

Avaliação de modelos utilizados na produção de gases in vitro da cana-de-açúcar

Géssica Neves dos Santos¹, Ícaro dos Santos Cabral², José Augusto Gomes Azevêdo³, Thaisa Brasil Carvalho⁴, Jaíne Alves Azevêdo⁵, Valéria dos Santos de Medeiros⁶, Michele Brito Santos⁷, Dayse Drielly Souza Santana-Vieira⁸

1 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

2 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

3 - Universidade Estadual de Santa Cruz - UESC

4 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

5 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

6 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

7 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

8 - Universidade Federal do Amazonas - UFAM

RESUMO - Objetivou-se avaliar a adequação de sete modelos não lineares (France, Orskov & McDonald, Gompertz, exponenciais simples e bicompartimental e logísticos simples e bicompartimental) no ajuste da curva e na geração de parâmetros de produção cumulativa de gases in vitro da cana-de-açúcar. Realizou-se a incubação da amostra em seringas graduadas contendo meio tamponado e inóculo ruminal. A leitura da produção de gás foi realizada nos tempos 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 48, 52, 54, 56, 60 e 72 horas. Para comparação dos resultados estimados com as equações e observados nas seringas graduadas, testou-se os parâmetros de regressão pelo teste de Mayer, viés médio (VM), coeficiente de concordância da correlação (CCC) e quadrado médio do erro de predição (QMEP). O modelo que apresentou melhor ajuste foi o Exponencial Bicompartimental, por apresentar o menor QMEP.

Palavras-chave: cana-de-açúcar, cinética de degradação, modelos não-lineares.

Evaluation of models used in the production of in vitro gases from sugarcane

ABSTRACT - The objective of this study was to evaluate the suitability of seven nonlinear models (France, Orskov & McDonald, Gompertz, simple and bicompartimental exponentials and simple and bicompartimental logistic) in curve fitting and in the generation of parameters of cumulative in vitro gas production of sugarcane -sugar. The samples were incubated in graduated syringes containing buffered medium and ruminal inoculum. The gas production reading was performed at times 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 48, 52, 54, 56, 60 and 72 hours. For comparison of the estimated results with the equations and observed in the graduated syringes, the regression parameters were tested by Mayer's test, mean bias (MB), correlation concordance coefficient (CCC) and mean square of prediction error (MSPE). The model that presented the best fit according to the Mayer test was the Exponential Bicompartimental, in addition to presenting the lowest MSPE.

Keywords: Non-linear models, degradation kinetics, sugarcane

Introdução

A técnica *in vitro* de produção de gases é utilizada para avaliar a cinética dos processos de fermentação microbiana ruminal.

Há diversos modelos não-lineares disponíveis para ajuste das curvas de produção de gases e para determinação dos parâmetros de degradação ou perfil de fermentação. Entre os modelos destacam-se os de crescimento exponencial e sigmoide e o principal objetivo destes modelos é descrever alterações no sistema em função do tempo de incubação.

Este trabalho teve como objetivo avaliar a adequação de diferentes modelos matemáticos para ajustar os perfis da cinética de produção de gases *in vitro* da cana-de-açúcar.

Revisão Bibliográfica

Para determinação dos parâmetros da cinética de produção de gases *in vitro*, várias equações não-lineares já foram propostas e testadas para os diferentes substratos utilizadas, sendo que cada uma apresentam suposições e tratamentos distintos. Em estudo com incubação de silagens de girassol e milho, Melo et al. (2008) testaram diferentes modelos não lineares e observaram que os modelos de Gompertz e Logístico simples superestimaram o segundo ponto de inflexão da curva e subestimaram a fase assintótica após 144 horas. Estes autores concluíram então, que o modelo Logístico Bicompartimental foi o mais eficiente por apresentar curva adequada em todas as fases de incubação e apresentar características mais relevantes do ponto de vista nutricional, por exemplo, a geração de parâmetros oriundos de carboidratos fibrosos e não fibroso.

Materiais e Métodos

O experimento foi conduzido no Laboratório de Nutrição Animal da Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC), Ilhéus, Bahia.

As amostras da cana-de-açúcar foram submetidas à pré-secagem e moídas em moinho de facas com peneira de porosidade de 2 mm de diâmetro, para posteriores análises do conteúdo de matéria seca (MS), proteína bruta (PB), matéria mineral (MM) e extrato etéreo (EE), conforme os métodos da AOAC (1990).

A análise de fibra em detergente neutro (FDN) foi realizada de acordo com Mertens (2002). A correção da FDN para os compostos nitrogenados e a estimação dos conteúdos de compostos nitrogenados insolúveis nos detergentes neutro (NIDN) foi feita conforme Licitra et al. (1996). O conteúdo de carboidratos não-fibrosos (CNF) foi calculado de acordo com Hall (2000). A digestibilidade *in vitro* da FDN (DIVFDN) foi realizada de acordo com Schofield et al. (1994). Os valores da composição químico-bromatológica e DIVFDN são apresentados na tabela 1.

Tabela 1: Composição química e digestibilidade da fibra em detergente neutro (DIVFDN) da cana-de-açúcar

Alimento	Variáveis em (% de MS)						
	MS ^a	MO ^b	PB ^b	NIDN ^c	FDNcp ^b	CNF ^b	DIVFDN ^d
Cana-de-açúcar	235	952	31	315	10	488	60

^a g/kg; ^b g/kg na MS; ^c g/kg na PB; ^d %

Para a produção dos gases foram utilizadas seringas calibradas de acordo com procedimento descrito por Getachew et al. (2004). A partir disso, a leitura da produção de gás foi realizada nos tempos 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 48, 52, 54, 56, 60 e 72 horas.

As taxas e extensão da produção de gases foram estimadas por ajustamento dos dados de produção de gases aos modelos unicompartimental: France et al. (1993), exponencial, logístico, Gompertz, Orskov e McDonald (1979), além dos modelos bicompartimental: logístico e exponencial descrito na tabela 2.

Tabela 2. Modelos não-lineares avaliados

Modelos	NP ¹	Restrições	Equações ²
France et al. (1993)	4	$A, b, \lambda \geq 0$ $c \geq -2b$	$\hat{Y} = A \{1 - \exp^{[-b(t - \lambda) - c(-)]}\}$
Exponencial	3	$A, \mu \text{ e } \lambda \geq 0$	$\hat{Y} = A \{1 - \exp^{[-\mu(t - \lambda)]}\}$
Logístico	3	$A, \mu \text{ e } \lambda \geq 0$	$\hat{Y} = A / \{1 + \exp^{[2 - 4 \mu(t - \lambda)]}\}$
Gompertz	3	$A, \mu \text{ e } \lambda \geq 0$	$\hat{Y} = A \exp^{\{-\exp[1 - \mu(t - \lambda)]\}}$
Orskov e McDonald (1979)	2	$A \text{ e } \mu \geq 0$	$\hat{Y} = A \{1 - \exp^{[-\mu t]}\}$
Exponencial bicompartimental	5	$ACNF, ACF, \mu_{CNF}, \mu_{CF} \text{ e } \lambda \geq 0$	$\hat{Y} = ACNF \{1 - \exp^{[-\mu_{CNF}(t - \lambda)]}\} + ACF \{1 - \exp^{[-\mu_{CF}(t - \lambda)]}\}$
Logístico bicompartimental	5	$ACNF, ACF, \mu_{CNF}, \mu_{CF} \text{ e } \lambda \geq 0$	$\hat{Y} = ACNF / \{1 + \exp^{[2 - 4 \mu_{CNF}(t - \lambda)]}\} + ACF / \{1 + \exp^{[2 - 4 \mu_{CF}(t - \lambda)]}\}$

¹ A = assíntota (mL), A_{CNF} = assíntota dos carboidratos não fibrosos (mL), A_{CF} = assíntota dos carboidratos fibrosos (mL), μ = taxa fracional de degradação (h^{-1}), μ_{CNF} = taxa fracional de degradação dos carboidratos não fibrosos (h^{-1}), μ_{CF} = taxa fracional de degradação dos carboidratos fibrosos (h^{-1}), t = tempo de incubação (h), λ = tempo de latência (h)

² NP = número de parâmetros do modelo

A avaliação dos modelos foi realizada através do ajustamento do modelo de regressão linear simples dos valores observados sobre os valores preditos pelas equações, sendo as estimativas dos parâmetros de regressão testadas pela hipótese de nulidade conjunta segundo Mayer et al. (1994):

$$H_0 : \beta_0 = 0 \text{ e } \beta_1 = 1$$

$$H_a : \text{não } H_0.$$

Para o Teste de Mayer et al. (1994) utilizou-se a probabilidade de 10% e sob o caso de não rejeição da hipótese de nulidade, concluiu-se pela equivalência entre os valores preditos (volume de gás nas determinadas horas apresentado pelo modelo) e observados (volume de gás nas determinadas horas observado nas seringas graduadas).

Ainda avaliou-se o viés médio (VM), que foi calculado conforme (Cochran e Cox, 1957) e o quadrado médio do erro de predição (QMEP), segundo descrito por Bibby e Toutenburg (1977), que considera a diferença entre os valores preditos e observados

O coeficiente de concordância da correlação (CCC), também conhecido como índice de reprodutibilidade, que considera simultaneamente exatidão e precisão, foi calculado conforme Lin (1989).

Para avaliação dos parâmetros de regressão, VM, CCC e QMEP utilizou-se o programa Model Evaluation System (MES), versão 3.0.11. (<http://nutritionmodels.tamu.edu/mes.htm>, College Station, TX, USA; Tedeschi, 2006).

Resultados e Discussão

Os parâmetros cinéticos de degradação estimados pelos diferentes modelos encontram-se na Tabela 3.

Tabela 3. Assíntotas (mL) total, dos CNF e dos CF (A , A_{CNF} e A_{CF}), taxas fracionais de degradação (h^{-1}) total, dos CNF e dos CF (μ , μ_{CNF} e μ_{CF}) e tempo de latência (λ , em horas) da cana-de-açúcar utilizando diferentes modelos matemáticos.

Parâmetro	Modelos ^a						
	1	2	3	4	5	6	7
Cana-de-açúcar							
A	--	45,793	42,134	--	41,030	41,140	42,134
A_{CNF}	24,933	--	--	24,732	--	--	--

A_{CF}	20,213	--	--	24,135	--	--	--
μ	--	0,093	0,126	--	0,086	0,248	0,126
μ_{CNF}	0,244	--	--	0,502	--	--	--
μ_{CF}	0,024	--	--	0,030	--	--	--
λ	1,346	0,788	0,001	1,387	0,001	0,001	--

1 = Logístico bicompartimental; 2 = France (1993); 3 = Exponencial; 4 = Exponencial bicompartimental; 5 = Logístico; 6 = Gompertz; 7 = Orskov e McDonald (1979).

Entre os modelos unicompartmentais, o Modelo de Gompertz parece superestimar a taxa de degradação com valor biologicamente difícil de ocorrer. O modelo logístico unicompartmental foi o que apresentou menor valor de A e μ , parecendo subestimá-lo. Nos modelos bicompartimentais, os valores da assíntota provenientes dos CNF foram maiores.

Os parâmetros de regressão, o valor de P para o teste de Mayer et al. (1994), o VM, o CCC e o QMEP dentre os valores observados e os estimados pelos diferentes modelos matemáticos para o alimento testado são apresentados na tabela 4.

Tabela 4. Parâmetros de regressão, valor de P , viés médio (VM), coeficiente de correlação e concordância (CCC) e quadrado médio do erro de predição (QMEP) dentre os valores observados para volume acumulativo de gases e os estimados pelos diferentes modelos matemáticos em diferentes alimentos

Parâmetro	Modelos ^a						
	1	2	3	4	5	6	7
Cana-de-açúcar							
Intercepto	-0,236	0,001	0,952	0,002	2,337	1,980	0,952
Inclinação	1,006	1,000	0,975	1,000	0,939	0,948	0,975
r^2	0,997	0,978	0,938	0,999	0,885	0,902	0,938
P^b	0,902	1,000	0,918	0,997	0,757	0,791	0,918
VM	-0,003	0,007	-0,052	0,000	0,191	0,141	0,059
CCC	0,998	0,989	0,969	0,999	0,940	0,949	0,969
QMEP	0,317	2,137	6,183	0,123	11,853	10,061	6,183

^a 1 = Logístico bicompartimental; 2 = France (1993); 3 = Exponencial; 4 = Exponencial bicompartimental; 5 = Logístico; 6 = Gompertz; 7 = Orskov e McDonald (1979)

^b $P > 0,05 = H_0 : \beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$; $P < 0,05 = H_a : \text{não } H_0$.

Avaliando o valor de P para o teste de Mayer et al. (1994), a hipótese de nulidade foi aceita para todos os modelos ($P > 0,05$), desta forma os valores preditos pelos diferentes modelos são correspondentes aos valores observados nas seringas graduadas e o maior viés médio foi obtido com o modelo logístico (0,25%). Segundo Yungblut et al. (1981) consideraram que um viés médio inferior a 10% em relação aos valores observados é aceitável.

Quanto ao CCC analisado, todos os modelos apresentaram valores próximos a 1, indicando bom ajuste aos valores observados.

Dentre os índices de avaliação dos modelos, o QMEP foi o que mais contribuiu para demonstrar o ajustamento dos modelos. O modelo exponencial bicompartimental apresentou menor valor para a cana-de-açúcar.

Conclusões

Dentre os modelos avaliados, o Exponencial Bicompartimental foi o mais adequado, devido apresenta menor quadrado médio do erro de predição, menor viés médio e coeficiente de correlação e concordância mais próximo de 1, tornando este modelo o mais adequado.

Referências

- AOAC. **Official methods of analysis**. 15th ed. Association of Official Analytical Chemists, Arlington, Virginia, 1990.
- BIBBY, J.; TOUTENBURG, H. **Prediction and improved estimation in linear models**. New York: J. Wiley and Sons, 1977.
- COCHRAN, W. G.; COX, G. M. **Experimental Design**. John Wiley & Sons, New York. 1957.
- GETACHEW, G.; ROBINSON, P. H.; DEPETERS, E. J.; TAYLOR, S. J. Relationships between chemical composition, dry matter degradation and in vitro gas production of several ruminant feeds. **Animal Feed Science and Technology**, v. 111, p. 57-71, 2004.
- HALL, M. B. **Neutral Detergent-soluble carbohydrates. Nutritional relevance and analysis**. University of Florida, Gainesville, 2000.
- LICITRA, G.; HERNANDEZ, T. M.; VAN SOEST, P. J. Standardization of procedures for nitrogen fractionation of ruminant feeds. **Animal Feed Science and Technology**, v. 57, p. 347-358, 1996.
- LIN, L. A. Concordance correlation coefficient to evaluate reproducibility. **Biometrics**, v. 45, p. 255-268, 1989.
- MAYER, D. G.; STUART, M. A.; SWAIN, A. J. Regression of real-world data on model output: An appropriate overall test of validity. **Agricultural Systems**, v. 45, p. 93-104, 1994.
- MELLO, R.; MAGALHÃES, A. L. R.; BREDAS, F. C.; REGAZZI, A. J. Modelos para ajuste da produção de gases em silagens de girassol e milho. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 43, p. 261-269, 2008.
- MERTENS, D. R. Gravimetric determination of amylase-treated neutral detergent fiber in feeds with refluxing in beakers or crucibles: collaborative study. **Journal of AOAC International**, v. 85, p. 1217-1240, 2002.
- SCHOFIELD, P.; PITT, R. E.; PELL, A. N. Kinetics of fiber digestion from in vitro gas production. **Journal of Animal Science**, v. 72, p. 2980-2991, 1994.
- TEDESCHI, L. O. Assessment of the adequacy of mathematical models. **Agriculture System**, v. 89, p. 225-247, 2006.
- YUNGBLUT, D. H.; STONE, J. B.; MACLEOD, G. K.; WILSON, G. F. The testing of several feed intake prediction equations using farm data. **Canadian Journal of Animal Science**, v. 61, p. 159-164, 1981.