

Estatística

Propostas de modelos não lineares para ajuste da produção de gases *in vitro* em diferentes tempos de incubação em genótipos de mandioca

Proposals of non-linear models to adjust *in vitro* gas production at different incubation times in cassava genotypes

André Santos^I, Guilherme Rocha Moreira^I, Frank Gomes Silva^I, Cícero Carlos Ramos de Brito^{II}, Maria Lindomárcia Leonardo da Costa^{III}, Moacyr Cunha Filho^I, Eloísa de Oliveira Simões Saliba^{IV}, Marianne Caron de Oliveira^{IV}, Nélio Cunha Gonçalves^{IV}

^I Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, PE, Brasil

^{II} Instituto Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brasil

^{III} Universidade Federal da Paraíba, Areia, PB, Brasil

^{IV} Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil

RESUMO

O presente estudo teve por objetivo, propor novos modelos bicompartimentais a partir da combinação do modelo Gompertz, Logístico e Von Bertalanffy e identificar entre modelos Gompertz e logístico, em suas versões uni e bicompartimental, além dos propostos, aquele que apresenta maior qualidade de ajuste às curvas de produção cumulativa de gases de cinco genótipos de mandioca: Brasília, Engana Ladrão, Dourada, Gema de Ovo e Amansa Burro. Os horários de leituras da produção de gases foram de 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 17, 20, 24, 28, 32, 48, 72, e 96 horas, após o início do processo de fermentação *in vitro*. A estimação dos parâmetros para os modelos foi feita pelo método de mínimos quadrados por meio do processo iterativo de Gauss-Newton. A seleção do melhor modelo, para descrever o acúmulo de gases, teve como base, o coeficiente de determinação ajustado, quadrado médio do resíduo, desvio médio absoluto, critério de informação de Akaike e critério de informação de Bayesiano. Dentre os modelos ajustados os modelos propostos apresentaram-se como os melhores para descrever o acúmulo de gases ao longo do tempo de acordo com a metodologia e condições em que foi desenvolvido o presente estudo.

Palavras-chave: Curva de crescimento; Parâmetros digestivos; Seleção de modelos

ABSTRACT

The present study aimed to propose new two-compartment models from the combination of the Gompertz, Logistic and Von Bertalanffy models and to identify between Gompertz and Logistic models, in their uni and

two-compartment versions, the one that presents the highest quality of fit to cumulative gas production curves of five cassava genotypes: Brasília, Engana Ladrão, Dourada, Gema de Ovo e Amansa Burro. The gas production readings were 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 17, 20, 24, 28, 32, 48, 72, and 96 hours after the start of the *in vitro* fermentation process. The estimation of the parameters for the models was made by the least squares method through the Gauss-Newton iterative process. The selection of the best model to describe the gas accumulation was based on the adjusted coefficient of determination, residual mean squares, mean absolute deviation, Akaike information criterion and Bayesian information criterion. Among the adjusted models, the proposed models were the best to describe the accumulation of gases over time according to the methodology and conditions under which this study was developed.

Keywords: Growth curve; Digestive parameters; Selection models

1 INTRODUÇÃO

A técnica *in vitro* semiautomática de produção de gases apresenta potencial para descrever a cinética da fermentação no rúmen, fornecer a taxa e a extensão da degradação das forrageiras, bem como medir produtos da fermentação de partes solúveis e insolúveis de substratos (DA CRUZ *et al.*, 2010). No entanto, a interpretação destas informações é obtida através de modelos matemáticos que são uma versão simplificada de um fenômeno estudado (EMILIANO *et al.*, 2014).

A técnica *in vitro* de produção de gases consiste em medir a produção de gases oriunda do processo de fermentação ruminal de uma amostra de alimento. Essa medição a princípio era realizada por meio manual, sendo realizada poucas leituras até o período final de incubação de 24 horas. Posteriormente, com o desenvolvimento de sistemas semiautomáticos e automáticos, a produção de gases passou a ganhar maior precisão nas medições e com isso possibilitou a aplicação de modelos matemáticos a fim de determinar a cinética de fermentação dos alimentos (THEODOROU *et al.*, 1994).

Devido à variabilidade de modelos existentes para descrição de um mesmo fenômeno e a variação de composição entre os alimentos não é prudente que um único modelo deva ser empregado para o ajuste da produção de gases, sendo necessário realizar estudo para cada tipo de substrato (FRANCE *et al.*, 2005).

Assim sendo, modelos matemáticos exponenciais como de Orskov e McDonald (1979) que já eram usados frequentemente em estudos de degradação *in situ*, passaram a ser utilizados para descrever a cinética da produção de gases. Com a automatização o

processo permitiu aferir grande número de pontos durante o período de incubação do alimento, dificultando o ajuste de modelos exponenciais aos dados obtidos (VIEIRA *et al.*, 2018). Assim, o ajuste do modelo exponencial para a produção de gases é inferior a todos os outros modelos sigmóides (BEUVINK e KOGUT, 1993).

Portanto, modelos sigmóides foram propostos para ajustar a cinética de produção de gases (FRANCE *et al.*, 1993; SCHOFIELD, PITT e PELL, 1994; GROOT *et al.*, 1996). Todos estes modelos vêm sendo empregados em vários trabalhos de forma única (KANG e WANAPAT, 2018; MENGISTU *et al.*, 2018; NASCIMENTO *et al.*, 2018; BUDEL *et al.*, 2017) ou conjuntamente em trabalhos que avaliam qual o melhor modelo a ser utilizado (WANG *et al.*, 2016; VELHO *et al.*, 2014). Entretanto, surge o questionamento sobre qual o melhor modelo para ajuste da técnica de produção de gases ou qual o modelo matemático mais adequado. Assim, a seleção de modelos deve ser um passo fundamental no estudo da cinética de produção de gases *in vitro*.

Segundo Santos *et al.* (2019a) vários estudos (FERRO *et al.*, 2017; PERETTI *et al.*, 2017) têm utilizado o modelo Logístico bicompartimental (LB), proposto por Schofield *et al.* (1994) no estudo da cinética de produção cumulativa de gases. Entretanto, em alguns casos o modelo LB pode não ser apropriado devido ao ponto fixo de inflexão na metade da produção cumulativa de gases (FRANCE *et al.*, 2000).

Wang, Tang e Tan (2011) relatam que tem sido propostos inúmeros modelos nas últimas décadas, a fim de descrever e interpretar a cinética de produção de gases *in vitro*, além do mais, descreveram a necessidade de novos modelos significativamente biológicos, que permitam ajustes matemáticos de ampla gama de formas de curvas com pontos de inflexão variáveis. Por isso, sempre existe a possibilidade de que um novo modelo possa apresentar um melhor desempenho em termos de convergência e interpretação biológica dos parâmetros.

Dentro do contexto, o presente trabalho teve por objetivo, em primeiro momento, propor modelos bicompartimentais e em seguida identificar entre esses (propostos) e os

utilizados na literatura, aquele que melhor descreve a curva cinética de produção de gases pela técnica *in vitro* semiautomática de cinco genótipos de mandioca.

2 MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Dados Utilizados

Os genótipos foram cultivados e colhidos na Embrapa Semiárido, em Petrolina-PE (09°23'34"S, 40°30'28"O), Brasil, região com 376m de altitude, pluviosidade anual média de 400 mm, clima tropical semiárido tipo BshW (classificação Köppen) com curta estação chuvosa no verão e temperatura mínima média de 25°C. Os horários de leituras da produção de gases foram de 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 17, 20, 24, 28, 32, 48, 72, e 96 horas, após o início do processo de fermentação *in vitro* realizada na Universidade Federal de Minas Gerais.

O delineamento experimental utilizado foi o de blocos ao acaso, com três repetições e os tratamentos foram constituídos de cinco genótipos de mandioca: Brasília, Engana Ladrão, Dourada, Gema de Ovo e Amansa Burro.

2.2 Modelos propostos

Quando o crescimento apresenta um comportamento característico de forma a identificar etapas, as quais permitem dividir a curva em vários estágios, torna-se necessário adotar modelos de crescimento multicompartimentais, por considerarem parâmetros exclusivos para cada compartimento. Recentemente, dois métodos promissores foram propostos com objetivo de generalizar (reunir) os modelos de crescimento bem estabelecidos na literatura e adicionalmente produzir (gerar) novos modelos potencialmente úteis, por exemplo, no ajuste à cinética da produção cumulativa de gases. Esses métodos, separadamente, foram concebidos por meio de uma equação diferencial geral (SANTOS *et al.*, 2018) e uma função "geradora" que age "combinando"

modelos não lineares existentes (SANTOS *et al.*, 2019a). A ideia de combinar modelos de crescimento não lineares tem recebido considerável atenção na literatura. Essa ideia foi, originalmente, trilhada por Schofield, Pitt e Pell (1994) ao propor o modelo LB (combinação de dois modelos logísticos) para estudar a cinética de produção de gases *in vitro* com base no pressuposto de que a taxa de produção desse foi afetada pela massa microbiana e o nível do substrato. Assim, os modelos propostos neste trabalho foram desenvolvidos a partir de Santos *et al.* (2019a) resultantes da combinação dos modelos Gompertz ($\alpha e^{-e^{1-k(t-\lambda)}} + \varepsilon$), Logístico ($\alpha\{1 + e^{2-4(t-\lambda)}\}^{-1} + \varepsilon$) e Von Bertalanffy ($\alpha\{1 - \beta e^{-kt}\}^3 + \varepsilon$) expressos por:

$$W(t) = \alpha_1\{1 - \beta_1 e^{-k_1 t}\}^3 + \alpha_2\{1 - \beta_2 e^{-k_2 t}\}^3 \quad (1)$$

$$W(t) = \alpha_1\{1 - \beta_1 e^{2-4k_1(t-\lambda)}\}^{-1} + \alpha_2 e^{-e^{1-k_2(t-\lambda)}} \quad (2)$$

denominados, respectivamente, Von Bertalanffy-Von Bertalanffy Bicompartimental (VVB) e Logístico-Gompertz Bicompartimental (LGB). Nesses modelos: $W(t)$ é o volume acumulado (mL) no tempo t ; α , volume de gás correspondente a completa digestão do substrato (mL); α_1 é o volume de gás produzido a partir da fração de rápida digestão dos carboidratos não fibrosos (CNF); α_2 é o volume de gás produzido a partir da fração de lenta degradação dos carboidratos fibrosos (CF); β_1 e β_2 são parâmetros de forma, sem interpretação biológica; k , taxa específica de produção de gás; k_1 é a taxa de degradação da fração de rápida digestão (CNF); k_2 é a taxa de degradação da fração B2 (CF); λ , tempo de colonização das bactérias; t , o tempo de fermentação; e , exponencial; e ε , é o erro aleatório associado distribuído normalmente com média zero e variância constante.

A partir de agora vamos denominar os modelos em suas versões simples (um compartimento) e duplo (dois compartimentos), nessa ordem, por unicompartmentais e bicompartimentais. Por exemplo, os modelos Gompertz e Logístico serão chamados Gompertz unicompartmental (GU) e Logístico unicompartmental (LU). Portanto, a cinética da produção cumulativa dos gases foi ajustada utilizando-se os modelos propostos (VVB e LGB) e os modelos Gompertz e Logístico, em suas versões uni e bicompartimentais,

respectivamente, descritos por Wang *et al.* (2011) e Shofield *et al.* (1994). As expressões para os modelos Gompertz bicompartimental (GB) e LB, de acordo com esses autores, são dadas por

$$W(t) = \alpha_1 \{1 - e^{2-4k_1(t-\lambda)}\}^{-1} + \alpha_2 \{1 - e^{2-4k_2(t-\lambda)}\}^{-1} + \varepsilon \quad (3)$$

$$W(t) = \alpha_1 e^{-e^{1-k_1(t-\lambda)}} + \alpha_2 e^{-e^{1-k_2(t-\lambda)}} + \varepsilon, \quad (4)$$

Respectivamente.

2.3 Estimação dos parâmetros dos modelos não lineares

Posteriormente, as estimativas dos parâmetros de cinética dos diferentes modelos não lineares foram obtidas por meio do método de mínimos quadrados, usando o processo iterativo de Gauss Newton por meio da função Nonlinear Least Squares do pacote *stats* da ferramenta computacional R versão 3.5.1 (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2018).

2.4 Critérios para seleção de modelos

Os modelos matemáticos foram submetidos aos seguintes critérios de seleção: coeficiente de determinação ajustado (R_{aj}^2), quadrado médio do resíduo (QMR), desvio médio absoluto (DMA), critério de informação de akaike (AIC) e critério de informação de bayesiano (BIC), definidos, respectivamente, como:

$$R_{aj}^2 = R^2 - [(p - 1)/(n - p)](1 - R^2), \quad (5)$$

$$DMA = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / (n - p), \quad (6)$$

$$QMR = \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| / n, \quad (7)$$

$$AIC = n + n \log(2\pi) + n \log(SQ_{res}/n) + 2(p + 1), \quad (8)$$

$$BIC = n + n \log(2\pi) + n \log(SQ_{res}/n) + (p + 1) \log n, \quad (9)$$

em que, SQ_{res} é a soma de quadrados dos resíduos definida por $SQ_{res} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$; y_i é o volume observado; \hat{y}_i o volume estimado (previsão) de y_i ; n o número de observações e p o número de parâmetros livres do modelo. Portanto, o modelo mais indicado para ajuste é aquele que apresentar o maior valor para R_{aj}^2 e os menores valores para QMR, DMA, AIC e BIC.

2.5 Análise de resíduo

Além de checar a adequação do ajuste é importante fazer uma análise dos resíduos para verificar os pressupostos do modelo, geralmente desprezada na maioria dos estudos de curvas de crescimento. Podem-se utilizar métodos gráficos para verificar os pressupostos do modelo ou testes tradicionais como Shapiro-Wilk (normalidade), Durbin-Watson (independência) e Breusch-Pagan (homocedasticidade).

2.6 Análise de agrupamento

Em uma etapa seguinte os dados foram submetidos à análise de agrupamento. Os modelos foram agrupados considerando os avaliadores de qualidade de ajuste como variáveis, a fim de identificar aqueles mais próximos quanto ao seu desempenho no ajuste aos dados. Para isso, foi utilizado a distância Euclidiana média e posteriormente utilizou-se o índice de Rand ajustado (HUBERT; ARABIE, 1985) para determinar o ponto de corte.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As curvas de produção cumulativa de gases obtidas a partir dos dados observados e ajustadas aos genótipos de mandioca para os modelos podem ser vistas nas Figuras 1 e 2.

As curvas de produção de gases, comumente, apresentam forma sigmóide, distinguindo-se três estágios a saber: estágio inicial com lenta produção de gases, estágio exponencial de rápida produção de gases e por fim estágio assintótica com diminuição na taxa de produção de gases até alcançar o valor zero. Os modelos GB, VVB, LB e LGB, apresentaram bons ajustes a todos os estágios do processo fermentativo dos genótipos, enquanto os modelos GU e LU, não apresentaram bons ajustes na fase assintótica, em que a produção de gases foi subestimada. Segundo Üçkardeş e Efe (2014) um mesmo modelo pode apresentar, concomitantemente, baixo e alto desempenho quando da utilização de genótipos de uma mesma espécie, ou quando da utilização de diferentes substratos. Schofield, Pitt e Pell (1994), relataram que os modelos bicompartimentais proporcionam excelentes ajustes aos dados para descrever os perfis de produção de gás em comparação aos unicompartimentais.

Figura 1 – Curvas de produção cumulativa de gases dos cinco genótipos, ao longo do tempo de incubação, a partir dos dados observados e ajustados pelos modelos Brasília, Engana Ladrão e Dourada

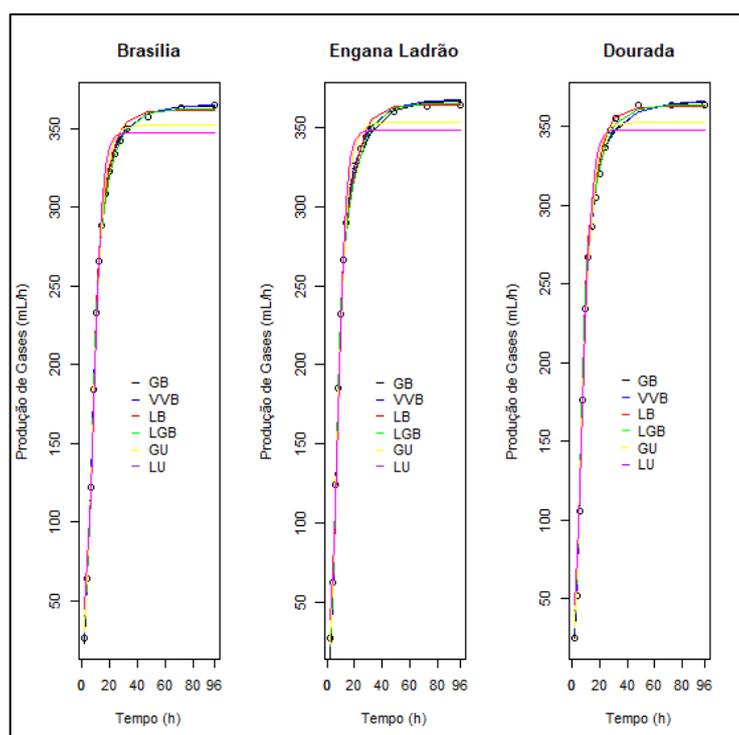
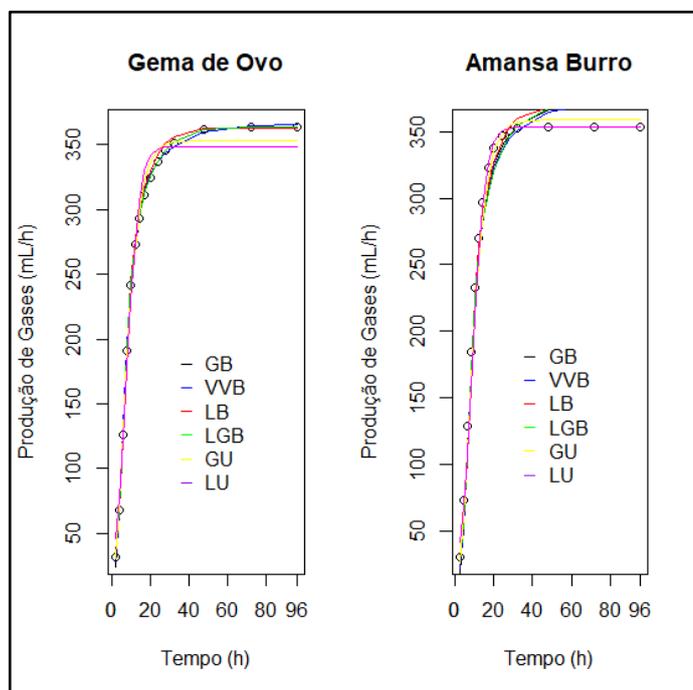


Figura 2 – Curvas de produção cumulativa de gases dos cinco genótipos, ao longo do tempo de incubação, a partir dos dados observados e ajustados pelos modelos Amansa Burro e Gema de Ovo



Além de checar a adequação do ajuste pelas Figuras 1 e 2, é importante fazer uma análise dos resíduos para verificar os pressupostos do modelo. Se tais considerações são ignoradas no processo de ajuste, pode ocorrer, a obtenção de estimativas viesadas (PASTERNAK e SHALEV, 1994) e a subestimação das variâncias dos parâmetros (SOUZA, 1998).

Assim, em todas as situações estudadas para o modelo VVB, os resíduos estimados apresentaram normalidade, independência e homocedasticidade, ou seja, todos os pressupostos sobre os resíduos para os tratamentos foram atendidos (p -valor $> 0,05$). Já para os demais modelos pelos resultados apresentados observa-se que não há evidências para rejeitar a hipótese de normalidade. Porém, há evidências para rejeitar a hipótese de independência dos erros para os modelos LB, GU, LU e LGB e a violação da suposição de homocedasticidade dos resíduos para os modelos GB e GU.

A constatação das pressuposições para os modelos de regressão é um passo muito importante, pois, uma vez que essas não forem atendidas, julga-se que o modelo não é adequado e este desvio deve ser corrigido ou considerado no modelo (SANTOS, 2019a).

Os modelos estudados obtiveram 100% de convergência, todos os parâmetros cinéticos de degradação estimados pelos diferentes modelos foram significativos a 95% e os demais avaliadores de qualidade de ajuste estão apresentados na Tabela 3.

As estimativas dos parâmetros α_1 e α_2 para os modelos em estudo, foram próximas para os modelos VVB, LB e LGB. Porém nota-se uma pequena superioridade dos modelos Gompertz e logístico unicompartmentais para $\hat{\alpha}_1$ e uma sub e superestimação de $\hat{\alpha}_2$ e $\hat{\alpha}_1$, respectivamente, do modelo GB para todos os genótipos. O volume total final $W(t)$ de gás é produzido pelas taxas de digestão rápida e lenta, ou seja, o somatório dos CFN e CF. O modelo VVB foi o que apresentou a maior média de volume total $W(t)$ de gás, seguido dos modelos GB, LGB, LB, GU e LU, para todos genótipos.

Mizubuti *et al.* (2011), ao comparar diferentes coprodutos da cadeia produtiva do biodiesel, verificaram que a torta de girassol foi o alimento que apresentou menor volume total $W(t)$ da produção cumulativa de gás. Já Santos (2019a), verificou em seu estudo menor volume total $W(t)$ para o acesso 30333 de amendoim forrageiro. Aragadvay-Yungán *et al.* (2015) trabalharam com silagem de girassol como volumoso único, ou misturada à silagem de milho nas proporções de 25, 50 e 75% e verificaram maior produção de gás total para a silagem de milho.

A maior parte de $W(t)$ produzido em nosso estudo foi resultante dos compostos de CNF, pelo simples fato de que os modelos bicompartimentais dividem a produção total de gases em dois compartimentos, sendo uma taxa de digestão rápida e uma taxa de digestão lenta. De acordo com Mertens (1997), os CNF apresentam digestão rápida e completa no trato gastrointestinal enquanto que os CF apresentam digestão lenta e incompleta. Conforme Nogueira, Maurício e Gonçalves (2006) o volume de gases que é produzido depende de sua composição, isto é, quanto maior for os teores de amido e de fibra, menor e maior serão as produções de gases, respectivamente.

As estimativas para λ (período de latência) variaram de 1,43 a 3,50 h, com o genótipo Dourada utilizando o modelo GU apresentando o menor valor e o genótipo Engana Ladrão para o modelo LB, o maior. Uma outra informação interessante é que as estimativas do parâmetro k_1 são maiores do que k_2 para todos os genótipos, indicando que o desenvolvimento dos genótipos é mais acelerado na primeira fase de crescimento. Este fato corrobora com o importante aspecto da teoria em que os CNF degradam mais rapidamente que os CF (SCHOFIELD, PITT e PELL, 1994). Ricacheski *et al.* (2017) e Santos, (2019b) fizeram uso dessa recomendação em seus estudos.

Dos Santos Luz *et al.* (2014), em avaliação da produção de gases in vitro de diferentes alimentos (farelo de soja e raiz de mandioca, e farelo de trigo e mandioca) para ruminantes, encontraram estimativas menores para os parâmetros α_1 , α_2 , k_1 e k_2 e maiores para o parâmetro λ .

Conforme Silva *et al.* (2011), critérios de qualidade de ajuste permitem comparar diferentes modelos e encontrar o mais indicado para ajuste aos dados. Dentre os avaliadores mais utilizados estão o R_{aj}^2 , QMR, DMA, AIC e BIC, (Santos, 2019b; Santos *et al.*, 2018; Emiliano *et al.*, 2014; Silva *et al.*, 2011).

Observando-se os avaliadores de qualidade de ajuste (Tabela 3), pode-se perceber que os resultados foram concordantes na maioria dos casos. Assim, o modelo VVB em geral, obteve os melhores resultados para o R_{aj}^2 , QMR, DMA, AIC e BIC para os genótipos Brasília, Dourada, Gema de Ovo e Amansa Burro, com exceção do modelo LGB que foi melhor para o genótipo Engana Ladrão. Portanto, o modelo VVB obteve as melhores médias para os resultados dos avaliadores de qualidade de ajuste, seguido pelos modelos LGB, GB, LB, GU e LU. Assim sendo, nota-se que, os modelos GU e LU, apresentaram pouca precisão de ajuste.

Estudos anteriores (De Carvalho *et al.* 2016; Wang, Tang e Tan, 2011), mostraram que o uso de modelos unicompartimentais foram inadequados para descrever curvas de alimentos, enquanto que as versões bicompartimentais forneceram excelentes ajustes aos dados. Uma possível interpretação é o fato dos alimentos serem de composição

nutricional bem heterogênea, com frações de rápida e lenta digestão, que são digeridas diferentemente pela microbiota ruminal (SCHOFIELD, PITT e PELL, 1994).

Tabela 3 - Valores estimados dos parâmetros α_1 , α_2 , k_1 , k_2 e λ , coeficiente de determinação ajustado (R_{aj}^2), quadrado médio do resíduo (QMR), desvio médio absoluto (DMA), critério de informação de akaike (AIC) e critério de informação de bayesiano (BIC) para o modelos ajustados em dados de genótipos de mandioca

Genótipos	Modelos	Parâmetros					Avaliadores				
		$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	\hat{k}_1	\hat{k}_2	$\hat{\lambda}$	R_{aj}^2	QMR	DMA	AIC	BIC
Brasília	GB	294.31	70.31	0.27	0.08	2.10	0.9998	4.04	1.30	69.45	73.70
	VVB	251.57	113.37	0.26	0.07		0.9999	2.61	1.05	63.30	68.26
	LB	247.95	113.55	0.12	0.04	2.80	0.9993	13.07	2.50	87.05	91.30
	LGB	231.23	131.20	0.12	0.11	2.49	0.9997	5.01	1.56	72.66	76.91
	GU	352.03		0.21		1.52	0.9950	73.80	6.70	111.73	114.57
	LU	347.09		0.31		1.69	0.9870	192.86	11.10	126.158	128.98
Engana Ladrão	GB	278.62	88.81	0.31	0.08	2.71	0.9994	12.22	2.22	86.03	90.28
	VVB	230.87	136.67	0.30	0.08		0.9996	7.73	1.77	79.57	84.53
	LB	237.58	126.44	0.14	0.04	3.50	0.9994	12.73	2.53	86.64	90.89
	LGB	225.51	139.89	0.14	0.11	3.11	0.9997	4.85	1.31	72.17	76.42
	GU	353.67		0.22		1.98	0.9931	109.79	8.30	117.69	120.53
	LU	348.40		0.33		2.22	0.9839	255.39	12.44	130.36	133.19
Dourada	GB	303.84	62.15	0.26	0.07	1.96	0.9997	5.17	1.48	73.14	77.39
	VVB	260.05	106.29	0.25	0.06		0.9998	3.56	1.27	67.94	72.89
	LB	257.25	105.43	0.12	0.04	2.65	0.9994	11.56	2.25	85.20	89.44
	LGB	242.72	120.82	.12	0.11	2.36	0.9997	4.88	1.46	72.26	76.51
	GU	352.94		0.21		1.43	0.9952	70.22	6.64	110.99	113.82
	LU	348.01		0.31		1.61	0.9877	179.10	10.67	125.04	127.87
Gema de Ovo	GB	304.99	61.05	0.27	0.07	2.01	0.9997	5.62	1.53	74.38	78.63
	VVB	260.88	105.46	0.27	0.06		0.9998	3.48	1.23	67.60	72.56
	LB	259.50	103.34	0.12	0.04	2.67	0.9994	11.01	2.17	84.45	88.72
	LGB	245.65	118.02	0.12	0.11	2.39	0.9997	4.47	1.41	70.97	75.22
	GU	353.24		0.22		1.50	0.9951	70.34	6.48	111.02	113.85
	LU	348.51		0.32		1.66	0.9877	177.79	10.73	124.93	127.76
Amansa Burro	GB	293.36	78.80	0.26	0.08	2.43	0.9998	3.95	1.40	69.08	73.33
	VVB	261.70	111.09	0.24	0.06		0.9998	3.72	1.31	68.60	73.56
	LB	242.78	126.04	0.12	0.04	3.22	0.9992	17.43	2.77	91.36	95.61
	LGB	223.19	146.62	0.12	0.11	2.83	0.9996	6.99	1.72	77.66	81.91
	GU	359.32		0.20		1.82	0.9952	78.36	6.87	112.64	115.47
	LU	353.71		0.30		2.06	0.9867	216.48	11.77	1277.88	130.72

Porém, quando se considera um grande número de critérios de ajuste a definição do melhor modelo pode se tornar um processo complicado, porque pode acontecer de um mesmo modelo apresentar um alto desempenho para um critério de ajuste, enquanto para outro poderá ser baixo (SANTOS, 2019b). Uma saída para melhorar este tipo de

problema seria a aplicação de métodos multivariados, por exemplo, análise de agrupamento, com o objetivo de agrupar modelos semelhantes de maneira simultânea em relação a todos os critérios estudados (SILVA *et al.*, 2011).

Observa-se na Tabela 4 que de acordo com os avaliadores de qualidade de ajuste o agrupamento teve diferentes resultados para distintos genótipos. Para a maioria dos genótipos a análise de agrupamento segundo os avaliadores foi concordante com os critérios (Tabela 3). Em três destes genótipos (Brasília, Engana Ladrão e Dourada), os modelos VVB e LGB diferiu dos demais, ficando isolado em um grupo. Para outros dois genótipos (Gema de Ovo e Amansa Burro), o modelo VVB e LGB diferiu dos demais, ficando juntos em um grupo. Os modelos GU e LU acabaram isolados em um grupo nos agrupamentos.

Tabela 4 – Resultados dos agrupamentos dos modelos, utilizando avaliadores de qualidade de ajuste para os cinco genótipos

Genótipos	Avaliadores					
	R^2_{aj}	Grupo 1	QMR Grupo 2	DMA Grupo 3	AIC Grupo 4	BIC Grupo 5
Brasília		VVB	GB e LGB	LB	GU	LU
Engana Ladrão		LGB	VVB	GB e LB	GU	LU
Dourada		VVB	GB e LGB	LB	GU	LU
Gema de Ovo		VVB e LGB	GB	LB	GU	LU
Amansa Burro		VVB e GB	LGB	LB	GU	LU

4 CONCLUSÃO

Os modelos VVB e LGB, por apresentarem bons avaliadores de qualidade, foram os que apontaram o melhor ajuste para descrever o acúmulo de gases dos genótipos Brasília, Engana Ladrão, Dourada, Gema de Ovo e Amansa Burro. Portanto, recomenda-se para o estudo de crescimento da cinética de gases em forrageiras em programas de melhoramento genético de acordo com a metodologia e condições em que foi desenvolvido o presente estudo.

AGRADECIMENTOS

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

REFERÊNCIAS

ARAGADVAY-YUNGÁN RG, RAYAS AMOR AA, HEREDIA-NAVA D, ESTRADA-FLORES JG, MARTÍNEZ-CASTAÑEDA FE, ARRIAGA-JORDÁN C.M. Evaluación *in vitro* del ensilaje de girasol (*helianthus annuus* L.) solo y combinado con ensilaje de maíz. **Revista Mexicana de ciencias pecuarias**, Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias, México. 2015;6(3):315–327.

BEUVINKJMW, KOGUT J. Modeling gas-production kinetics of grass silages incubated with buffered ruminal fluid. **Journal of Animal Science**, Champaign. 1993;71(4):1041-1046.

BUDEL JDC, RAMOS ADO, ARAÚJO GS, LIMA ACS, MARTORANO LG, NAHÚM BDS, JUNIOR L. Fermentation kinetics and ruminal parameters of animals fed diets containing Brazil nut cake inclusion levels. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina. 2017;38(3):1595-1605.

DA CRUZ PG, DE FIGUEIREDO MP, PEREIRA LGR, BERGAMASCHI KB, RODRIGUES CS, DE SOUZA RECH CL. Fractionation and kinetics of *in vitro* ruminal fermentation of the carbohydrates of five sugar-cane varieties. **Ciência Animal Brasileira**, Goiânia. 2010;11(4):784-793.

DE CARVALHO P, DA SILVA CABRAL L, DE PAULA NF, DE OLIVEIRA IS, PACHECO RDL, FERRO MM, CAMARGO KDV. *In vitro* kinetic parameters of marandu palisadegrass associated with nonfiber carbohydrates. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina. 2016;37(5):3253-3264.

DOS SANTOS LUZ Y, DE FIGUEIREDO MP, OLIVEIRA FM, BERNARDINO FS, DE JESUS NOVAES E, ROSEIRA J PS. *In vitro* ruminal fermentation kinetic of diets containing forage cactus with urea and different starch sources. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina. 2014;35(3):1501-1514.

EMILIANO PC, VIVANCO MJF, DE MENEZES FS. Information criteria: How do they behave in different models?. **Computational Statistics & Data Analysis**, Amsterdam. 2014;69:141-153.

FERRO MM, CASTRO WR, ZANINE ADM, SOUZA AL. Kinetics of sugarcane silage with dehydrated barley residue *in vitro* ruminal fermentation. **Archivos de zootecnia**, 2017;66(254): 237-242.

FRANCE J, DIJKSTRA J, DHANOA MS, LÓPEZ S, BANNINK A. Estimating the extent of degradation of ruminant feeds from a description of their gas production profiles observed *in vitro*: derivation of models and other mathematical considerations. **British Journal of Nutrition**. 2000;83(2): 143–150.

FRANCE J, DHANOA MS, THEODOROU MK, LISTER SJ, DAVIES DR, ISAC D. A model to interpret gas accumulation profiles associated with in vitro degradation of ruminant feeds. **Journal of Theoretical Biology**, London. 1993;163(1):99-111.

FRANCE J, LOPEZ S, KEBREAB E, BANNINK A, DHANOA MS, DIJKSTRA J. A general compartmental model for interpreting gas production profiles. **Animal Feed Science and Technology**, Amsterdam. 2005;123:473-485.

GROOT JCJ, CONE JW, WILLIAMS BA, DEBERSAQUES FMA, LANTINGA EA. Multiphasic analysis of gas production kinetics for in vitro fermentation of ruminant feeds. **Animal Feed Science and Technology**, Amsterdam. 1996;64(1):77-89.

HUBERT L, ARABIE P. Comparing partitions. **Journal of classification**, Springer. 1985;2(1):193-218.

KANG S, WANAPAT M. Rumen-buffering capacity using dietary sources and in vitro gas fermentation. **Animal Production Science**. 2018;58(5):862-870.

MENGISTU G, HENDRIKS WH, PELLIKAAN WF. In vitro methane and gas production with inocula from cows and goats fed an identical diet. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, London. 2018;98(4):1332-1338.

MERTENS DR. Creating a system for meeting the fiber requirements of dairy cows. **Journal of Dairy Science**, Champaign. 1997;80(7):1463-1481.

MIZUBUTI, Ivone Yurika *et al.* Cinética de fermentação ruminal in vitro de alguns co-produtos gerados na cadeia produtiva do biodiesel pela técnica de produção de gás. **Semina: Ciências Agrárias**. 2011;32(supl 1): 2021-2028.

NASCIMENTO TVC, BEZERRA LR, MENEZES D, LUCENA ARF, QUEIROZ MÁ, TRAJANO JS, OLIVEIRA RL. Condensed tannin-amended cassava silage: fermentation characteristics, degradation kinetics and in vitro gas production with rumen liquor. **The Journal of Agricultural Science**, Cambridge, Inglaterra. 2018;156(1):83-91.

NOGUEIRA U, MAURÍCIO R, GONÇALVES L. Comparison among substrates with different soluble carbohydrates concentration using the in vitro semi-automatic gas production technique. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, Belo Horizonte. 2006;58(4):633-641.

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**. 1979; 92(2): 499-503.

PASTERNAK H, SHALEV B. The effect of a feature of regression disturbance on the efficiency of fitting growth curves. **Growth, development, and aging: GDA**. 1994;58(1):33-39.

PERETTI J, HENRIQUE DS, MAYER LRR, MILITÃO ER, SCHIMITZ R, BOGER DT, RÖSLER JA. Chemical composition and ruminal degradability of white oat ("Avena sativa" L.) cv. IPR126 under different nitrogen levels. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**. 2017;18(1): 89-102.

R Development Core Team. R: A language and environment for statistical computing. **Vienna: R Foundation for Statistical Computing**, Vienna, 2018. Disponível em: <http://www.r-project.org>.

RICACHESKI ST, HENRIQUE DS, MAYER LRR, OLIVEIRA JGD, ROSLER JÁ, FLUCK AC. Chemical composition and ruminal degradation kinetics of white oat (avena sativa l.) ipr 126. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**, SciELO Brasil. 2017;18(1): 50–61.

SANTOS, A. L. P., MOREIRA, G. R., GOMES-SILVA, F., DE BRITO, C. C. R., DA COSTA, M. L. L., PEREIRA, L. G. R., ... & CUNHA FILHO, M. Generation of models from existing models composition: An application to agrarian sciences. **PloS one**. 2019a; 14(12): 1-12.

SANTOS ALP. **Métodos geradores de modelos de crescimento e decrescimento aplicados às ciências agrárias** [thesis]. Recife: Universidade Federal Rural de Pernambuco/UFRPE; 2019b.70p.

SANTOS ALP, MOREIRA GR, GOMES-SILVA F, DE BRITO CCR, COSTA ML, PEREIRA LGR, CUNHA FILHO M. Method to generate growth and degrowth models obtained from differential equations applied to agrarian sciences. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina. 2018;39(6):2659–2672.

SCHOFIELD P, PITT RE, PELL AN. Kinetics of fiber digestion from in vitro gas production. **Journal of Animal Science**, Champaign. 1994;72(11):2980-2991.

SILVA NAM, LANA AMQ, SILVA FF, SILVEIRA FG, BERGMANN JAG, SILVA MA, TORAL FLB. Selection and multivariate classification of nonlinear growth model for Nelore cattle. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, Belo Horizonte. 2011;63(2):364-371.

SOUZA, G. d. S. Introdução aos modelos de regressão linear e não-linear. 1 ed. [S.l.]: **EMBRAPA-SPI**, Brasília. 1998.

THEODOROU MK, WILLIAMS BA, DHANOA MS, MCALLAN AB, FRANCE J. A simple gas production method using a pressure transducer to determine the fermentation kinetics of ruminant feeds. **Animal feed science and technology**, Amsterdam. 1994;48(3-4):185-197.

ÜÇKARDEŞ F, EFE E. Investigation on the usability of some mathematical models in in vitro gas production techniques. **Slovak Journal of Animal Science**, Slovakia. 2014;47(3):172-179.

VELHO JP, MÜHLBACH PRF, GENRO TCM, BARCELLOS JO, NETO JB, DA SILVA RSM. Mathematical models for adjustment of in vitro gas production at different incubation times and kinetics of corn silages. **Semina: Ciências Agrárias**, Londrina. 2014;35(4Supl):2531-2540.

VIEIRA DA. **Estudo da dinâmica da cinética de produção de gases in vitro para diferentes tipos de alimentos**. [dissertation]. Goiânia: Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano/IFG; 2018.46 p.

WANG M, TANG S, TAN Z. Modeling in vitro gas production kinetics: Derivation of logistic-exponential (le) equations and comparison of models. **Animal Feed Science and Technology**, Amsterdam, Elsevier. 2011;165(3-4):137-150.

WANG M, WANG R, TANG SX, TAN ZL, ZHOU CS, HAN XF, KANG JH. Comparisons of manual and automated incubation systems: Effects of venting procedures on in vitro ruminal fermentation. **Livestock Science**, Suwon, Coreia do Sul. 2016;184:41-45.

CONTRIBUIÇÕES DE AUTORIA

1 – André Santos

Pós-Doutorado em andamento em Ciência da Computação pela Universidade Federal Rural de Pernambuco. Doutor e Mestre em Biometria e Estatística Aplicada pela Universidade Federal Rural de Pernambuco e Graduação em Bacharelado em Estatística. <https://orcid.org/0000-0002-7703-2102> - andrefensor@hotmail.com

Contribuição: curadoria de dados, investigação, escrita – rascunho original

3 – Guilherme Rocha Moreira

Possui graduação em Engenharia Agrônoma, Especialização em Gestão de Políticas Públicas, Mestrado e Doutorado em Zootecnia pela Universidade Federal de Minas Gerais. Atualmente é professor Associado I do Departamento de Estatística e Informática da Universidade Federal Rural de Pernambuco.

<https://orcid.org/0000-0001-6344-1151> - guirocham@gmail.com

Contribuição: metodologia, supervisão, conceituação, administração do projeto

2 – Frank Gomes Silva

Possui graduação em Matemática, Especialização em Ensino de Matemática, Mestrado em Biometria e Estatística Aplicada e Doutorado em Matemática Computacional pela Universidade Federal de Pernambuco. Atualmente é Professor Adjunto IV do Departamento de Estatística e Informática e do Programa de Mestrado e Doutorado em Biometria e Estatística Aplicada na Universidade Federal Rural de Pernambuco. É líder do grupo de pesquisa modelagem estocástica, simulação e aplicação e tem trabalhado como revisor de periódicos como Journal of Data Science, Anais da Academia Brasileira de Ciências, Hacettepe Journal of Mathematics and Statistics, dentre outros.

<https://orcid.org/0000-0002-3481-3099> - franksinatrags@gmail.com

Contribuição: investigação, supervisão, escrita – revisão e edição, metodologia

4 – Cícero Carlos Ramos de Brito

Pós-Doutor em Biometria e Estatística Aplicada pela Universidade Federal Rural de Pernambuco, Doutorado em Biometria e Estatística Aplicada, Mestre em Estatística pela Universidade Federal de Pernambuco, Mestre em Biometria e Estatística Aplicada pela, Especialista em Matemática Comercial e Financeira, Especialista em Matemática pela, Especialista em Matemática, Tecnólogo em Serviços Jurídicos e Notariais pelo Centro Universitário Internacional, Bacharel em Administração, Bacharel em Ciências Contábeis, Tecnólogo em Gestão Financeira, Licenciado em Matemática, Licenciado em Ciências com habilitação em Matemática. Atualmente é Professor do Instituto Federal de Pernambuco. <https://orcid.org/0000-0002-3699-5156> - cicerocarlosbrito@yahoo.com.br

Contribuição: investigação, supervisão, escrita – revisão e edição, metodologia

5 – Maria Lindomárcia Leonardo da Costa

Possui graduação, mestrado e doutorado em Zootecnia, sendo o último pela Universidade Federal de Minas Gerais. Atualmente é professora Adjunta IV do Departamento de Zootecnia da Universidade Federal da Paraíba.

<https://orcid.org/0000-0003-1345-0169> - lindomarciacosta@gmail.com

Contribuição: curadoria dos dados, análise formal, visualização

6 – Moacyr Cunha Filho

Possui graduação em Engenharia Civil, especialização em Engenharia e Segurança do Trabalho, Didática das Disciplinas Profissionalizantes, Administração Pública e Tecnologia da Informação e Inovação; Mestrado em Estatística Aplicada e Biometria; Doutorado em Ciência do Solo pela Universidade Federal Rural de Pernambuco. Atua desde 2008 junto ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia como professor formador, conteudista, revisor e palestrante do Curso de Licenciatura em Matemática. Atualmente é professor adjunto da Graduação e da Pós Graduação do Departamento de Estatística e Informática da Universidade Federal Rural de Pernambuco e Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Biometria e Estatística Aplicada pela Universidade Federal Rural de Pernambuco.

<https://orcid.org/0000-0002-3466-8143> - moacyr.cunhafo@ufrpe.br

Contribuição: validação, visualização, curadoria dos dados

7 – Eloísa Oliveira Simões Saliba

Técnico em química, Graduação em Química, Mestrado em Zootecnia e Doutorado em Ciência Animal pela Universidade Federal de Minas Gerais. Pós Doutorado em Carboidratos e Ligninas, e em Microscopia de parede celular e Análises de ligninas pela Minnessota University. Especialista em Cromatografia e Espectroscopia de Massa pelo

Instituto Internacional de Cromatografia. Atualmente é professor Titular da Universidade Federal de Minas Gerais. Líder do grupo de pesquisa de utilização de indicadores nutricionais e estudo de ligninas de resíduos agroindustriais e forrageiras tropicais. Coordenadora do Laboratório de Nutrição Animal do DZOO da UFMG.

<https://orcid.org/0000-0003-4607-8404> - saliba@vet.ufmg.br

Contribuição: curadoria dos dados, análise formal

8 – Marianne Caron Oliveira

Possui graduação em Zootecnia pela Universidade de São Paulo. Atualmente é aluna do curso de Mestrado do programa de Pós-graduação em Zootecnia da Universidade Federal de Minas Gerais.

<https://orcid.org/0000-0001-8404-2715> - mariannearon9@yahoo.com

Contribuição: curadoria dos dados, software

9 – Nélio Cunha Gonçalves

Médico Veterinário, Mestre em Zootecnia, ambos pela Universidade Federal de Minas Gerais. É Doutorando no Programa de Pós-graduação em Bioquímica e Imunologia do Instituto de Ciências Biológicas da Universidade Federal de Minas Gerais. É docente nos cursos de graduação em Medicina Veterinária e Biomedicina da Escola Superior São Francisco de Assis, porém, atualmente encontra-se em licença para capacitação. É vinculado ao Laboratório de Genética Bioquímica, como doutorando do Programa de Pós-graduação em Bioquímica e Imunologia do Instituto de Ciências Biológicas da Universidade Federal de Minas Gerais. É bolsista de Doutorado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.

<https://orcid.org/0000-0003-2327-4795> - goncalvesveter@gmail.com

Contribuição: curadoria dos dados, software, escrita-rascunho original

COMO CITAR ESTE ARTIGO

SANTOS, A. L. P.; MOREIRA, G. R.; GOMES-SILVA, F.; BRITO, C. C. R.; COSTA, M. L. L.; CUNHA FILHO, M.; SALIBA, E. O. S.; OLIVEIRA, M. C.; GONÇALVES, N. C. Propostas de modelos não lineares para ajuste da produção de gases in vitro em diferentes tempos de incubação em genótipos de mandioca. *Ciência e Natura*, Santa Maria, v. 43, e22, p. 1-19, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.5902/2179460X39962>. Acesso em: dia, mês (abreviado), ano.