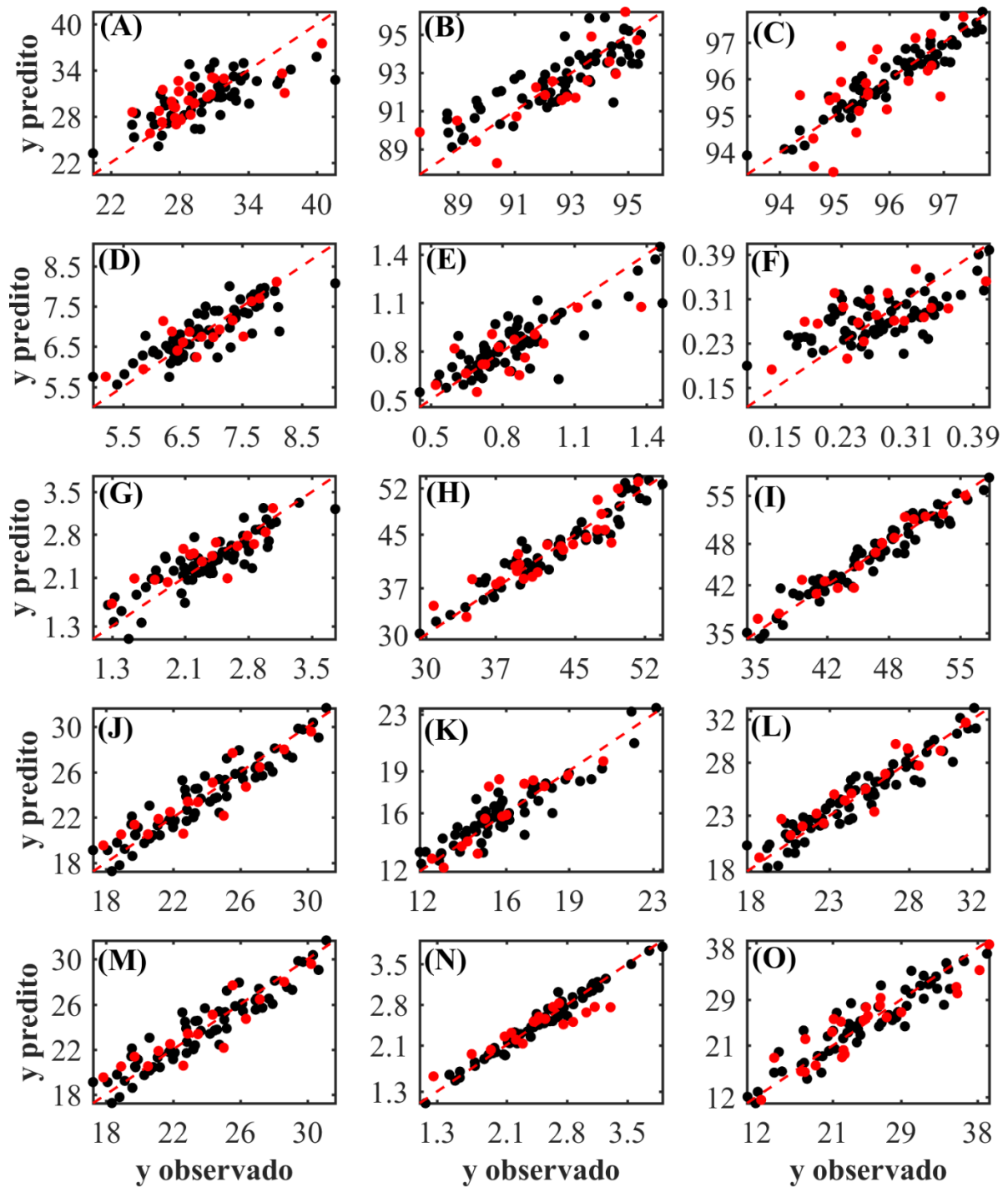


Figura 7 - Valores medidos por métodos laboratoriais convencionais versus preditos pelos modelos construídos para os teores de (A) matéria seca (MS), (B) matéria seca à 105°C (MS105), (C) matéria orgânica (MO), (D) proteína bruta (PB), (E) proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), (F) proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), (G) extrato etéreo (EE), (H) carboidratos não fibrosos (CNF), (I) fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), (J) FDN corrigida para cinzas e proteína (FDNcp), (K) FDN indigestível (FDNi), (L) fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), (M) FDA corrigida para cinzas e proteína (FDAcp), (N) lignina e (O) amido da silagem de milho.

Apesar de o modelo para prever o teor de MO não ter apresentado boa acurácia ($P < 0,05$), o mesmo apresentou baixo RMSEP e mediano RP, assim é indicado acrescentar mais amostras ao banco de dados, e assim aperfeiçoar o modelo.

De maneira geral, os modelos de regressão apresentaram boa capacidade de prever a composição da silagem de milho, e assim os mesmos podem vir a substituir análises morosas, dispendiosas e ecologicamente incorretas, por uma análise rápida, de baixo custo e que não exige gasto de reagentes.

Parâmetros de degradação ruminal da silagem de milho

Na Tabela 7 estão apresentados os dados estimados a partir das degradações obtidas em cada tempo de incubação realizadas em amostras de silagem de milho.

Tabela 6 - Análise descritiva dos valores dos parâmetros de degradação ruminal estimados a partir do ensaio de degradação in situ realizado amostras de silagem de milho.

Parâmetros ¹	Média	Mínimo	Máximo	Desvio padrão
Fração "a"				
MS	48,81	37,48	58,47	5,548
MO	48,11	36,32	58,22	5,823
PB	69,20	57,21	78,92	5,458
Fração "b/B"				
MS	39,63	33,91	48,59	3,936
MO	40,57	33,20	50,70	4,318
PB	23,49	14,63	33,51	4,505
FDN	62,08	49,13	74,60	7,325
Fração "I"				
FDN	33,27	23,57	42,27	5,704
Taxa "kd"				
MS	0,021	0,012	0,033	0,004
MO	0,021	0,012	0,033	0,005
PB	0,045	0,026	0,082	0,014
FDN	0,034	0,021	0,048	0,006

¹ "a" = solúvel, "b/B" = potencialmente degradável, "I" = indegradável, kd = taxa de degradação da fração "b/B" (h^{-1}), MS = matéria seca, MO = matéria orgânica, PB = proteína bruta, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro. Os valores de PB dos resíduos da incubação ruminal foram corrigidos pela contaminação microbiana, de acordo com as equações propostas por Machado et al. (2013), antes de calcular a degradação ruminal.

As informações sobre os parâmetros e o intervalo calibrados, o tamanho dos conjuntos de calibração e os pré-tratamentos realizados em cada conjunto de dados, são apresentadas na Tabela 8. Em todos os casos, os modelos construídos com pré-tratamentos dos espectros apresentaram menores RMSECV, indicando um melhor ajuste e precisão dos modelos que passaram por pré-tratamentos. Não foi possível construir modelos de predição para as frações “b” da MO e PB e para “kd” da MO.

Tabela 7. Informações sobre conjuntos de dados usados para construir e validar os modelos de predição dos parâmetros de degradação ruminal da silagem de milho.

Parâmetros ¹	Faixa	Tamanho Matriz	Pré-tratamentos ²
Fração "a"			
MS	37,5 - 58,5	22 × 256	Suav + 2Der
MO	36,3 - 58,2	21 × 256	Suav + 2Der
PB	57,2 - 78,9	22 × 256	1Der + Norm
Fração "b/B"			
MS	33,9 - 48,6	21 × 256	1Der + AE
FDN	49,1 - 74,6	21 × 256	Detrend + CM
Fração "I"			
FDN	23,6 - 42,3	21 × 256	AE + SNV
Taxa "kd"			
MS	0,01 - 0,03	21 × 256	1Der + CLB
PB	0,03 - 0,08	21 × 256	2Der + CM
FDN	0,02 - 0,05	21 × 256	2Der + CM

¹ “a” = solúvel, “b/B” = potencialmente degradável, “I” = indegradável, kd = taxa de degradação da fração “b/B” (h⁻¹), MS = matéria seca, MO = matéria orgânica, PB = proteína bruta, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro.

²Suav = suavização, 2Der = segunda derivada, 1Der = primeira derivada, Norm = normalização, Detrend = remoção de tendência, CM = centrar na média, AE = autoescalar, SNV = correção da variação normal padrão, CLB = correção da linha de base.

Seleção de variáveis

As regiões selecionadas pelos algoritmos OPS podem ser visualizadas na Figura 8. O número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, número de variáveis latentes selecionadas e os parâmetros estatísticos calculados para todos os modelos estão representados na Tabela 9.

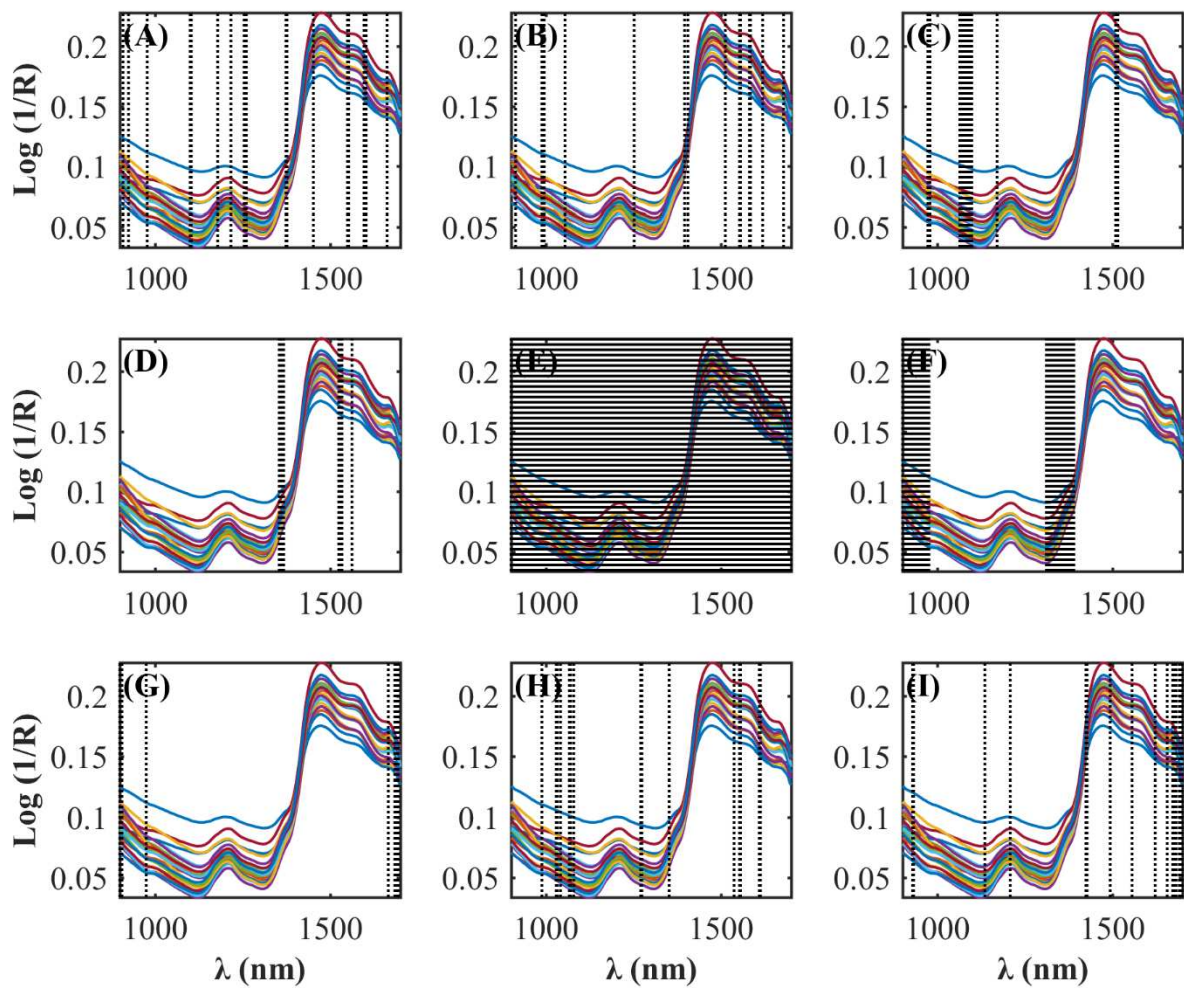


Figura 8 - Regiões do espectro das amostras de silagem de milho selecionadas pelos algoritmos OPS para construção dos modelos para predição da Fração solúvel “a” da (A) matéria seca (MS), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), Fração potencialmente degradável “b/B” da (D) MS (E) fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), (F) Fração indegradável “I” da FDN, Taxa de degradação “kd” a (G) MS, (H) PB e (I) FDN da silagem de milho.

Tabela 8. Resultados estatísticos para os modelos de predição dos parâmetros de degradação ruminal da silagem de milho.

Parâmetros ¹	Itens ²					
	nvars	nlv	RMSEC	RC	RMSECV	RCV
Fração "a"						
MS	19	8	0,559	0,995	1,468	0,964
MO	15	8	0,578	0,995	0,999	0,985
PB	15	7	1,538	0,958	3,237	0,802
Fração "b/B"						
MS	10	4	1,459	0,903	2,146	0,776
FDN	256	10	0,812	0,994	5,535	0,655
Fração "I"						
FDN	51	1	4,103	0,69	4,829	0,53
Taxa "kd"						
MS	8	6	0,001	0,959	0,002	0,915
PB	15	2	0,006	0,913	0,009	0,758
FDN	16	10	0,001	0,991	0,003	0,904

¹ "a" = solúvel, "b/B" = potencialmente degradável, "I" = indegradável, kd = taxa de degradação da fração "b/B" (h^{-1}), MS = matéria seca, MO = matéria orgânica, PB = proteína bruta, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro.

²nvars = número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, nlv = número de variáveis latentes, RMSEC = raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração, RC = coeficiente de correlação da calibração, RMSECV = raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada, RCV = coeficiente de correlação da validação cruzada, RMSEP = raiz quadrada do erro quadrático médio da predição, RP = coeficiente de correlação da predição;

Os modelos desenvolvidos apresentaram baixo RMSECV, sendo que desses, a fração "B" e "I" da FDN apresentaram RCV mediano, enquanto as demais apresentaram alto RCV. Assim pode se dizer que os modelos podem estimar adequadamente tais parâmetros de degradação.

Os gráficos com os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos são apresentados na Figura 9.

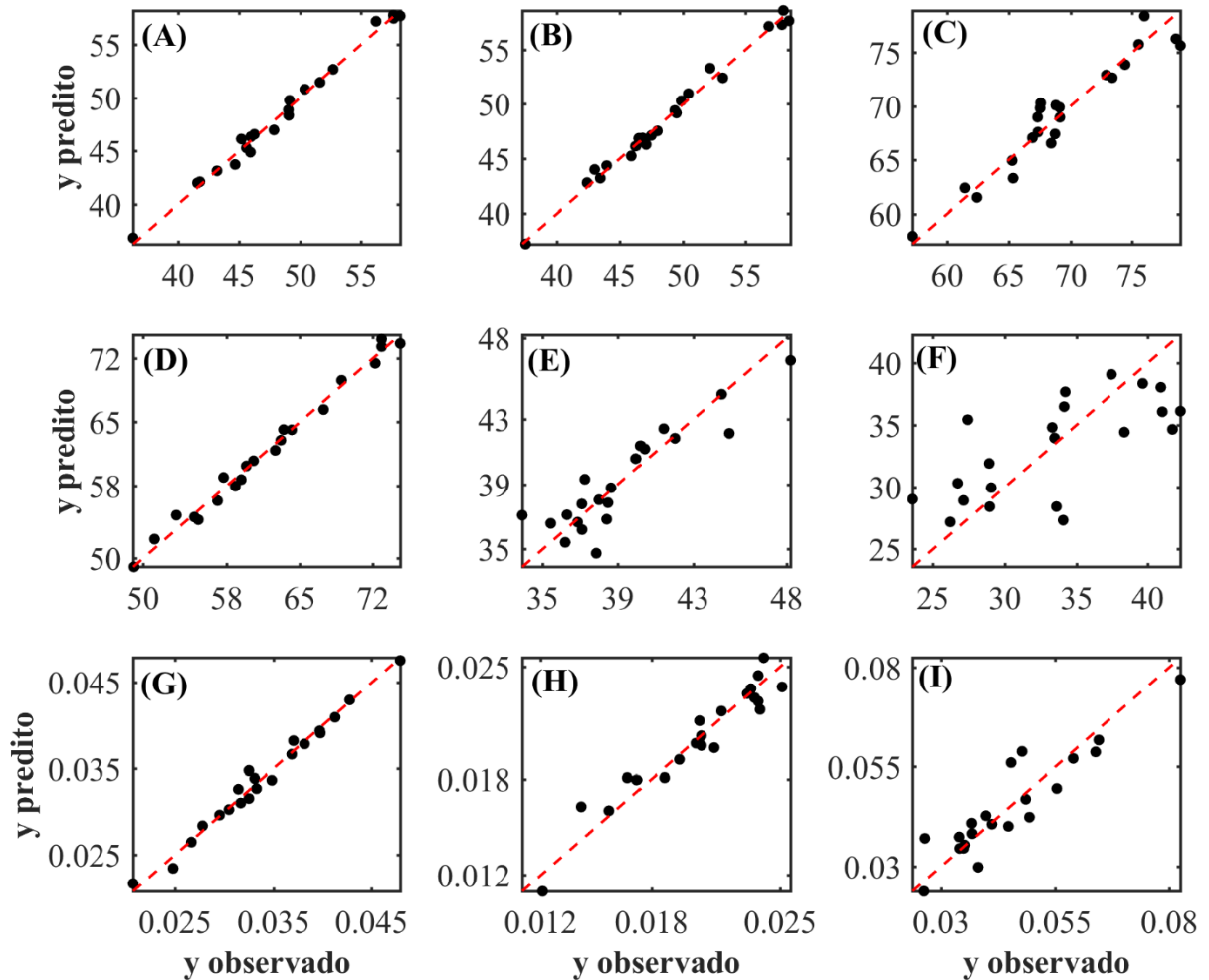


Figura 9 - Valores medidos por métodos laboratoriais convencionais versus preditos pelos modelos construído para Fração solúvel “a” da (A) matéria seca (MS), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), Fração potencialmente degradável “b/B” da (D) MS (E) fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), (F) Fração indegradável “I” da FDN, Taxa de degradação “kd” a (G) MS, (H) PB e (I) FDN da silagem de milho.

CONCLUSÃO

Os modelos de regressão desenvolvidos para predição da composição da silagem de milho estimam corretamente os teores de MS, MS105, PB, PIDA, PIDN, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, FDAcp, LIG, CNF e amido. Dessa forma, estes podem substituir os métodos laboratoriais convencionais.

Já os modelos de regressão desenvolvidos para prever os parâmetros da degradabilidade ruminal da silagem de milho, estimam corretamente as frações solúveis (a) da MS, MO e PB, as frações potencialmente degradáveis (b) da MS e (B) da FDN, a fração indegradável (I) da FDN, e as taxas de degradação (kd) da MS, PB e FDN.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CASALI, A.O.; DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S.C. et al. Influência do tempo de incubação e do tamanho de partículas sobre os teores de compostos indigestíveis em alimentos e fezes bovinas obtidos por procedimentos in situ. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v.37, p.335-342, 2008.
- DETMANN, E., SOUZA, M.A., VALADARES FILHO, S.C. Métodos para análise de alimentos. Visconde do Rio Branco: Universidade Federal de Viçosa, 2012. 214p.
- DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S.C. On the estimation of non-fibrous carbohydrates in feeds and diets. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v.62, p.980-984, 2010.
- ELLIS, W. C.; MATIS, J.H.; HILL, T. M.; MURPHY, M. R. Methodology for estimating digestion and passage kinetics of foragens. In: FAHEY J.R., G.C. (Ed.) **Forage quality, evaluation and utilization**. Madison: American Society of Agronomy, p. 450-493, 1994.
- JUNIOR, M. C., Jobim, C. C., Osmari, M. P. & Tres, T. T. Nutritional additives in high moisture corn silage. **Revista Brasileira de Ciências Agrárias**, 12, 105-111, 2017.
- KENNARD, R. W. & STONE, L. A. Computer Aided Design of Experiments, **Technometrics**, 11:1, 137-148, 1969.
- KOBAYASHI, Kazuhiko & SALAM, Moin. Comparing Simulated and Measured Values Using Mean Squared Deviation and Its Components. **Agronomy Journal**. 92. 345-352, 2000.
- MOREIRA, F. S., Oliveira, M. M. N. F., Villela, S. D. J., Barbosa, F. A., Mourthe, M. H. F. & Diniz, D. B. Desempenho produtivo e econômico de três grupos genéticos de bovinos recriados a pasto com suplementação e terminados em confinamento. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, 67, 140-148, 2015.
- OLIVEIRA, F. C.; SOUZA, A. T. P. C.; DIAS, J. A.; DIAS, S. C. L.; RUBIM, J. C. A escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos, **Química Nova**, (27), 218-225, 2004.
- ORSKOV, E.R.; McDONALD, I.; The estimation of protein degradability in the rumen from incubation measurements weighted according to rate of passage. **Journal of Agricultural Science**, v.92, p.499-503, 1979.
- PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal of the Brazilian chemical society**, v. 14, n. 2, p. 198-219, 2003.

- PINTO, A. C. J., AND MILLEN, D. D. Nutritional recommendations and management practices adopted by feedlot cattle nutritionists: the 2016 brazilian survey. **Canadian Journal of Animal Science**. 2018.
- PETIT, H.V.; RIOUX, R.; TREMBLAY G.T. Evaluation of forages and concentrates by the in situ degradability technique. In: **Reunião anual da sociedade brasileira de zootecnia**, 31., 1994, Maringá, PR Anais... Maringá: Sociedade Brasileira de Zootecnia, p.119-133, 1994.
- ROQUE, J.V., CARDOSO, W., PETERNELLI, L.A., TEÓFILO, R.T. Comprehensive new approaches for variable selection using ordered predictors selection. **Anal. Chim. Acta** 1075, 57–70, 2019.
- SATTER, L. D.; REIS, R. B. 2012. Milk production under confinement conditions. Disponível em http://www.ars.usda.gov/research/publications/publications.htm?seq_no_115=84465 Acesso: junho, 2018. Acesso: junho, 2018.
- SILVA, B. C.; GODOI, L. A.; VALADARES FILHO, S. C.; ZANETTI, D.; BENEDETI, P. D. B., & DETMANN, E.. A suitable enzymatic method for starch quantification in different organic matrices. **MethodsX**. 2019
- SILVA, D. P., PEDROSO, A. M., PEREIRA, M. C. S., BERTOLDI, G. P., WATANABE, D. H. M., MELO, A. C. B., MILLEM, D. D. Survey of management practices used by brazilian dairy farmers and recommendations provided by 43 dairy cattle nutritionists. **Canadian Journal of Animal Science**. 2019.
- TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of mathematical models. **Agricultural Systems**, v.89, p.225-247, 2006.
- THOMSON, A. L.; HUMPHRIES, D. J.; RYMER, C. et al. Assessing the accuracy of current near infra-red reflectance spectroscopy analysis for fresh grass-clover mixture silages and development of new equations for this purpose. **Animal Feed Science and Technology**, v.239, p.94-106, 2018.
- VAN MILGEN, J.; MURPHY, L. L.; BERGER, L. L. A compartmental model to analyze ruminal digestion. **Journal of Dairy Science**, v.74, p.2515-2529,1991.

CAPÍTULO 2

Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para prever a composição de amostras de fezes e digesta omasal de bovinos.

RESUMO – Os objetivos do presente estudo foi desenvolver e validar modelos de regressão para a predição dos teores de matéria seca a 105°C (MS105), matéria orgânica (MO), proteína bruta (PB), extrato etéreo (EE), fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína (FDN_{cp}), fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDN_i) e carboidratos não fibrosos (CNF) em amostras de fezes e fase sólida de digesta omasal de bovinos por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR). Também foi objetivo desse estudo desenvolver e validar modelos de regressão para a predição dos teores de MS105, MO, PB e EE em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos a partir de espectros NIR. Foram utilizadas 498 amostras de fezes de bovinos, 60 amostras de fase sólida e 74 amostras de fase líquida de digesta omasal de bovinos para desenvolver e validar os modelos. Determinou-se os teores das propriedades avaliadas através de métodos convencionais de análise de alimentos em todas as amostras utilizadas no estudo. Todas as amostras previamente secas e moídas foram então alocadas em placas de Petri e os espectros NIR foram obtidos. Os modelos foram construídos usando a regressão por quadrados mínimos parciais (PLS), e o método de seleção de variáveis dos preditores ordenados (OPS) foi empregado. Os modelos de regressão obtidos para prever a composição das amostras de fezes de bovinos estimaram adequadamente as propriedades avaliadas, com exceção do modelo para predição de CNF. Já os modelos obtidos para prever a composição das amostras de fase sólida da digesta omasal de bovinos estimaram adequadamente as propriedades avaliadas, com exceção do modelo para predição da PB. Para os modelos de regressão para estimar a composição da fase líquida da digesta omasal, apenas o modelo para predição de EE estimou adequadamente. Assim, conclui-se que os modelos de regressão desenvolvidos podem substituir os métodos convencionais de análise para estimar os teores de MS105, MO, PB, EE, FDN_{cp} e FDN_i em amostras de fezes de bovinos, assim como os teores MS105, MO, EE, FDN_{cp}, FDN_i e CNF na fase sólida e EE na fase líquida da digesta omasal.

CHAPTER 2

Development and validation of regression models from NIR spectra to predict the composition of cattle feces and omasal digesta

Abstract - The aim of this study was to develop and validate regression models to predict dry matter (DM) at 105°C, organic matter (OM), crude protein (CP), ether extract (EE), NDF corrected for ash and protein (NDFap), indigestible NDF (iNDF), non-fibrous carbohydrates (NFC) of cattle feces, and solid phase of omasal digesta by Near-infrared spectroscopy (NIR). It also aimed to develop and validate regression models to predict DM, OM, CP, and EE of the liquid phase of omasal digesta from NIR spectra. To develop and validate the regression models, 498 samples of bovine feces, 60 samples of the solid phase, and 74 samples of the liquid phase of omasal digesta were used, and their composition were determined by conventional methods of analysis. All previously dried and ground samples were then placed in Petri dishes, where the NIR spectra were obtained. The models were developed using the regression by partial least squares (PLS), and the method of ordered predictors selection (OPS) was used. The regression models obtained to predict the composition of cattle feces, except the model for NFC, adequately estimated the properties evaluated. The models to predict the composition of the solid phase of omasal digesta have adequately estimated the properties evaluated, except for the model to predict CP. For the liquid phase of the omasal digesta, only the regression model for EE estimated adequately. Thus it is concluded that the regression models developed can replace the conventional methods of analysis to estimate the contents of DM at 105°C, OM, CP, EE, NDFap, and iFDN in cattle feces, as well as the levels DM at 105°C, OM, EE, NDFap, iNDF and NFC in the solid phase and EE in the liquid phase of the omasal digesta.

INTRODUÇÃO

A avaliação nutricional dos alimentos é imprescindível para a pesquisa na área de nutrição de ruminantes. A digestibilidade é reconhecidamente um dos primeiros parâmetros do valor nutritivo dos alimentos. Tal importância se deve ao fato de que dietas diferentes podem possuir composições químicas semelhantes e apresentarem diferenças no desempenho dos animais, devido às diferenças na digestibilidade e /ou nos locais de digestão das mesmas.

A estimação de parâmetros de digestibilidade dietética tem como ponto inicial a obtenção da porção ingerida não aproveitada durante a passagem pelo trato gastrointestinal (Detmann et al., 2004), naturalmente representada pelas fezes excretadas pelo animal. Dessa forma, para se estimar a digestibilidade total dos nutrientes é necessário a quantificação dos mesmos nas fezes dos animais.

Além da digestibilidade total, estudos de digestão parcial dos nutrientes das dietas são importantes por permitirem quantificar a utilização dos nutrientes nos diferentes compartimentos do trato gastrointestinal, facilitando a avaliação das diferenças existentes entre alimentos (Valadares Filho, 1985), tornando assim mais eficiente a utilização dos nutrientes pelos animais, melhorando, conseqüentemente, o desempenho animal. Uma forma de se estimar a digestibilidade parcial dos nutrientes é através da quantificação desses em amostras obtidas em coletas de digesta omasal.

No entanto, análises laboratoriais em amostras de digesta e fezes obtidas em experimentos de nutrição animal são custosas, e laboriosas para pesquisa. Isso se deve ao grande número de amostras que são normalmente coletadas nesses experimentos e conseqüentemente, o grande volume de reagentes químicos e tempo dispendido pelo pesquisador para analisar as mesmas. Assim, é importante que métodos alternativos rápidos, acurados e robustos estejam disponíveis para estimar a digestibilidade de alimentos e dietas.

Nesse contexto, análises por espectroscopia de infravermelho próximo (Near Infrared Reflectance Spectroscopy; NIRS) associadas às técnicas quimiométricas podem vir a serem utilizadas para prever a composição de amostras de fezes. A aplicação dos mesmos permite a análise múltipla dos constituintes dos alimentos, com rapidez e menores custos e mão-de-obra. Outra vantagem da utilização da espectroscopia NIR e de técnicas quimiométricas, do ponto de vista ambiental, é que esse sistema possui características não destrutivas, além de ser um método não poluente, por não utilizar reagentes químicos.

Para a utilização da espectroscopia NIR é necessário que se tenha modelos de predição acurados para alcançar resultados adequados. Contudo, existem poucos estudos e modelos

disponíveis para a predição da composição de amostras fecais e de digesta de bovinos por espectrofotometria NIR, permitindo assim o uso da tecnologia na avaliação nutricional de dietas.

Dessa forma, assume-se como hipótese que modelos de regressão podem prever corretamente a composição de amostras de fezes e digesta omasal de bovinos a partir de espectros NIR. Assim, objetivou-se nesse trabalho desenvolver e validar modelos de regressão para a predição dos teores de matéria seca em estufa a 105°C (MS105), matéria orgânica (MO), proteína bruta (PB), extrato etéreo (EE), carboidratos não fibrosos (CNF), fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína (FDN_{cp}) e fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDN_i) em amostras de fezes e fase sólida da digesta omasal de bovinos e também os teores de MS105, MO, PB e EE em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos por espectrofotometria NIR.

MATERIAL E MÉTODOS

As análises laboratoriais foram realizadas no Laboratório de Nutrição de Ruminantes (Labnur) do Departamento de Zootecnia (DZO) da Universidade Federal de Viçosa (UFV), Viçosa, Minas Gerais.

Origem das amostras

Foram utilizadas 498 amostras de fezes, 74 amostras de fase líquida e 60 amostras de fase sólida de digesta omasal provenientes de 8 experimentos de digestibilidade (Tabela 1), realizados no Confinamento Experimental do Labnur – DZO - UFV, Viçosa, Minas Gerais. Durante os experimentos, as amostras de fezes foram secas parcialmente em estufa com ventilação forçada (55°C) por 72 horas, enquanto as amostras de digesta omasal foram liofilizadas e então armazenadas.

Composição das Amostras

Para obtenção da composição das amostras de fezes e fase sólida de digesta omasal, as mesmas foram moídas em moinhos de faca dotados de peneiras com crivos de diâmetro de 2 e 1 mm e então analisadas quanto aos teores MS105 segundo método INCT - CA G-003/1, MO segundo método INCT– CA M-001/1, PB segundo método INCT - CA N-001/1, EE segundo método INCT – CA G-004/1, FDN_{cp} segundo método INCT - CA F-001/1, FDN_i segundo método F-008/1, descritos em Detmann et al. (2012). O CNF foi calculado conforme Detmann e Valadares Filho (2010). Para obtenção da composição das amostras de fase líquida da digesta

omasal, as mesmas foram maceradas e então analisadas quanto aos teores de MS105, MO, PB e EE, conforme os mesmos métodos utilizados para as amostras de fezes e de fase sólida de digesta omasal.

Tabela 1 – Número de amostras, relação volumoso:concentrado (V:C) e referências bibliográficas dos estudos que originaram as amostras de digesta omasal e fezes de bovinos.

Tese ou dissertação	Relação V:C (%)	Número de amostras		
		Digesta Omasal		Fezes
		Fase líquida	Fase sólida	
ALHADAS, Herlon Meneguelli (2018)	0:100			
	5:95			
	15:85	24	21	24
	25:75			
GODOI, Letícia Artuzo (2017)	40:60	-	13	40
	58:42			
MENEZES, Ana Clara Baião (2019)	50:50	25	2	169
PACHECO, Marcos Vinícius Carneiro (2018)	28:72		84	84
SILVA, Breno de Castro (2018)	28:72	25	24	25
SILVA, Flávia Adriane de Sales (2015)	70:30	-	-	47
	50:50			
SILVA, Flávia Adriane de Sales (2019)	40:60	-	-	55
ZANETTI, Diego (2017)	40:60	-	-	54
	58:42			
Total de amostras		74	60	498

Análise espectrofotométrica

Foi realizada a leitura de todas as amostras de fezes, fase sólida e líquida de digesta omasal, para obtenção dos espectros das mesmas, com um espectrofotômetro NIR portátil (ITPhotonics S.r.l., modelo poliSPEC^{NIR} 900-1700, Breganze, Itália) com auxílio do software poliDATA (ITPhotonics S.r.l, Breganze, Itália).

As amostras previamente moídas a 1 mm foram homogêneas e três sub-amostras foram acondicionadas em placas de Petri (dimensão 60x15mm) e então foi feita a coleta dos espectros. Os espectros foram registrados como $\log(1/R)$, onde R é a refletância da amostra, na faixa de 902 e 1680 nm, medidos em intervalos de 2 nm. Assim, três espectros por amostra foram tomados, sendo que se utilizou a média para posteriores análises dos dados.

Construção dos modelos de regressão

Os arquivos contendo os espectros de infravermelho das amostras de fezes, fase líquida e sólida de digesta omasal avaliadas foram exportados do software poliDATA, importados para o software SensorLogic GmbH (Software + Sensor Systeme, Norderstedt, Alemanha) onde foram organizados e exportados em extensão xls, a qual foi importada pelo software Matlab 2019b (Math Works, Natick, USA). Para cada conjunto de amostras (fezes, fase líquida e sólida de digesta omasal), uma matriz de dados com todos os espectros foi construída e denominada matriz \mathbf{X} , que representam as variáveis independentes. As linhas da matriz \mathbf{X} correspondem às amostras e as colunas correspondem às variáveis (comprimento de onda). Para as amostras de fezes e fase sólida de digesta omasal sete propriedades (MS105, MO, PB, EE, FDNcp, FDNi, e CNF) foram denominadas como vetores \mathbf{y} , enquanto as amostras de fase líquida de digesta omasal teve quatro propriedades (MS105, MO, PB e EE) determinadas como vetores \mathbf{y} , sendo estas as variáveis dependentes. Os vetores \mathbf{y} possuem um número de linhas igual ao número de amostras das matrizes \mathbf{X} . Os esquemas das matrizes \mathbf{X} e os vetores \mathbf{y} composição das amostras de fezes e fase sólida da digesta omasal e das amostras de fase líquida podem ser visualizados nas Figuras 1 e 2 respectivamente.

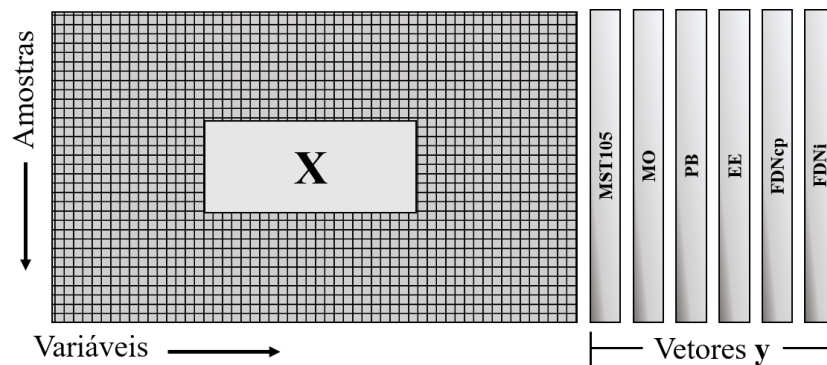


Figura 1 - Esquema com a matriz \mathbf{X} contendo o conjunto de espectros das amostras fezes e fase sólida de digesta omasal de bovinos e os vetores \mathbf{y} com os respectivos valores de cada propriedade obtidos através dos métodos convencionais de análises.

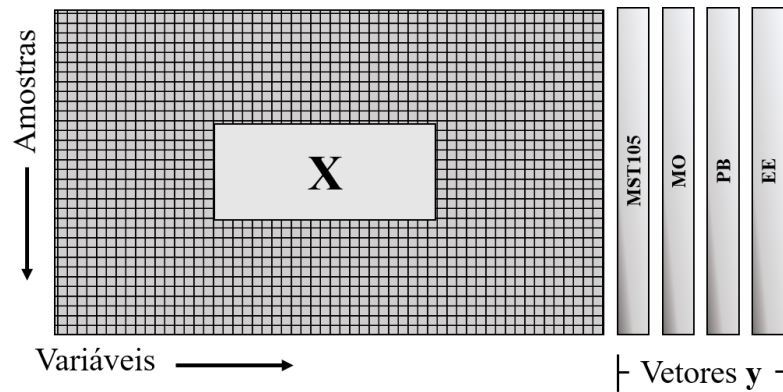


Figura 2 - Figura 1 - Esquema com a matriz \mathbf{X} contendo o conjunto de espectros das amostras fase líquida de digesta omasal de bovinos e os vetores \mathbf{y} com os respectivos valores de cada propriedade obtidos através dos métodos convencionais de análises.

Para construção dos modelos de regressão foi utilizada a regressão por Quadrados Mínimos Parciais (PLS), utilizando variáveis selecionadas através de três abordagens do método Seleção de Preditores Ordenados (OPS), sendo eles OPS automático (autoOPS), OPS por feedback (feedOPS), OPS por intervalos (iOPS) (Roque et al., 2019). As três abordagens do OPS foram testadas para todos os conjuntos de dados usando todos os vetores informativos.

Foi realizada a remoção de outliers e após isso os conjuntos de dados foram divididos em conjunto de calibração e validação usando o algoritmo de Kennard-Stone (Kennard & Stone, 1969). A variável \mathbf{y} foi centrada na média para todas as propriedades e diferentes pré-tratamentos e combinações de dois ou três dos mesmos foram estudadas para cada matriz completa \mathbf{X} . Os pré-tratamentos testados foram centrar na média, autoescalar, suavização, primeira e segunda derivadas, correção do espalhamento multiplicativa (MSC), normalização, correção da linha de base, correção da variação normal padrão (SNV) e remoção de tendência. As combinações de dois, três e quatro pré-tratamentos também foram estudadas. Os pré-tratamentos que apresentaram um modelo com o menor valor da raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada (RMSECV) foram escolhidos para cada conjunto de dados.

Para a construção dos modelos utilizou-se o conjunto de calibração. Os algoritmos OPS (autoOPS, feedOPS, iOPS) foram aplicados usando a janela de 10 e incrementos de 5 variáveis, sendo que após todas as variáveis serem estudadas, aplicou-se a validação cruzada randômica, onde as divisões foram definidas em 10% das linhas da matriz \mathbf{X} . No feedOPS, como critério de convergência, utilizou-se 2% como a diferença mínima entre dois RMSECVs consecutivos e dez como o número máximo de loops. No iOPS, quando se utilizou a opção de

executar a seleção usando o feedOPS, os critérios de convergência foram os mesmos que os utilizados no feedOPS. A matriz \mathbf{X} completa foi dividida em intervalos de 10% do seu tamanho, limitados em pelo menos cinquenta variáveis. Além disso, o número de variáveis latentes para seleção de preditores ordenados (hOPS) foi calculado para cada intervalo no iOPS.

Uma vez construído cada um dos modelos usou-se, o conjunto de predição de cada constituinte para verificar a capacidade preditiva dos modelos e assim validar os mesmos. Os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos foram comparados. Os valores da raiz quadrada do erro quadrático médio da predição (RMSEP), do coeficiente de correlação dos valores medidos e preditos pelo modelo (R_p), bem como os valores dos erros relativos das amostras foram usados como parâmetro para verificar a capacidade de predição do modelo construído. Os dados referentes aos valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos para cada uma das variáveis dependentes foram exportados para o software Model Evaluation System (MES; Tedeschi 2006), onde foram comparados usando o seguinte modelo de regressão: $y = \beta_0 + \beta_1 \times x$, em que x = valores previstos; y = valores observados; β_0 e β_1 = intercepto e inclinação, respectivamente.

A regressão foi avaliada de acordo com um teste de hipótese simultânea (Mayer et al., 1994), onde: $H_0: \beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$ e $H_a: \text{não } H_0$. Se a hipótese nula não for rejeitada, pode-se concluir que os modelos estimam com precisão a composição de amostras de fezes.

As estimativas também foram avaliadas usando o quadrado médio do erro de predição (MSEP) e seus componentes (Kobayashi e Salam, 2000): $MSEP = SB + MaF + MoF = 1/n \sum_{i=1} (x_i - y_i)^2$; $SB = (x_i - y_i)^2$; $MaF = (s_x - s_y)^2$; $MoF = 2s_x s_y (1 - r)$; em que x = valores previstos; y = valores observados; MSEP = quadrado médio do erro de predição; SB = quadrado do viés; MoF = componente relativo ao modelo de flutuação aleatória; MaF = componente relativo à magnitude da flutuação aleatória; s_x e s_y = desvios padrão dos valores previstos e observados, respectivamente, e r = correlação linear de Pearson entre os valores previstos e observados.

Para todos os cálculos de variância e covariância, o número total de observações foi usado como um divisor por se tratar de avaliação de erro de predição (Kobayashi e Salam, 2000).

A eficiência de predição foi determinada pela estimativa do coeficiente de correlação e concordância (CCC) ou índice de reprodutibilidade descrito por Tedeschi (2006).

Para comparações, o nível de 0,05 foi estabelecido como o nível crítico de probabilidade para erro do tipo I.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Amostras de fezes de bovinos

Na Tabela 1 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizados em amostras fezes de bovinos, o tamanho dos conjuntos de calibração e validação e os pré-tratamentos realizados em cada conjunto de dados. Em todos os casos, os modelos construídos com pré-tratamentos dos espectros apresentaram menores RMSECV, indicando um melhor ajuste e precisão dos modelos que passaram por pré-tratamentos.

Os espectros NIR das amostras ($N = 498$) de fezes utilizadas são apresentados na Figura 3.

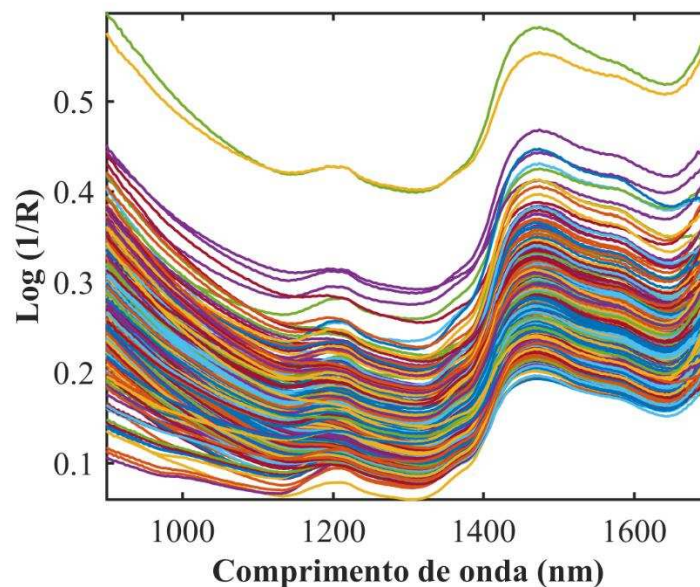


Figura 3 - Espectros NIR de amostra de fezes de bovinos

Tabela 2 - Análise descritiva dos valores (% da matéria seca) obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais das amostras de fezes de bovinos e informações sobre conjuntos de dados usados para construir e validar os modelos de predição.

Propriedades ¹	Média	Mínimo	Máximo	Desvio Padrão	Tamanho Matriz		Pré-tratamentos ²
					Calibração	Predição	
MS105	90,98	87,37	94,84	1,050	293 × 256	125 × 256	Suav + 2Der
MO	88,14	76,26	99,38	3,727	323 × 256	138 × 256	Norm
PB	13,85	6,57	23,25	1,896	332 × 256	142 × 256	2Der + MSC
EE	2,47	1,51	8,17	0,913	346 × 256	149 × 256	1Der + MSC
CNF	28,36	8,06	69,50	10,633	327 × 256	140 × 256	Norm + Suav
FDNcp	43,33	14,61	72,18	10,019	333 × 256	143 × 256	SNV + 2Der
FDNi	29,92	7,27	52,53	10,524	294 × 256	126 × 256	Norm

¹MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, PB = proteína bruta, EE = extrato etéreo, CNF = carboidratos não fibrosos, FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível.

²Suav = suavização, 2Der = segunda derivada, Norm = normalização, 1Der = primeira derivada, MSC = correção do espalhamento multiplicativa, SNV = correção da variação normal padrão.

Seleção de variáveis

A escolha adequada de variáveis na matriz de dados \mathbf{X} pode melhorar significativamente a capacidade de predição do modelo de regressão. Desta forma, a seleção de variáveis envolve a escolha de determinadas regiões do espectro (um conjunto de comprimentos de onda), que minimizam o erro na predição. Como consequência, têm-se a construção de modelos mais robustos, simples de interpretar e com melhor exatidão (Oliveira et al., 2004).

Na construção dos modelos, utilizaram-se previamente os algoritmos autoOPS, feedOPS, iOPS. Dessa forma, foi possível a seleção de regiões do espectro que apresentam informações relevantes e que melhor estão correlacionadas com as propriedades avaliadas em amostras de fezes de bovinos, tais regiões podem ser visualizadas na Figura 4.

O número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, número de variáveis latentes selecionadas e os parâmetros estatísticos calculados para todos os modelos estão representados na Tabela 3.

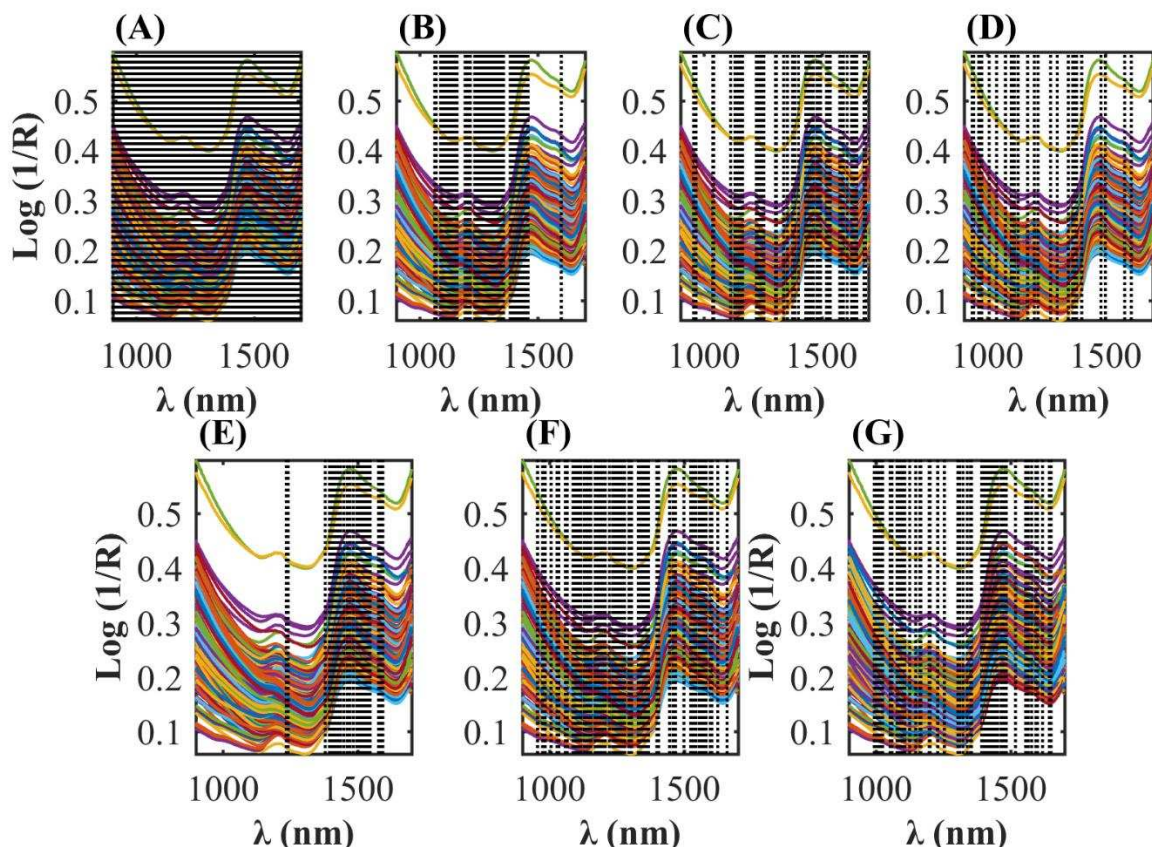


Figura 4 - Regiões do espectro das amostras de fezes selecionadas pelos algoritmos OPS para construção dos modelos para predição dos teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi), em amostras de fezes de bovinos.

Tabela 3 - Resultados estatísticos para os modelos de predição da composição de fezes de bovinos.

Modelos ²	Itens ¹							
	nvars	nlv	RMSEC	RC	RMSECV	RCV	RMSEP	RP
MS105	256	10	0,533	0,73	0,624	0,61	1,049	0,47
MO	88	10	1,045	0,94	1,186	0,92	1,274	0,95
EE	25	10	0,422	0,70	0,453	0,64	0,604	0,87
PB	46	10	0,77	0,85	0,853	0,81	0,924	0,89
CNF	33	10	2,948	0,93	3,17	0,92	4,028	0,96
FDNcp	66	10	2,339	0,96	2,89	0,94	2,828	0,96
FDNi	52	10	3,105	0,94	3,472	0,93	3,977	0,93

¹nvars = número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, nlv = número de variáveis latentes, RMSEC = raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração, RC = coeficiente de correlação da calibração, RMSECV = raiz quadrada do erro quadrático médio

²MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, EE = extrato etéreo, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível.

Todos os modelos apresentaram baixo RMSEP sendo que apenas o modelo MS105 apresentou um mediano RP e os demais apresentaram alto RP. Dessa forma, pode se afirmar que os modelos apresentam boa capacidade de predição. Os gráficos com os erros relativos da predição para cada modelo podem ser visualizados na Figura 5.

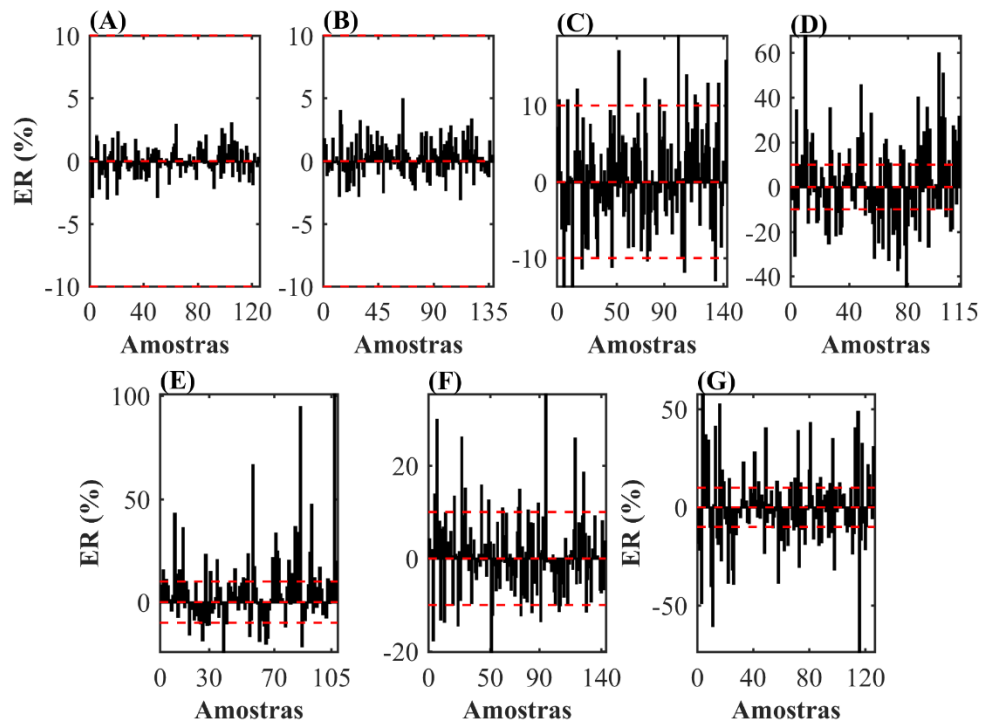


Figura 5 – Erros relativos da predição para os modelos construídos para os teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi) em amostras de fezes de bovinos.

Os resultados da avaliação da validação externa para cada constituinte analisado encontram-se nas Tabelas 4 e 5.

Os modelos construídos, estimaram com acurácia os teores de MS105, MO, PB, EE, FDNcp e FDNi ($P > 0,05$). Porém o modelo construído para estimar CNF produziu estimativas não condizentes ao observado para tal propriedade ($P < 0,05$). Ao visualizar o CCC, pode-se concluir que os modelos construídos para MO, PB, EE, FDNc, FDNi e CNF estimaram com precisão e exatidão ($CCC > 0,70$), enquanto o modelo para estimar a propriedade MS105 apresentou baixa precisão.

Para todos os modelos que estimaram com acurácia as propriedades estudadas ($P > 0,05$) verificou-se que mais de 90% do MSEP foram associados à erros aleatórios (Mof). Todavia, o modelo para predizer o teor de CNF, apesar de não ter sido acurado ($P < 0,05$) apresentou 96,88% do MSEP foram associados à erros aleatórios (Mof).

Todas as análises laboratoriais possuem certo nível aceitável de erro, isso se deve a diferentes equipamentos, reagentes e laboratoristas na realização das mesmas. Assim, os teores

de CNF que representam o componente químico obtido por diferença acabam por absorver todos os erros provenientes das análises dos outros componentes. Tal fato pode explicar a inexatidão apresentada pelo modelo construído neste estudo.

Os modelos de regressão apresentaram boa capacidade de prever a composição de amostras de fezes de bovinos, e assim os mesmos podem vir a substituir análises morosas, dispendiosas e ecologicamente incorretas, por uma análise rápida, de baixo custo e que não exige gasto de reagentes.

Os gráficos com os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos são apresentados na Figura 6.

Tabela 4 - Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de MS105, MO e PB das fezes.

Item	MS105 ⁸		MO ⁹		PB ¹⁰	
	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³
Média	90,8	90,8	88,7	89,0	14,1	14,2
Desvio padrão	1,17	0,77	3,87	3,63	2,03	1,92
Máximo	94,7	92,5	97,5	98,5	23,2	24,3
Mínimo	87,4	88,2	79,2	79,5	9,7	10,7
R ¹	-	0,213	-	0,894	-	0,794
CCC ²	-	0,429	-	0,942	-	0,890
Regressão						
Intercepto						
Estimativa	-	25,76	-	-0,97	-	0,80
Erro-padrão	-	11,049	-	2,647	-	0,577
Inclinação						
Estimativa	-	0,72	-	1,01	-	0,94
Erro-padrão	-	0,122	-	0,030	-	0,040
P-valor ³	-	0,070	-	0,116	-	0,258
MSEP ⁴	-	1,112	-	1,624	-	0,853
SB ⁵	-	<0,001	-	0,050	-	0,003
Mat ⁶	-	0,047	-	0,001	-	0,013
Mof ⁷	-	1,064	-	1,573	-	0,837

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Matéria seca à 105°C, ⁹Matéria orgânica, ¹⁰Proteína bruta, ¹¹Medido por método laboratorial convencional, ¹²Predito pelo modelo construído.

Tabela 5 - Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de EE, CNF, FDNcp e FDNi de amostras de fezes.

Item	EE ⁸		CNF ⁹		FDNcp ¹⁰		FDNi ¹¹	
	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³
Média	2,7	2,7	29,6	30,8	40,1	40,2	25,1	24,7
Desvio padrão	1,23	1,03	12,90	13,03	10,59	10,58	10,94	10,87
Máximo	8,2	6,8	69,5	74,4	69,0	69,6	47,3	47,7
Mínimo	1,5	1,6	9,2	11,6	14,6	17,6	8,5	3,4
R ¹	-	0,759	-	0,912	-	0,929	-	0,870
CCC ²	-	0,858	-	0,952	-	0,964	-	0,933
Regressão								
Intercepto								
Estimativa	-	-0,07	-	0,48	-	1,30	-	1,86
Erro-padrão	-	0,157	-	0,946	-	0,930	-	0,874
Inclinação								
Estimativa	-	1,05	-	0,95	-	0,96	-	0,94
Erro-padrão	-	0,055	-	0,028	-	0,022	-	0,032
P-valor ³	-	0,469	-	0,001	-	0,263	-	0,106
MSEP ⁴	-	0,365	-	16,225	-	7,998	-	15,819
SB ⁵	-	0,003	-	1,423	-	0,013	-	0,131
Maf ⁶	-	0,002	-	0,494	-	0,137	-	0,432
Mof ⁷	-	0,360	-	14,307	-	7,848	-	15,256

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Extrato etéreo, ⁹Carboidratos não fibrosos, ¹⁰Fibra insolúvel em detergente neutro, ¹¹Fibra insolúvel em detergente neutro indigestível, ¹²Medido por método laboratorial convencional, ¹³Predito pelo modelo construído.

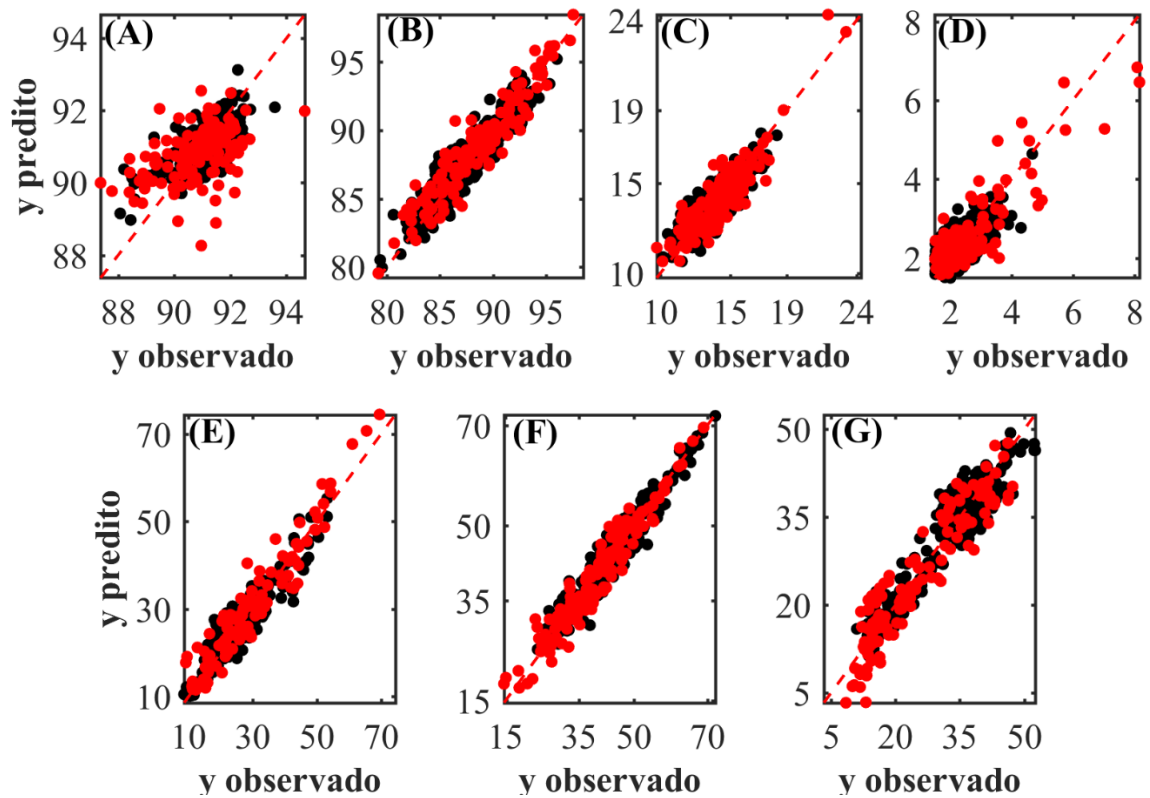


Figura 6 – Valores medidos por métodos laboratoriais convencionais versus preditos pelos modelos construídos para os teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi), em amostras de fezes de bovinos.

Fase sólida da digesta omasal

Na Tabela 6 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizados em amostras de fase sólida da digesta omasal de bovinos e as informações sobre as propriedades e o intervalo calibrados, o tamanho dos conjuntos de calibração e validação e os pré-tratamentos realizados em cada conjunto de dados.

Tabela 6 - Análise descritiva dos valores (%) obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizadas em amostras de fase sólida da digesta omasal de bovinos.

Propriedades ¹	Média	Mínimo	Máximo	DP ²	Tamanho Matriz		Pré-tratamentos ³
					Calibração	Predição	
MS105	90,66	89,23	93,11	1,046	40 × 256	17 × 256	AE + 2Der
MO	94,73	85,99	98,08	2,023	41 × 256	18 × 256	1Der + MSC
PB	12,57	9,86	16,05	1,658	41 × 256	17 × 256	Detrend + Suav
EE	2,99	1,31	5,25	1,114	40 × 256	17 × 256	Detrend + Suav
CNF	35,90	18,02	69,06	12,532	41 × 256	17 × 256	2Der
FDNcp	43,25	13,11	61,62	11,299	41 × 256	17 × 256	Detrend + Suav
FDNi	23,86	4,17	48,55	8,946	40 × 256	17 × 256	Suav + 2Der

¹MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, PB = proteína bruta, EE = extrato etéreo, CNF = carboidratos não fibrosos, FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível.

²Desvio Padrão

³AE = autoescalar, 2Der = segunda derivada, MSC = correção do espalhamento multiplicativa, Suav = suavização, Detrend = remoção de tendência

Em todos os casos, os modelos construídos com pré-tratamentos dos espectros apresentaram menores RMSECV, indicando um melhor ajuste e precisão dos modelos que passaram por pré-tratamentos.

Os espectros NIR das amostras (N = 60) fase sólida de digesta omasal utilizadas são apresentados na Figura 7.

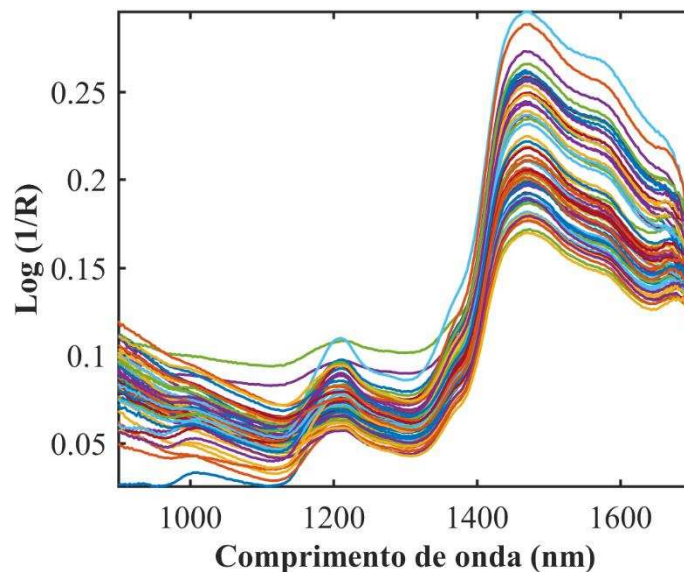


Figura 7 – Espectros NIR de amostras de fase sólida de digesta omasal

Seleção de variáveis

As regiões do espectro que apresentam informações relevantes e que melhor estão correlacionadas com as propriedades avaliadas em amostras de fase sólida da digesta omasal de bovinos podem ser visualizadas na Figura 8.

O número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, número de variáveis latentes selecionadas e os parâmetros estatísticos calculados para todos os modelos estão representados na Tabela 7.

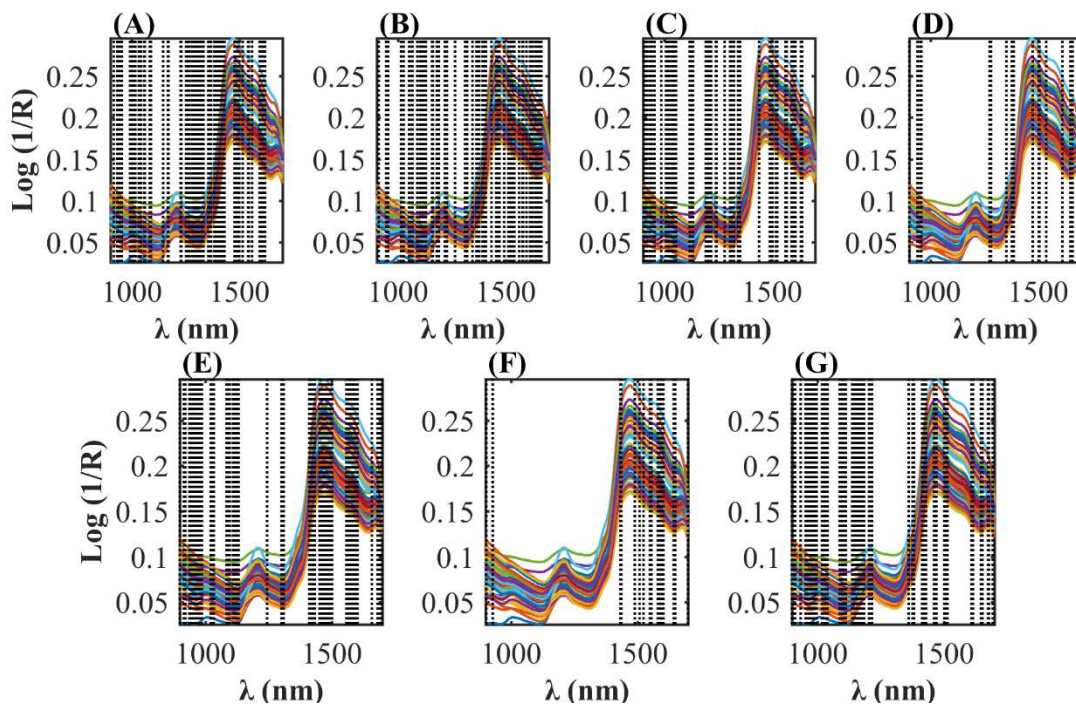


Figura 8 - Regiões do espectro das amostras de fase sólida de digesta omasal selecionadas pelos algoritmos OPS para construção dos modelos para predição dos teores de (A) matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi), em amostras de fase sólida de digesta omasal de bovinos.

Tabela 7 - Resultados estatísticos para os modelos de predição da composição da fase sólida de digesta de bovinos.

Modelos ²	Itens ¹							
	nvars	nlv	RMSEC	RC	RMSECV	RCV	RMSEP	RP
MS105	80	3	0,005	0,828	0,006	0,752	0,006	0,825
MO	60	9	0,004	0,985	0,012	0,824	0,005	0,952
PB	50	9	0,005	0,95	0,008	0,88	0,011	0,758
EE	19	10	0,003	0,968	0,004	0,93	0,004	0,896
FDNcp	20	4	0,042	0,904	0,052	0,854	0,059	0,906
FDNi	80	9	0,036	0,907	0,06	0,737	0,05	0,866
CNF	80	3	0,042	0,927	0,05	0,895	0,088	0,818

¹nvars = número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, nlv = número de variáveis latentes, RMSEC = raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração, RC = coeficiente de correlação da calibração, RMSECV = raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada, RCV = coeficiente de correlação da validação cruzada, RMSEP = raiz quadrada do erro quadrático médio da predição, RP = coeficiente de correlação da predição.

²MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, EE = extrato etéreo, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteína, FDNi = fibra insolúvel em detergente neutro indigestível.

Todos os modelos desenvolvidos para estimar a composição da fração sólida da digesta omasal apresentaram baixo RMSEP e alto coeficiente de correlação da predição. Assim pode-se dizer que os modelos possuem alta capacidade de predição. Os gráficos com os erros relativos da predição para cada modelo podem ser visualizados na Figura 9.

Os resultados da avaliação da validação externa para cada constituinte químico analisado encontram-se nas Tabelas 8 e 9. Os modelos construídos, estimaram com acurácia as propriedades MS105, MO, EE, FDNcp, FDNi e CNF ($P > 0,05$). Porém o modelo construído para estimar PB produziu estimativas não condizentes ao observado para tal propriedade ($P < 0,05$). Ao visualizar o CCC, pode-se concluir que todos os modelos construídos estimaram com precisão e exatidão ($CCC > 0,70$).

Tabela 8 - Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de MS105, MO e PB da fase sólida da digesta omasal de bovinos.

Item	MS105 ⁸		MO ⁹		PB ¹⁰	
	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²	Med ¹¹	Pred ¹²
Média	90.4	90.6	95.7	95.6	11.9	12.0
Desvio padrão	1.05	0.83	1.44	1.28	1.36	1.74
Máximo	92.4	92.0	97.5	97.3	14.1	15.3
Mínimo	89.2	89.1	93.3	93.3	9.9	9.6
R ¹	-	0.659	-	0.901	-	0.546
CCC ²	-	0.785	-	0.943	-	0.733
Regressão						
Intercepto						
Estimativa	-	-4.43	-	-6.82	-	4.78
Erro-padrão	-	16.782	-	8.209	-	1.589
Inclinação						
Estimativa	-	1.05	-	1.07	-	0.59
Erro-padrão	-	0.185	-	0.086	-	0.131
P-valor ³	-	0.425	-	0.430	-	0.022
MSEP ⁴	-	0.374	-	0.202	-	1.235
SB ⁵	-	0.039	-	0.012	-	0.015
Maf ⁶	-	0.001	-	0.008	-	0.479
Mof ⁷	-	0.333	-	0.182	-	0.741

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Matéria seca à 105°C, ⁹Matéria orgânica, ¹⁰Proteína bruta, ¹¹Medido por método laboratorial convencional, ¹²Predito pelo modelo construído.

Tabela 9 - Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de EE, CNF, FDNcp e FDNi da fase sólida da digesta omasal de bovinos.

Item	EE ⁸		CNF ⁹		FDNcp ¹⁰		FDNi ¹¹	
	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³
Média	3.2	3.3	38.0	40.4	40.8	37.8	23.4	22.8
Desvio padrão	0.93	0.81	14.98	11.03	12.53	11.03	10.20	9.00
Máximo	4.8	5.4	61.4	60.8	61.6	51.2	48.6	40.9
Mínimo	1.7	2.3	18.0	27.6	20.7	15.4	4.2	1.0
R ¹	-	0.789	-	0.647	-	0.810	-	0.733
CCC ²	-	0.880	-	0.768	-	0.872	-	0.857
Regressão								
Intercepto								
Estimativa	-	-0.20	-	-6.94	-	1.86	-	1.09
Erro-padrão	-	0.445	-	8.429	-	4.872	-	3.571
Inclinação								
Estimativa	-	1.02	-	1.11	-	1.03	-	0.98
Erro-padrão	-	0.131	-	0.202	-	0.124	-	0.146
P-valor ³	-	0.518	-	0.468	-	0.113	-	0.876
MSEP ⁴	-	0.176	-	77.287	-	35.268	-	24.929
SB ⁵	-	0.014	-	6.040	-	8.793	-	0.407
Maf ⁶	-	0.000	-	1.407	-	0.098	-	0.029
Mof ⁷	-	0.161	-	69.840	-	26.377	-	24.493

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Extrato Etéreo, ⁹Carboidratos não fibrosos, ¹⁰Fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas, ¹¹Fibra insolúvel em detergente neutro indigestível ¹²Medido por método laboratorial convencional, ¹³Predito pelo modelo construído.

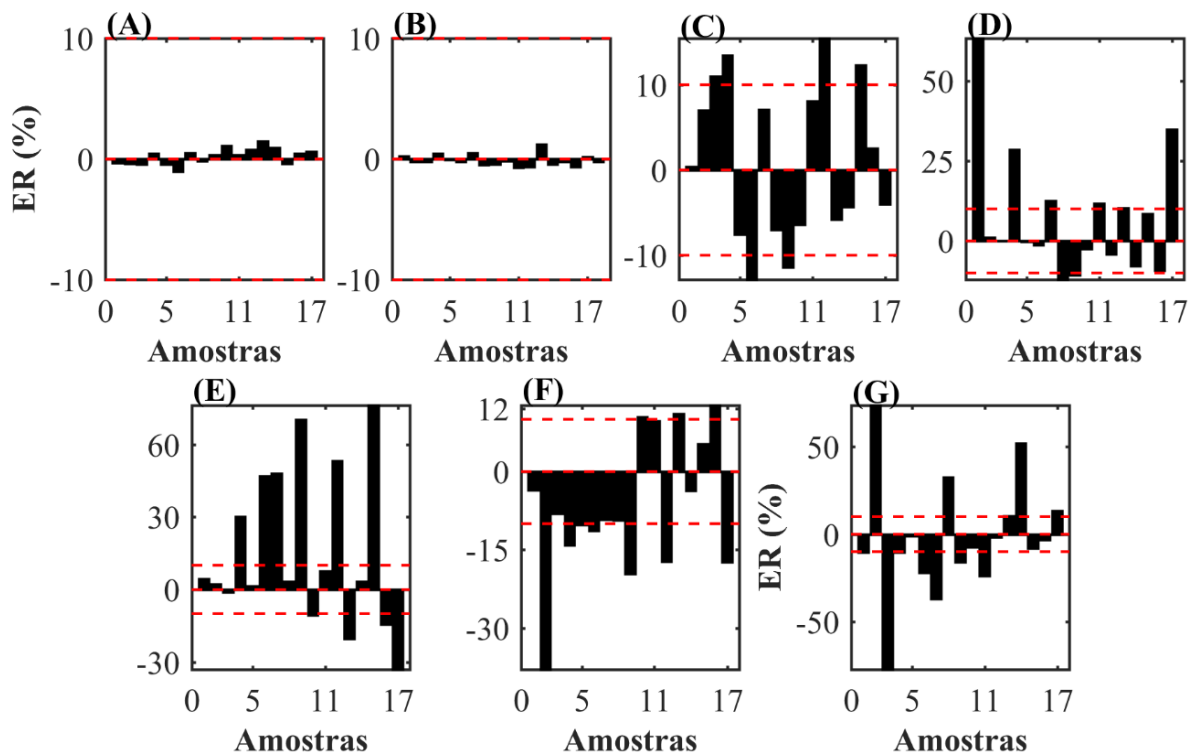


Figura 9 – Erros relativos da predição dos modelos de regressão construídos para os teores de (A) matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi), em amostras de fase sólida de digesta omasal de bovinos.

Os gráficos com os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos são apresentados na Figura 10.

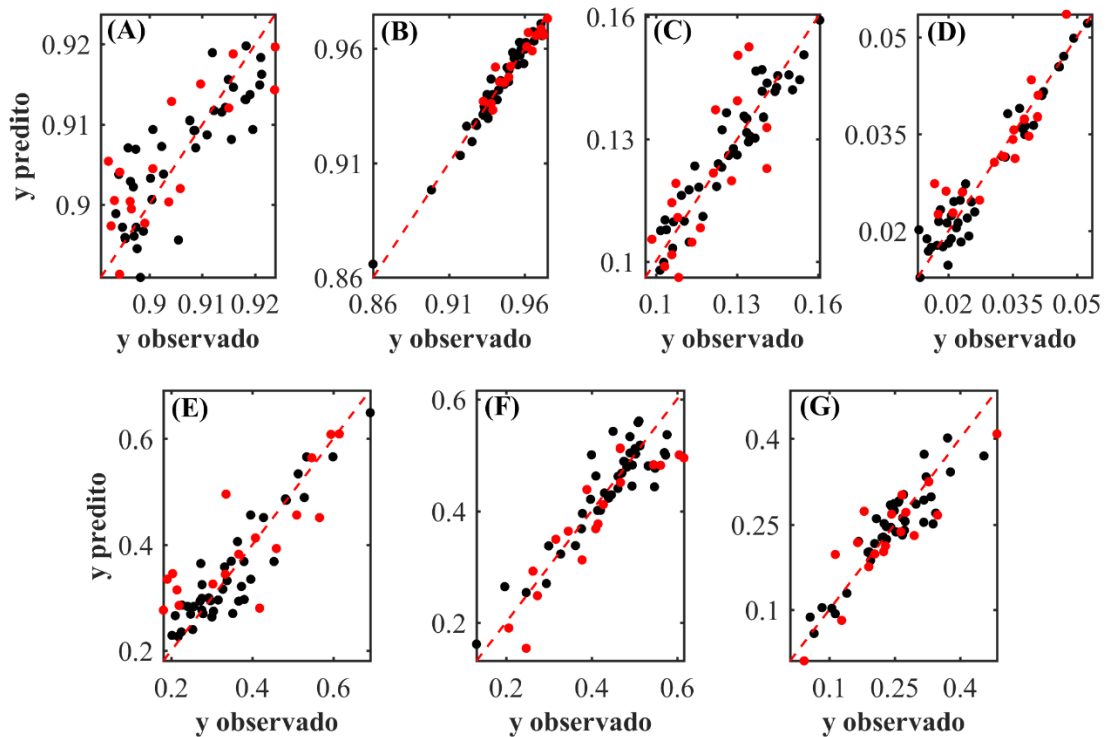


Figura 10 – Valores medidos por métodos laboratoriais convencionais versus preditos pelos modelos construídos para prever os teores de (A) matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB), (D) extrato etéreo (EE), (E) carboidratos não fibrosos (CNF), (F) fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas (FDNcp) e (G) fibra insolúvel em detergente neutro indigestível (FDNi), em amostras de fase sólida de digesta omasal de bovinos

Fase líquida da digesta omasal

Na Tabela 10 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizados em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos e as informações sobre o tamanho dos conjuntos de calibração e validação e os pré-tratamentos realizados em cada conjunto de dados.

Em todos os casos, os modelos construídos com pré-tratamentos dos espectros apresentaram menores RMSECV, indicando um melhor ajuste e precisão dos modelos que passaram por pré-tratamentos.

Tabela 10 - Análise descritiva dos valores (%) das análises laboratoriais convencionais realizadas em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos.

Propriedades ¹	Média	Mínimo	Máximo	DP ²	Tamanho Matriz		Pré-tratamentos ³
					Calibração	Predição	
MS105	82,81	74,48	26,70	7,051	49×256	21×256	AE + Norm
MO	73,83	61,93	20,73	0,667	48×256	21×256	AE + Norm
PB	93,28	83,55	39,71	18,357	49×256	21×256	AE + Norm
EE	6,16	4,28	3,93	4,951	49×256	21×256	CLB + Norm

¹MS105 = matéria seca a 105°C, MO = matéria orgânica, PB = proteína bruta, EE = extrato etéreo.

²Desvio Padrão.

³AE = autoescalar, Norm = normalizar, CLB = correção da linha de base

Os espectros NIRS das amostras utilizadas (N = 74) de fase líquida de digesta omasal são apresentados na Figura 11:

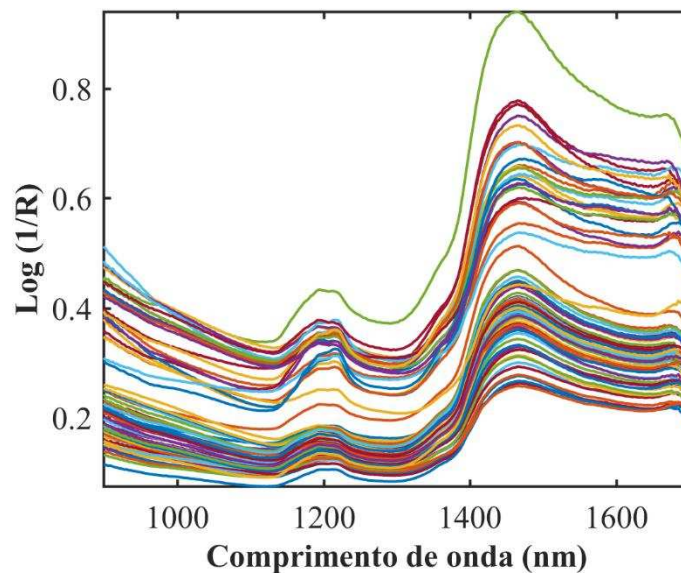


Figura 11 – Espectros NIR de amostras de fase líquida de digesta omasal

Seleção de variáveis

As regiões do espectro que apresentam informações relevantes e que melhor estão correlacionadas com as propriedades avaliadas em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos podem ser visualizadas na Figura 12.

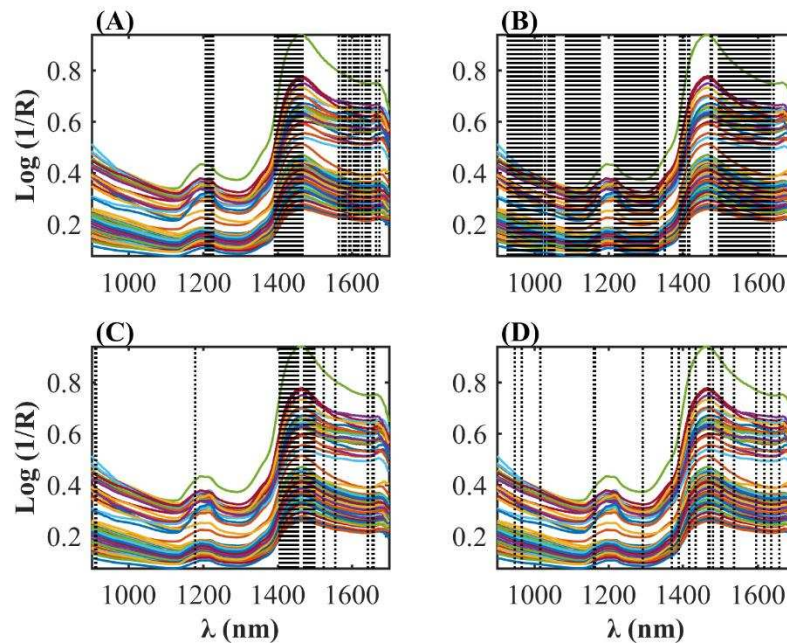


Figura 12 - Regiões do espectro das amostras de fase líquida de digesta omasal selecionadas pelos algoritmos OPS para construção dos modelos para predição dos teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB) e (D) extrato etéreo (EE), em amostras de da fase líquida da digesta omasal de bovinos

O número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, número de variáveis latentes selecionadas e os parâmetros estatísticos calculados para todos os modelos estão representados na Tabela 11.

Todos os modelos desenvolvidos para estimar a composição da fase líquida da digesta omasal apresentaram baixo RMSEP, sendo que desses, o para predição do teor de MO apresentou um RP intermediário enquanto os demais apresentaram alto RP. Isso mostra que os modelos possuem boa capacidade de predição. Os gráficos com os erros relativos da predição para cada modelo podem ser visualizados na Figura 13.

Tabela 11 - Resultados estatísticos para os modelos de predição da composição da fase líquida da digesta omasal de bovinos.

Modelos ²	Itens ¹							
	nvars	nlv	RMSEC	RC	RMSECV	RCV	RMSEP	RP
MS105	50	2	0,033	0,93	0,035	0,913	0,055	0,921
EE	20	9	0,008	0,986	0,014	0,955	0,012	0,977
MO	150	7	0,017	0,9	0,023	0,818	0,037	0,478
PB	30	4	0,018	0,866	0,023	0,79	0,023	0,791

¹nvars = número de variáveis selecionadas pelos algoritmos OPS, nlv = número de variáveis latentes, RMSEC = raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração, RC = coeficiente de correlação da calibração, RMSECV = raiz quadrada do erro quadrático médio

²MS105 = matéria seca a 105°C, EE = extrato etéreo, MO = matéria orgânica, PB = proteína bruta.

Os resultados da avaliação da validação externa para cada constituinte químico analisado encontram-se na Tabela 12.

Os modelos construídos, não estimaram com acurácia as propriedades MS105, MO e PB ($P < 0,05$). Já o modelo construído para estimar EE produziu estimativas condizentes ao observado para tal propriedade ($P > 0,05$). Ao visualizar o CCC, pode-se concluir que os modelos construídos para PB e EE estimaram com precisão e exatidão ($CCC > 0,70$), enquanto o modelo para MS105 e MO apresentaram baixa precisão.

O modelo construído para estimar MS105 apresentou mais de 80% do MSEP atribuído ao viés (SB) e magnitude de flutuação aleatória (Maf). Os outros modelos apresentaram maior parte do MSEP associado a erros aleatórios (Mof).

Os gráficos com os valores medidos por métodos laboratoriais convencionais e preditos pelos modelos construídos para amostras de fase líquida de digesta omasal são apresentados na Figura 14.

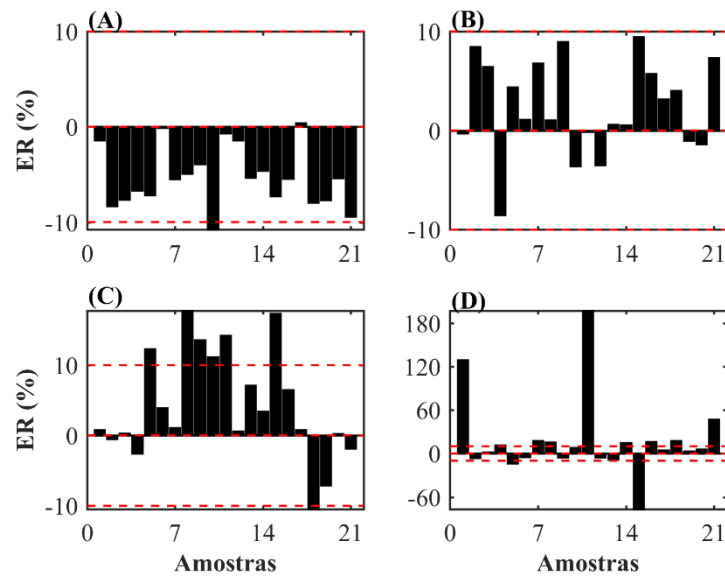


Figura 13 – Erros relativos da predição dos modelos de regressão construídos para os teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB) e (D) extrato etéreo (EE) em amostras de fase líquida da digesta omasal de bovinos.

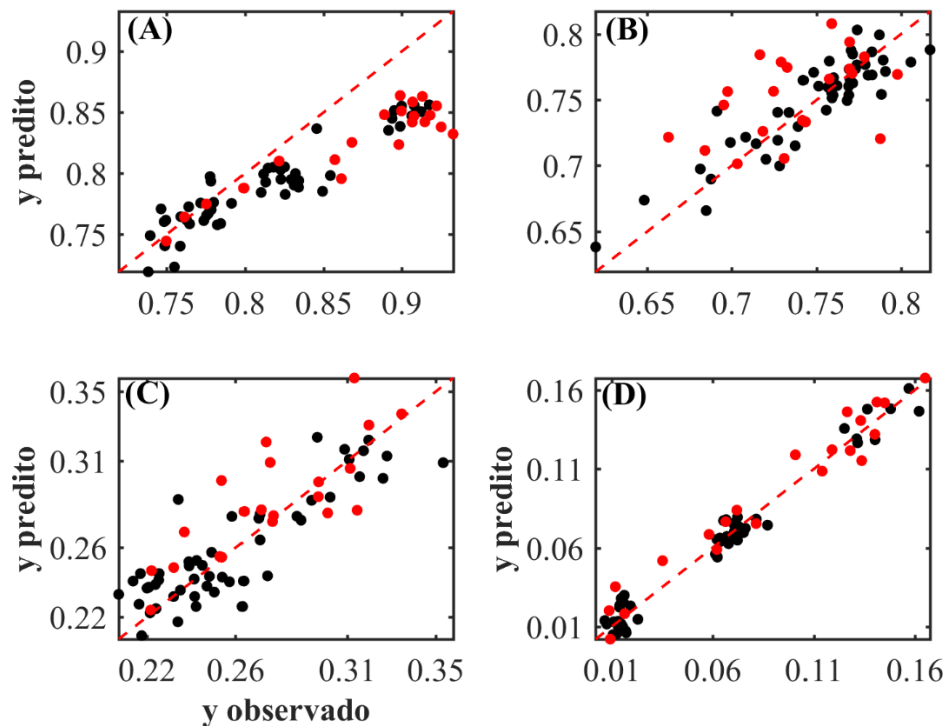


Figura 14 – Valores medidos por métodos laboratoriais convencionais versus preditos pelos modelos construídos para os teores de (A) Matéria seca à 105°C (MS105), (B) matéria orgânica (MO), (C) proteína bruta (PB) e (D) extrato etéreo (EE), em amostras de da fase líquida da digesta omasal de bovinos.

Tabela 12 - Estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores (%) de MS105, MO, PB e EE da fase líquida da digesta omasal de bovinos.

Item	MS105 ⁸		MO ⁹		PB ¹⁰		EE ¹¹	
	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³	Med ¹²	Pred ¹³
Média	87,3	82,5	73,7	75,3	27,6	28,7	8,9	9,4
Desvio padrão	5,73	3,42	3,61	3,09	3,32	3,28	5,10	4,94
Máximo	93,3	86,4	79,8	80,8	33,5	35,8	16,5	16,8
Mínimo	75,0	74,5	66,3	70,1	22,2	22,4	0,9	0,2
R ¹	-	0,84	-	0,19	-	0,61	-	0,95
CCC ²	-	0,54	-	0,42	-	0,75	-	0,97
Regressão								
Intercepto								
Estimativa	-	-40,15	-	31,65	-	4,67	-	-0,57
Erro-padrão	-	12,355	-	17,743	-	4,097	-	0,532
Inclinação								
Estimativa	-	1,54	-	0,56	-	0,80	-	1,01
Erro-padrão	-	0,150	-	0,235	-	0,142	-	0,050
P-valor ³	-	<0,001	-	0,027	-	0,043	-	0,181
MSEP ⁴	-	30,720	-	13,995	-	5,472	-	1,345
SB ⁵	-	22,698	-	2,665	-	1,138	-	0,219
Maf ⁶	-	3,294	-	1,772	-	0,410	-	0,003
Mof ⁷	-	4,728	-	9,558	-	3,924	-	1,124

¹Coefficiente de correlação de Pearson, ²Coefficiente de correlação e concordância, ³H₀: $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ⁴Quadrado médio do erro de predição, ⁵Viés, ⁶Magnitude da flutuação aleatória, ⁷Flutuação aleatória do modelo, ⁸Matéria seca à 105°C, ⁹Extrato etéreo, ¹⁰Fibra insolúvel em detergente neutro corrigida para cinzas e proteínas, ¹¹Fibra insolúvel em detergente neutro indigestível, ¹²Medido por método laboratorial convencional, ¹³Predito pelo modelo construído.

CONCLUSÃO

Os modelos de regressão desenvolvidos para predição da composição de amostras de fezes de bovinos estimam corretamente os teores de MS105, MO, PB, EE, FDNcp e FDNi. Enquanto os desenvolvidos para predição da composição de amostras de digesta omasal de bovinos estimam corretamente os teores de MS105, MO, EE, FDNcp, FDNi e CNF na fase sólida da digesta omasal, e na fase líquida da digesta omasal somente o teor de EE foi estimado corretamente. Dessa forma, estes podem substituir os métodos laboratoriais convencionais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALHADAS, Herlon Meneguelli. Efeito dos níveis de inclusão de fibra fisicamente efetiva proveniente de cana-de-açúcar em dietas de grão inteiro sobre os parâmetros ingestivos, digestivos e ruminais. 2018. 55 f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2018.
- DETMANN, E., SOUZA, M.A., VALADARES FILHO, S.C. Métodos para análise de alimentos. Visconde do Rio Branco: Universidade Federal de Viçosa, 2012. 214p.
- DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S.C. On the estimation of non-fibrous carbohydrates in feeds and diets. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v.62, p.980-984, 2010.
- DETMANN, E.; VALADARES FILHO, S.C.; PAULINO, M.F.; ZERVOUDAKIS, J. T.; CABRAL, L. S. Avaliação da técnica dos indicadores na estimação do consumo por ruminantes em pastejo. **Cadernos Técnicos de Veterinária e Zootecnia**, v.45, p.40-57, 2004.
- GODOI, Letícia Artuzo. Avaliação nutricional em bovinos Nelore alimentados com dietas contendo alta concentração de amido. 2017. 74 f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2017.
- KENNARD, R. W. & STONE, L. A. Computer Aided Design of Experiments, **Technometrics**, 11:1, 137-148, 1969.
- KOBAYASHI, Kazuhiko & SALAM, Moin. Comparing Simulated and Measured Values Using Mean Squared Deviation and Its Components. **Agronomy Journal**. 92. 345-352, 2000.

- MENEZES, Ana Clara Baião. Nitrogen balance and nutrient requirements of young Nelore bulls fed with static or oscillating crude protein levels, and feeding behavior, water intake and requirements of bulls with different residual feed intakes. 2019. 104 f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2019.
- OLIVEIRA, F. C.; SOUZA, A. T. P. C.; DIAS, J. A.; DIAS, S. C. L.; RUBIM, J. C. A escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos, **Química Nova**, (27), 218-225, 2004.
- PACHECO, Marcos Vinícius Carneiro. Efeito da ensilagem dos grãos de milho e sorgo reidratados sobre o desempenho e características de carcaça de bovinos nelore superprecoce. 58 f, 2018. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2018.
- ROQUE, J.V., CARDOSO, W., PETERNELLI, L.A., TEÓFILO, R.T. Comprehensive new approaches for variable selection using ordered predictors selection. **Anal. Chim. Acta** 1075, 57–70, 2019.
- SILVA, Breno de Castro. Efeito da ensilagem de grãos de milho e sorgo reconstituídos sobre os locais de digestão e estimativa da digestibilidade in vivo através de procedimentos de incubação ruminal in situ e in vitro em bovinos Nelore. 2018. 86 f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2018.
- SILVA, Flávia Adriane de Sales. Desempenho, produção de metano entérico, eficiência de utilização da energia, metabolismo proteico muscular e exigências nutricionais de novilhas Holandês × Zebu alimentadas com silagem de milho ou cana-de-açúcar. 2015. 64 f. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2015.
- SILVA, Flávia Adriane de Sales. Restricted-feeding for holstein × zebu finishing steers. 2019. 116 f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2019.
- TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of mathematical models. **Agricultural Systems**, v.89, p.225-247, 2006.
- ZANETTI, Diego. Mineral release from different feeds, mineral balance for Nelore bulls, and water intake prediction by beef cattle. 2017. 139 f. Tese (Doutorado em Zootecnia) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa. 2017.

CONCLUSÃO GERAL

Os modelos de regressão construídos nesse estudo estimaram adequadamente a composição da silagem de milho com exceção da matéria orgânica(MO) das amostras de fezes, das amostras de fase sólida de digesta omasal com exceção da proteína bruta(PB), e somente o extrato etéreo foi estimado corretamente para amostras de fase líquida de digesta omasal, podendo então estes substituir os métodos convencionais de análises.

Os modelos desenvolvidos para prever os parâmetros da degradabilidade ruminal da silagem de milho, estimam corretamente as frações solúveis da matéria seca (MS), MO e PB, as frações potencialmente degradáveis da MS e da fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), a fração indegradável da FDN, e as taxas de degradação da MS, PB e FDN. Tais resultados demonstram o grande potencial de utilização da espectroscopia NIR para predição da degradabilidade ruminal da silagem de milho.

Assim, pode se concluir que a utilização de modelos de regressão associados a espectroscopia NIR fornece uma boa ferramenta para avaliação nutricional. Dessa forma, mais estudos nessa área devem ser realizados visando aperfeiçoar cada vez mais os modelos, e abranger outros tipos de amostras e alimentos