

1 化学计量学模型预测中国泌乳奶牛瘤胃挥发性脂肪酸组成的精度分析¹

2 毛宏祥^{1,2,3} 任 傲^{2,3} 王 敏^{1,3*} 高凤仙^{2,3*} 张秀敏¹ 马致远¹ 谭支良¹

3 (1.中国科学院亚热带农业生态研究所, 长沙 410125; 2.湖南农业大学动物科学技术学院,

4 长沙 410128; 3.湖南畜禽安全生产协同创新中心, 长沙 410128)

5 摘 要: 本研究旨在评估化学计量学模型预测中国泌乳奶牛瘤胃挥发性脂肪酸(VFA)组成
6 的精度, 分析影响模型预测精度的原因。本研究选择了3个经典的奶牛瘤胃VFA模型, 分
7 别为MUR模型、DIJ模型和BAN模型。试验数据来自我国主要科研团队的18篇论文, 包
8 括14篇SCI、3篇中文核心期刊和1篇未见刊的英文文章, 论文数据含动物饲粮、体重、
9 干物质采食量、饲料添加剂、VFA各组分比例。采用预测误差均方(MSPE)和一致性相关系
10 数(CCC)2种分析方法对3个经典的奶牛瘤胃VFA模型的估算精度进行评估分析。结果表明:
11 BAN模型乙酸比例估算精度最高(决定系数=0.140, $P=0.007$), 预测误差均方根为6.8%,
12 误差主要来自整体偏差的偏离(47.8%)。3个模型无法预测丙酸、丁酸、其他酸比例。总之,
13 BAN模型预测乙酸比例的精度是3个模型中最高的, 但预测精度仍然偏低, 误差来源于整
14 体偏差的偏离, 迫切需要利用更多数据建立适合我国国情的VFA化学计量学预测模型。

15 关键词: 挥发性脂肪酸; 模型; 预测误差均方; 一致性相关系数; 泌乳奶牛
16 中图分类号: S823

17 挥发性脂肪酸(volatile fatty acids, VFA)是饲料中碳水化合物经瘤胃微生物发酵的产物,
18 是维持反刍家畜生命和生产的主要能量来源(提供其能量需要量的70%~80%)。VFA包括乙
19 酸、丙酸、丁酸和其他短链脂肪酸, 其中乙酸、丙酸和丁酸占瘤胃发酵产生VFA总产量的
20 95%^[1]。乙酸和丁酸是脂肪合成的前体物, 丙酸是反刍家畜糖异生的前体物^[2]。据Brunette

收稿日期: 2017-11-01

基金项目: 国家自然科学基金项目(31561143009, 31472133); 国家科技计划项目
(2016YFD0500504); 现代农业(奶牛)产业技术体系建设专项资金(CARS-36); 中国科
学院青年促进会项目(2016327)

作者简介: 毛宏祥(1991-), 男, 湖北襄阳人, 硕士研究生, 从事反刍家畜营养研究。E-mail:
HongXiangmao@126.com

*通信作者: 王 敏, 副研究员, E-mail: mwang@isa.ac.cn; 高凤仙, 教授, 硕士生导师,
E-mail: gaofx1964@163.com

21 等^[3]和 Seymour 等^[4]报道, 瘤胃内 VFA 比例影响奶牛的产奶量和乳蛋白与乳脂含量, 对维持奶
22 牛正常能量代谢至关重要。

23 奶牛瘤胃内 VFA 比例的数学模型包括经验模型和机制模型, 其中机制模型也称化学计
24 量学模型。相比经验模型, 化学计量学模型包括饲粮各化学组分在瘤胃内的有效降解率和
25 VFA 各组分间的转化系数, 能更好地反映饲粮各化学组分与瘤胃内 VFA 组成的关系。因此,
26 国外学者提出了利用饲粮各化学组分预测奶牛瘤胃内 VFA 比例的模型^[5-6]。但是, 这些模型
27 估算不同地区和不同年代奶牛瘤胃内 VFA 比例的精度存在较大差异^[7]。目前, 利用该模型
28 来估算我国泌乳奶牛瘤胃内 VFA 比例的研究很少。

29 1982 年, Murphy 等^[8]第 1 次利用 5 类化学组分, 通过无限叠代和最小二乘法构建了国
30 际上首个化学计量学模型 (简称 MUR 模型)。1992 年, Dijkstra 等^[9]在 MUR 模型基础上进
31 一步引入瘤胃内 pH 和 VFA 各组分的吸收速率, 构建了新的模型 (简称 DIJ 模型)。2006 年,
32 Bannink 等^[10]在 DIJ 模型基础上引入 VFA 生成的生化途径, 构建了相应的模型 (简称 BAN
33 模型)。本研究的目的是评估国外经典模型预测我国泌乳奶牛瘤胃内 VFA 比例的精度, 探讨
34 影响模型估算精度的原因。本研究通过检索我国学者发表的研究论文, 整理动物体重、干物
35 质采食量、饲粮组分和 VFA 数据等相关信息, 利用预测误差均方 (mean squared prediction
36 error, MSPE) 和一致性相关系数 (consistent correlation coefficient, CCC) 2 种分析方法评估国
37 际上 3 个经典模型的估算精度, 研究结果将有助于筛选和发展适合预测我国泌乳奶牛瘤胃
38 VFA 的化学计量学模型。

39 1 材料方法

40 1.1 模型选择

41 本研究选用了 3 个经典的反刍家畜瘤胃 VFA 模型, 分别为 MUR 模型^[8]、DIJ 模型^[9]和
42 BAN 模型^[10]。按照 3 个模型所需要的数据要求, 把饲粮分为精料组 (concentrate diet: C 饲
43 粮, 精料比重 $\geq 50\%$) 和粗料组 (rorage diet: R 饲粮, 精料比重 $< 50\%$)。3 个模型需要的
44 共同参数包括: 饲粮 5 大化学组分 (可溶性碳水化合物、淀粉、纤维素、半纤维素和粗蛋白
45 质) 含量、采食量、5 大化学组分瘤胃有效降解率, 瘤胃内 VFA 比例。3 个模型均采用无限
46 叠代和最小二乘法建立了 5 大化学组分 (自变量) 和 VFA 比例 (因变量) 之间的转化系数。

47 1.2 奶牛试验数据

本研究所用中文和英文文章分别通过中国知网和 Web of Science 搜索。搜索关键词为奶牛、研究团队名称和所在机构名称，论文发表时间为 2000-2016 年。搜索团队（机构）为谭支良（中国科学院亚热带农业生态研究所）、王加启（中国农业科学院北京畜牧兽医研究所）、刘建新（浙江大学）、刁其玉（中国农业科学院饲料研究所）、李胜利（中国农业大学）、孟庆翔（中国农业大学）、王洪荣（扬州大学）和朱伟云（南京农业大学），检索所获得的中文文章分别有 10 篇、7 篇、5 篇、16 篇、7 篇、12 篇、2 篇和 2 篇，检索所获得的英文文章分别有 2 篇、12 篇、32 篇、1 篇、19 篇、2 篇、2 篇和 2 篇。在此基础上，仅保留泌乳奶牛饲养试验论文（删除犊牛论文 2 篇），且论文提供动物饲粮、体重、干物质采食量、饲料添加剂、VFA 各组分比例等数据。另外，C 饲粮乙酸比例一般不超过 70%，乙酸比例大于 70% 的论文则删除（1 篇）。满足这些条件的 SCI 论文为 14 篇，中文核心期刊论文为 3 篇，各团队采用论文分别为谭支良 1 篇（Wang 等^[11]）、王加启 7 篇（王吉峰等^[12]、Sun 等^[13]、Yang 等^[14]、Peng 等^[15]、Guo 等^[16]、Pan 等^[17]和 Zhao 等^[18]）、刘建新 2 篇（Wang 等^[19]、Zhang 等^[20]）、李胜利 6 篇（张倩等^[21]、曾银等^[22]、Guo 等^[23]、Sun 等^[24]、Chen 等^[25]、Cao 等^[26]）、和朱伟云 1 篇（Wang 等^[27]）。另外，数据还增加了 1 篇谭支良团队未发表论文。

1.3 奶牛饲粮信息

我国发表的 17 篇和未见刊论文 1 篇中，中文核心期刊根据张丽英^[28]描述的方法测定各种营养成分含量，共 2 篇。13 篓英文论文中有机物（OM）、粗蛋白质（CP）、粗灰分（Ash）和粗脂肪（EE）则参考美国分析化学家协会(AOAC)^[29-30]测定方法，中性洗涤纤维（NDF）和酸性洗涤纤维（ADF）含量参考 Van Soest 等^[31]方法测定。3 篓文章没有报道或者缺失部分饲粮组分信息，则参考《国际反刍动物饲料成分及营养价值表》^[32]和《CNCPS 体系演变模型及饲料成分表》^[33]估算。饲粮可溶性碳水化合物、半纤维素和纤维素通过以下公式^[34]计算：

$$\text{可溶性碳水化合物} = \text{OM} - \text{EE} - \text{淀粉} - \text{NDF} - \text{CP};$$

$$\text{半纤维素} = \text{NDF} - \text{ADF};$$

$$\text{纤维素} = \text{ADF} - \text{酸性洗涤木质素 (ADL)}.$$

1.4 饲粮瘤胃有效降解

选择的模型需要提供饲粮 5 大化学组分的瘤胃有效降解量。饲粮 5 大化学组分在瘤胃中的有效降解量通过瘤胃流通速率、快速降解部分、慢速降解部分的降解量来计算。计算公式^[35]

75 如下：

$$P_t = a + \frac{b}{c+k} (1 - e^{-(c+k)t})。$$

77 式中： P_t 为某化学组分的瘤胃有效降解量(%)； a 为该化学组分的快速降解部分含量(%)；
78 b 为该化学组分的慢速降解部分含量 (%)； c 为该化学组分的瘤胃降解速率 (h^{-1})； k 为该化
79 学组分的瘤胃流通速率 (h^{-1})； t 为时间 (取24 h)。

80 饲粮各化学组分的瘤胃流通速率参考Fox等^[36]建立的模型，计算公式如下：

$$K_{\text{pf}} = [0.38 + (0.022 \times D \times 1000/BW^{0.75}) + 2.0 \times F^2]/100;$$

$$K_{\text{pc}} = [-0.424 + (1.45 \times K_{\text{pf}} \times 100)]/100。$$

83 式中： K_{pf} 为粗饲料的流通速率 (h^{-1})； K_{pc} 为精饲料的流通速率 (h^{-1})； D 为干物质采食
84 量 (kg/d)； $BW^{0.75}$ 为代谢体重 (kg)； F 为粗饲料占饲粮的比例 (%)。

85 1.5 模型分析

86 本试验采用 MSPE^[37]和 CCC^[38]2 种分析方法评估 3 个模型的预测精度。MSPE 分析方法
87 包括整体偏差的偏离(error due to overall bias, ECT)、回归斜率偏离(error due to the regression
88 slope from unity, ER)和随机效应(random error, ED)3 部分，以实测值的百分比形式表示。CCC
89 分析方法包括偏差校正因子(Cb)，估算值与实测值间的相关系数(r)，实测值总体标准差和估
90 算值总体标准差的比值(v)，实测值与估算值间的偏移程度(u)4 部分组成。2 个分析方法使用
91 的计算公式参考谢天宇^[39]。奶牛瘤胃 VFA 各组分实测值与估算值、残差与估算值的相关关
92 系采用 SPSS 18.0 软件进行线性回归分析，显著性水平为 $P < 0.01$ 。

93 2 结 果

94 2.1 奶牛饲粮信息汇总

95 奶牛体重、饲粮、干物质采食量等数据详见表 1。奶牛 DMI 范围处于 10.5~24.0 kg/d，
96 平均值为 17.6 kg/d；奶牛体重范围处于 474~700 kg，平均值为 560 kg。C 饲粮组淀粉含量
97 (172~387 g/kg) 高于 R 饲粮组 (86~244 g/kg)，NDF 含量 (253~539 g/kg) 低于 R 饲粮
98 组 (371~521 g/kg)。

99 表 1 奶牛和饲粮组成信息汇总 (干物质基础)

100 Table 1. Summary of dairy cow dietary chemical composition (DM basis)

项目 Items		平均值	标准差	最小值	最大值
		Mean	SD	Min.	Max.
体重 BW/kg(n=53)		560	54.3	474	700

干物质采食量 DMI/ (kg/d) (n=53)	17.6	3.19	10.5	24.0
饲粮组成 Dietary chemical composition				
C 饲粮组 C diet group/ (g/kg) (n=32)				
可溶性碳水化合物 Soluble and rapidly fermentable carbohydrates	97.7	19.7	60.8	143.0
淀粉 Starch	253	42.6	172	387
中性洗涤纤维 NDF	368	48.9	253	539
纤维素 Cellulose	185	25.7	127	222
半纤维素 Hemicellulose	139	41.6	84	287
R 饲粮组 R diet group/ (g/kg) (n=21)				
可溶性碳水化合物 Soluble and rapidly fermentable carbohydrates	135	79.0	79	471
淀粉 Starch	183	31.3	86	244
中性洗涤纤维 NDF	408	36.4	371	521
纤维素 Cellulose	226	19.9	195	262
半纤维素 Hemicellulose	129	20.5	104	182

101 2.2 饲粮 5 大化学组分的奶牛瘤胃有效降解

102 可溶性碳水化合物、淀粉、纤维素、半纤维素和粗蛋白质在瘤胃有效降解的范围, C 饲
 103 粮组中分别为 0.60~3.13 kg/d、1.37~3.52 kg/d、0.59~2.59 kg/d、0.46~1.42 kg/d 和 0.33~
 104 1.99 kg/d, R 饲粮组中分别为 0.74~2.73 kg/d、0.96~2.55 kg/d、0.80~1.43 kg/d、0.38~1.16
 105 kg/d 和 0.66~1.75 kg/d (表 2)。

106 2.3 VFA 各组分比例数据汇总

107 瘤胃中实测的挥发性脂肪酸比例如下: 乙酸的范围处于 57.2%~72.9%, 平均值 65.5%;
 108 丙酸的范围处于 15.5%~25.4%, 平均值为 20.2%; 丁酸的范围处于 7.5%~13.6%, 平均值
 109 为 11.0%; 其他酸 (包括戊酸、异戊酸和异丁酸) 的范围处于 0.8%~9.6%, 平均值为 4.1%
 110 (表 2)。

111 表 2 饲粮瘤胃有效降解和 VFA 比例的数据汇总

112 Table 2. Summary on the effective degradation of diet in the rumen and the VFA molar ratio

项目 Items	平均值 Mean	标准差 SD	最小值 Min.	最大值 Max.
Item				
C 饲粮组 C diet group/ (kg/d) (n=32)				
可溶性碳水化合物 Soluble and rapidly fermentable carbohydrates	1.76	0.552	0.60	3.13
淀粉 Starch	2.56	0.590	1.37	3.52
纤维素 Cellulose	1.36	0.451	0.59	2.59
半纤维素 Hemicellulose	0.98	0.270	0.46	1.42
粗蛋白质 CP	1.16	0.349	0.33	1.99
R 饲粮组 R diet group/ (kg/d) (n=21)				
可溶性碳水化合物 Soluble and rapidly fermentable carbohydrates	2.03	0.592	0.74	2.73
淀粉 Starch	1.77	0.416	0.96	2.55

纤维素 Cellulose		1.31	0.278	0.80	1.43
半纤维素 Hemicellulose		0.80	0.298	0.38	1.16
粗蛋白质 CP		1.29	0.272	0.66	1.75
瘤胃各组分挥发性脂肪酸/%					
乙酸 Ac		65.5	3.79	57.2	72.9
丙酸 Pro		20.2	2.48	15.5	25.4
丁酸 Bu		11.0	1.65	7.5	13.6
其他酸 OA		4.1	2.04	0.8	9.6

113 其他酸包括戊酸、异戊酸和异丁酸。下表同。

114 OA included valerate, isovalerate and isobutyrate. The same as below.

115 2.4 MSPE 分析法结果

116 由表 3 和图 1 可知, BAN 模型乙酸比例 RMSPE 最小(6.8%), 决定系数(R^2)最大(0.140);

117 MUR 模型 RMSPE 最大(21.6%)。BAN 模型估算值与实测值的一次回归线与 1:1 标准线最

118 为接近, 偏差来自整体偏差的偏离 (47.8%)。3 个模型预测丙酸、丁酸和其他酸比例的 R^2

119 均小于 0.100, 无显著相关性 ($P>0.01$)。

120 表 3 MSPE 分析法结果汇总

121 Table 3 Summary of MSPE analysis

模型 Model	MUR 模型 MUR model				DIJ 模型 DIJ model				BAN 模型 BAN model			
	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA
实测平均值 Measured mean	65.5	20.2	11.0	4.1	65.5	20.2	11.0	4.1	65.5	20.2	11.0	4.1
预测平均值 Predicted mean	52.7	22.8	18.3	6.4	61.6	21.6	10.1	6.6	62.4	22.3	11.9	3.4
误差均方 MSPE	20.0	24.2	55.6	12.7	52.1	25.0	3.65	14.1	19.8	13.0	3.9	5.0
均方根相对误差 RMSPE/%	21.6	24.4	67.6	86.2	11.0	24.8	17.3	90.9	6.8	17.9	17.9	54.0
均方根相对误差组分 Components of RMSPE												
整体偏差的偏离 ECT/%	83.5	28.2	94.4	38.8	29.5	8.3	22.5	44.7	47.8	34.8	18.8	11.4
回归斜率偏离 ER/%	11.0	47.6	0.63	29.0	49.3	68.7	1.7	26.3	1.0	19.8	8.1	6.6
随机效应 ED/%	5.5	24.2	5.0	32.2	21.2	23.1	75.8	29.0	51.2	45.4	73.1	82.0

122 2.5 残差分析结果

123 残差与估算值之间的一次回归分析结果见表 4。MUR 模型、DIJ 模型乙酸、丙酸和其他

124 酸及 BAN 模型丙酸预测残差与估算值线性回归的斜率、截距与 0 比较差异显著($P<0.01$);

125 模型的预测残差与估算值线性回归的决定系数 R^2 的范围分布在 0.019~0.749。

126 表 4 预测残差与估算值间的线性关系

127 Table 4 The linear relationship between the predicted residuals and values

项目 Items	斜率 Slope	截距 Intercept	决定系数
----------	----------	--------------	------

	数值 Value	标准误 SE	P 值 P-value	数值 Value	标准误 SE	P 值 P-value	R^2
MUR 模型 MUR model							
乙酸 Ac	-0.850	0.084	<0.001	57.6	4.46	<0.001	0.666
丙酸 Pr	-1.110	0.110	<0.001	22.6	2.54	<0.001	0.663
丁酸 Bu	-0.615	0.253	0.019	4.0	4.64	0.392	0.112
其他酸 OA	-0.990	0.165	<0.001	4.1	1.09	0.001	0.474
DIJ 模型 DIJ model							
乙酸 Ac	-0.862	0.079	<0.001	57.0	4.90	<0.001	0.699
丙酸 Pr	-1.120	0.091	<0.001	22.7	1.99	<0.001	0.749
丁酸 Bu	-0.395	0.385	0.311	4.91	3.91	0.794	0.022
其他酸 OA	-1.030	0.170	<0.001	4.30	1.17	0.010	0.476
BAN 模型 BAN model							
乙酸 Ac	-0.262	0.261	0.321	19.4	16.30	0.239	0.019
丙酸 Pr	-1.180	0.250	<0.001	24.1	5.58	<0.001	0.303
丁酸 Bu	-1.870	0.821	0.027	21.4	9.77	0.278	0.100
其他酸 OA	-1.223	0.682	0.080	4.9	2.33	0.042	0.075

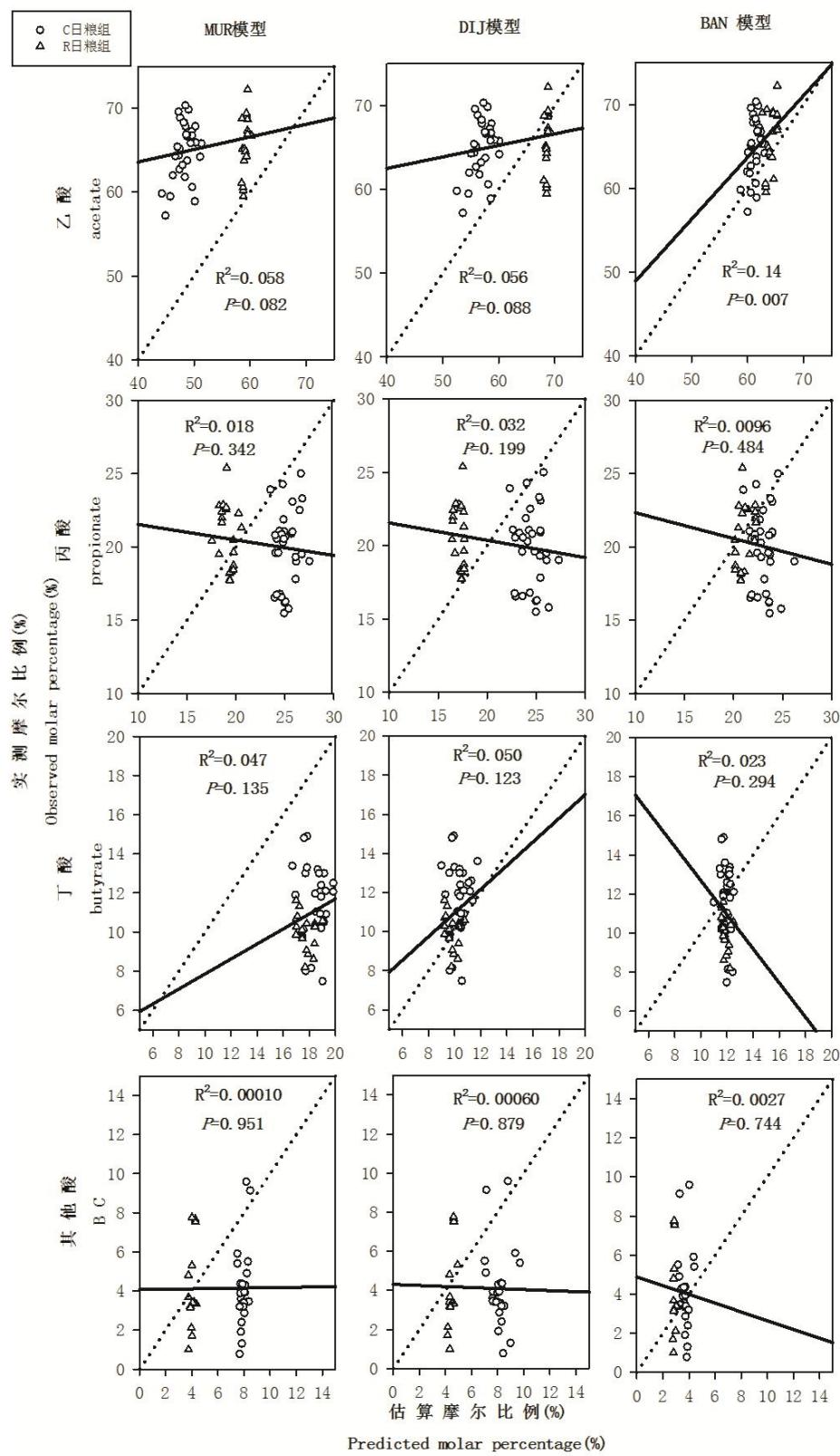
128 2.6 CCC 分析法结果

129 由表 5 和图 2 可知, BAN 模型乙酸比例 CCC 值最大 (0.178), MUR 模型最小 (0.044),
 130 BAN 模型残差与估算值回归方程与 0 标准线最为接近。丙酸、丁酸和其他酸比例预测值与
 131 实测值的残差分析结果显示: 模型 CCC 值均小于 0.120, 残差与估算值回归方程与 0 标准线
 132 有明显的交叉。3 个模型预测丙酸的 Cb 值均大于 0.200, u 值均小于 0, 说明丙酸比例被高
 133 估。

134 表 5 CCC 分析结果汇总

135 Table 5 Summary of CCC analysis results

Model	MUR 模型 MUR model				DIJ 模型 DIJ model				BAN 模型 BAN model			
	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA	乙酸 Ac	丙酸 Pr	丁酸 Bu	其他酸 OA
相关系数 r	0.241	-0.133	0.216	0.010	0.236	-0.179	0.223	-0.024	0.368	-0.098	-0.153	-0.052
实测值与估算值间的偏移程度 u	2.98	-0.96	-5.66	-1.12	0.87	-0.48	0.88	-1.29	1.27	-1.16	-1.20	0.77
实测值总体标准差和估算值总体标 准差的比值 v	0.62	0.80	1.78	1.04	0.58	0.66	2.71	1.08	2.01	1.79	5.69	4.32
偏差校正因子 Cb	0.180	0.675	0.582	0.614	0.653	0.832	0.520	0.545	0.485	0.539	0.274	0.388
一致性相关系数 CCC	0.044	-0.090	0.013	0.006	0.154	-0.149	0.116	-0.013	0.178	-0.053	-0.042	-0.020



136

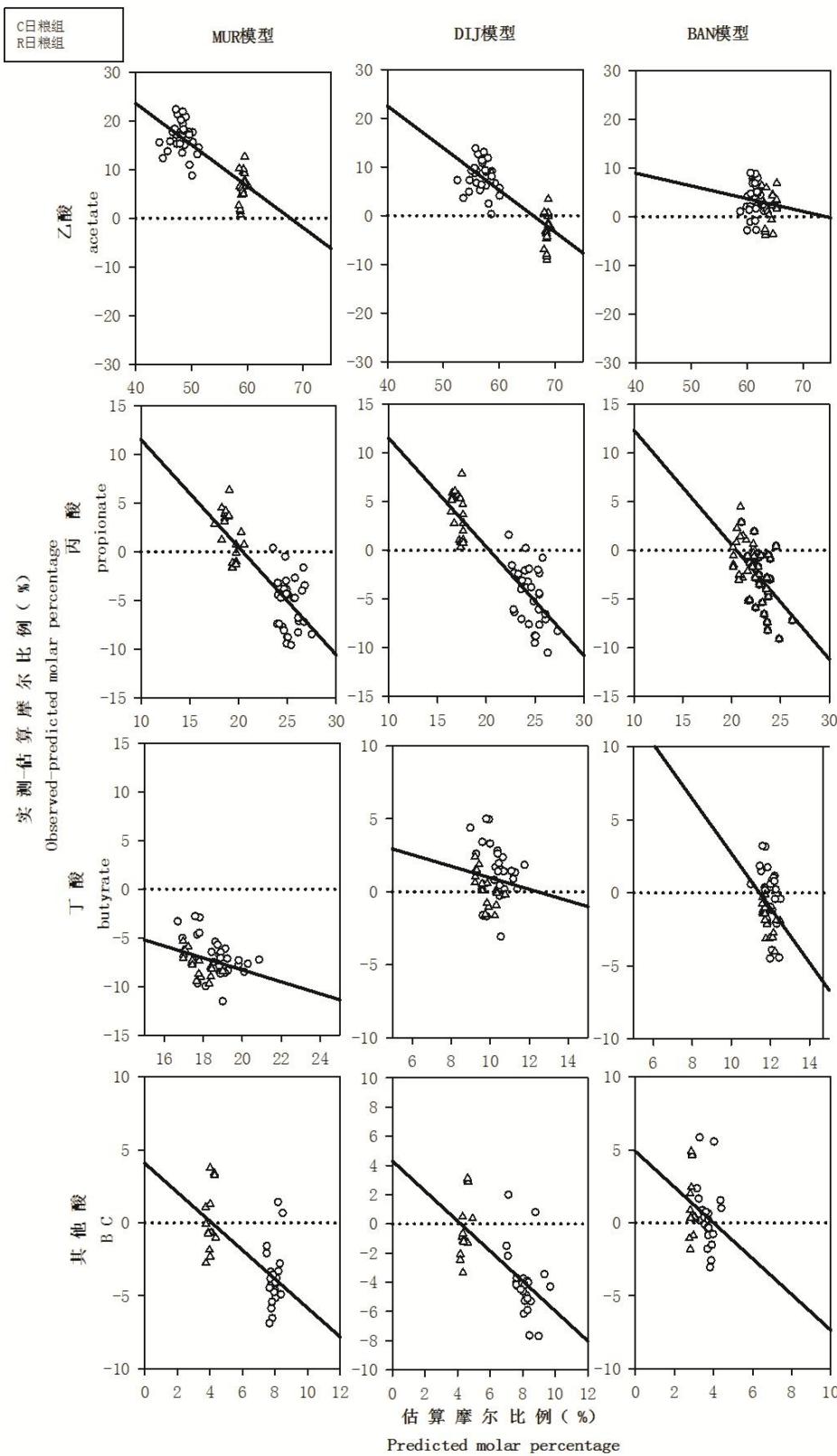
137 实线：奶牛瘤胃内 VFA 比例估算值与实测值间的一次回归线；虚线：1 : 1 标准线。

138 Solid line: The regression line between predicted and observed VFA proportions in rumen of dairy cows;

139 dashed line: 1 : 1 standard line.

图 1 奶牛瘤胃内 VFA 比例估算值与实测值间的关系

Fig.1 Relationship between predicted and observed VFA proportions in rumen of dairy cows



实线：奶牛瘤胃内 VFA 比例残差（实测值—估算值）与估算值间的一次回归线；虚线：0 标准线。

144 Solid line: The regression line between residual (observed value — predicted) and predicted VFA
 145 proportions in rumen of dairy cows; dashed line: 0 standard line.

146 图 2 奶牛瘤胃内 VFA 比例残差与估算值间的关系

147 Fig.2 Relationship between residual and predicted VFA in rumen of dairy cattle

148 3 讨 论

149 Alemu 等^[40]利用 141 组奶牛数据评估了 4 个 VFA 模型, 结果显示: MUR 模型的估算精
 150 度偏低。这与本试验结果一致。本研究中, MUR 模型 R^2 均低于 0.1, 无显著相关性。MSPE
 151 组分分析结果说明, 乙酸、丙酸、丁酸和其他酸的整体偏差和斜率误差超过了模型估算误差
 152 的 50%。残差与估算值回归方程与 0 标准线有明显的交叉, 且乙酸、丙酸和其他酸残差与
 153 估算值回归方程的斜率和截距差异显著。MUR 模型没有考虑 VFA 各组分的生成速率、相互
 154 转化和吸收利用量^[41]。另外, MUR 模型利用肉牛和羊 VFA 数据构建各化学组分与 VFA 各
 155 组分的转化系数。Chamberlain 等^[42]和 Loncke 等^[43]比较肉牛和羊瘤胃内 VFA 组成的结果显
 156 示, 肉牛瘤胃乙酸与丙酸的比例高于羊。Morvay 等^[44]利用 101 组奶牛数据评估了 6 个 VFA
 157 模型, 结果发现 MUR 模型的估算精度较低, 认为利用肉牛和羊 2 种反刍家畜实测 VFA 数
 158 据所获取的模型不能很好地用于估算奶牛瘤胃 VFA 组成。因此, 本研究中 MUR 模型估算
 159 精度较低的原因有 2 个: 1) MUR 模型没有考虑 VFA 各组分的生成速率、相互转化和吸收
 160 利用量^[36]; 2) 利用肉牛和羊数据建立的模型转化系数可能不适合奶牛^[44]。

161 Dijkstra 等^[9]认为反刍家畜瘤胃产生的一部分 VFA 被瘤胃壁吸收利用, 因此, DIJ 模型
 162 引入了 Hogan^[45]和 Danielli 等^[46]报道的乙酸、丙酸、丁酸、以及其他 VFA 的吸收速率。另
 163 外, DIJ 模型还引入了瘤胃内 pH 因子, 因为瘤胃内 pH 也是影响 VFA 生成的重要因子^[44]。
 164 本研究 CCC 分析结果显示, DIJ 模型的估算精度偏低(均低于 0.160), 且 R^2 均低于 0.100,
 165 无显著相关性。残差与估算值回归方程与 0 标准线有明显的交叉, 且乙酸、丙酸和其他酸比
 166 例残差与估算值回归方程的斜率和截距差异显著。另外, R 饲粮与 C 饲粮的乙酸、丙酸和
 167 其他酸预测值与实测值间差异出现明显分层。Bannink 等^[47]利用奶牛数据评估 3 种模型时,
 168 认为 DIJ 模型的估算精度偏低, 并且 R 饲粮与 C 饲粮的 VFA 比例预测值与实测值间差异也
 169 出现明显分层。造成 DIJ 模型预测精度很低的原因可能是: 1)模型仅考虑到了 VFA 的吸收
 170 速率, 没有考虑到 VFA 之间的相互转化和产生速率^[43]; 2) 模型没有考虑到微生物发酵的生

chinaXiv:201812.00433v1

171 化途径对VFA比例的影响^[48]。

172 BAN模型引入己糖降解生成VFA各组分的生化途径。例如，1 mol碳水化合物（可溶性
173 碳水化合物、淀粉、纤维素、半纤维素）的己糖单位降解可生成2 mol乙酸和丙酸、1 mol丁
174 酸和其他酸，而1 mol蛋白质等效于0.55 mol碳水化合物的己糖^[48]。因此，BAN模型5大化学
175 组分转化为乙酸和丙酸的模型方程在原来的基础上乘以2。此外，BAN模型还引入了VFA的
176 吸收和流通速率等因子。BAN模型细化瘤胃己糖降解的生物化学过程，进一步提高了模型
177 对VFA各组分比例的估算精度。Morvay等^[44]研究结果发现，相比MUR模型和DIJ模型，BAN
178 模型提高了乙酸的估算精度，这与本研究结果一致。本研究中，乙酸比例预测值与实测值回
179 归方程差异显著，且MSPE和CCC分析法均说明，BAN模型乙酸的估算精度是3个模型中最
180 高的。

181 BAN模型虽然提高了乙酸的估算精度，但是该模型预测乙酸的精度仍偏低（CCC值小
182 于0.200）， R^2 小于0.200。MSPE组分分析结果说明，乙酸整体偏差和斜率误差超过了模型估
183 算误差的45%。相关研究已证实瘤胃VFA的比例受饲粮中化学组分的影响^[49]。本研究C饲粮
184 组和R饲粮组淀粉摄入量低于BAN模型中的淀粉摄入量；C饲粮组和R饲粮组中NDF含量平
185 均值高于BAN模型中的NDF含量，说明我们国家奶牛饲粮淀粉和NDF含量分别低于和高于
186 BAN模型建立时所使用的奶牛饲粮。与荷兰相比，我国奶牛饲养水平整体相对偏低^[50-51]。此
187 外，BAN模型建立时假定了VFA各组分的吸收和流通速率相同。Murphy^[52]报道，瘤胃VFA
188 的吸收速率会随着VFA链的长度增加而变大，这种假设也会增加乙酸的比例，从而影响模型
189 的估算精度。

190 4 结 论

191 ①尽管BAN模型估算乙酸比例的精度是最高的，但其估算的乙酸比例的精度仍然偏低，
192 且误差主要来源于整体偏差的偏离。

193 ②MUR模型、DIJ模型、BAN模型无法预测丙酸、丁酸和其他酸的比例。

194 ③MUR模型、DIJ模型、BAN模型建立时所使用的数据全部来自国外养殖牧场，不适合
195 用于估算我国奶牛瘤胃VFA组成，迫切需要利用更多数据建立适合我国国情的VFA化学计量
196 学预测模型。

197 参考文献：

- 198 [1] BERGMAN E N.Energy contributions of volatile fatty acids from the gastrointestinal
199 tract in various species[J].Physiological Reviews,1990,70(70):567–590.
- 200 [2] MCLEOD K R,BALDWIN R L.Effects of diet forage:concentrate ratio and metabolizable
201 energy intake on visceral organ growth and *in vitro* oxidative capacity of gut tissues in
202 sheep[J].Journal of Animal Science,2000,78(3):760–770.
- 203 [3] BRUNETTE T,BAURHOO B,MUSTAFA A F,et al.Effects of replacing grass silage with
204 forage pearl millet silage on milk yield,nutrient digestion,and ruminal fermentation of
205 lactating dairy cows[J].Journal of Dairy Science,2016,99(1):269–279.
- 206 [4] SEYMOUR W M,CAMPBELL D R,JOHNSON Z B.Relationships between rumen volatile
207 fatty acid concentrations and milk production in dairy cows:a literature study[J].Animal Feed
208 Science & Technology,2005,119(1/2):155–169.
- 209 [5] FRIGGENS N C,OLDHAM J D,DEWHURST R J,et al.Proportions of volatile fatty acids in
210 relation to the chemical composition of feeds based on grass silage[J].Journal of Dairy
211 Science,1998,81(5):1331–1344.
- 212 [6] ARGYLE J L,BALDWIN R L.Modeling of rumen water kinetics and effects of rumen pH
213 Changes[J].Journal of Dairy Science,1988,71(5):1178–1188.
- 214 [7] NOZIÈRE P,ORTIGUES-MARTY I,LONCKE C,et al.Carbohydrate quantitative digestion
215 and absorption in ruminants:from feed starch and fibre to nutrients available for
216 tissues[J].Animal,2010,4(7):1057–1174.
- 217 [8] MURPHY M R,BALDWIN R L,KOONG L J.Estimation of stoichiometric parameters for
218 rumen fermentation of roughage and concentrate diets[J].Journal of Animal
219 Science,1982,55(2):411–421.
- 220 [9] DIJKSTRA J,NEAL H D,BEEVER D E,et al.Simulation of nutrient digestion,absorption
221 and outflow in the rumen:model description[J].The Journal of
222 Nutrition,1992,122(11):2239–2256.
- 223 [10] BANNINK A,KOGUT J,DIJKSTRA J,et al.Estimation of the stoichiometry of volatile fatty
224 acid production in the rumen of lactating cows[J].Journal of Theoretical

- 225 Biology,2006,238(1):36–51.
- 226 [11] WANG M,WANG R,XIE T Y,et al.Shifts in rumen fermentation and Microbiota are
227 associated with dissolved ruminal hydrogen concentrations in lactating dairy cows fed
228 different types of carbohydrates[J].The Journal of Nutrition,2016,146(9):1714–1721.
- 229 [12] 王吉峰,王加启,李树聪,等.不同日粮对奶牛瘤胃发酵模式及泌乳性能的影响[J].畜牧兽
230 医学报,2005,36(6):569–573.
- 231 [13] SUN P,WANG J Q,DENG L F.Effects of *Bacillus subtilis* natto on milk production,rumen
232 fermentation and ruminal microbiome of dairy cows[J].Animal,2013,7(2):216–222.
- 233 [14] YANG S L,BU D P,WANG J Q,et al.Soybean oil and linseed oil supplementation affect
234 profiles of ruminal microorganisms in dairy cows[J].Animal,2009,3(11):1562–1569.
- 235 [15] PENG H,WANG J Q,KANG H Y,et al.Effect of feeding *Bacillus subtilis* natto fermentation
236 product on milk production and composition,blood metabolites and rumen fermentation in
237 early lactation dairy cows[J].Journal of Animal Physiology and Animal
238 Nutrition,2012,96(10):506–512.
- 239 [16] GUO T J,WANG J Q,BU D P,et al.Evaluation of the microbial population in ruminal fluid
240 using real time PCR in steers treated with virginiamycin[J].Czech Journal of Animal
241 Science,2010,55(7):276–285.
- 242 [17] PAN L,BU D P,WANG J Q,et al.Effects of *Radix Bupleuri* extract supplementation on
243 lactation performance and rumen fermentation in heat-stressed lactating Holstein
244 cows[J].Animal Feed Science and Technology,2014,187:1–8.
- 245 [18] ZHAO M,BU D P,WANG J Q,et al.Milk production and composition responds to dietary
246 neutral detergent fiber and starch ratio in dairy cows[J].Animal Science
247 Journal,2015,87(6):756–766.
- 248 [19] WANG B,MAO S Y,YANG H J,et al.Effects of alfalfa and cereal straw as a forage source
249 on nutrient digestibility and lactation performance in lactating dairy cows[J].Journal of Dairy
250 Science,2014,98(1):7706–7715.
- 251 [20] ZHANG R Y,ZHU W Y,ZHU W,et al.Effect of dietary forage sources on rumen

- 252 microbiota,rumen fermentation and biogenic amines in dairy cows[J].Journal of the Science
253 of Food and Agriculture,2014,94(9):1886–1895.
- 254 [21] 张倩,夏建民,李胜利,等不同比例压块秸秆与羊草组成粗饲料对奶牛瘤胃发酵和生产性
255 能的影响[J].动物营养学报,2010,22(2):474–480.
- 256 [22] 曾银,贺鸣,曹志军,等.全混合日粮中粗饲料长度对奶牛咀嚼行为和瘤胃发酵的影响[J].
257 动物营养学报,2010,22(6):1571–1578.
- 258 [23] GUO Y Q,ZOU Y,CAO Z J,et al.Evaluation of coarsely ground wheat as a replacement for
259 ground corn in the diets of lactating dairy cows[J].Asian-Australasian Journal of Animal
260 Sciences,2014,26(7):961–970.
- 261 [24] SUN T,YU X,LI S L,et al.Responses of dairy cows to supplemental highly digestible rumen
262 undegradable protein and rumen-protected forms of methionine[J].Asian-Australasian
263 Journal of Animal Sciences,2009,22(5):659–666.
- 264 [25] CHEN P,JI P,LI S L,et al.Effects of feeding extruded soybean,ground canola seed and whole
265 cottonseed on ruminal fermentation,performance and milk fatty acid profile in early lactation
266 dairy cows[J].Asian-Australasian Journal of Animal Sciences,2008,21(2):204–213.
- 267 [26] CAO Z J,LI S L,XING J J,et al.Effects of maize grain and lucerne particle size on ruminal
268 fermentation,digestibility and performance of cows in midlactation[J].Journal of Animal
269 Physiology and Animal Nutrition,2008,92(2):157–167.
- 270 [27] WANG D S,ZHANG R Y,ZHU W Y,et al.Effects of subacute ruminal acidosis challenges
271 on fermentation and biogenic amines in the rumen of dairy cows[J].Livestock
272 Science,2013,155(2/3):262–272.
- 273 [28] 张丽英.饲料分析及饲料质量检测技术[M].3 版.北京:中国农大出版社,2007.
- 274 [29] AOAC.Official methods of analysis[S].15th ed.Arlington,V.A.:Association of Official
275 Analytical Chemists,1990.
- 276 [30] AOAC.Official methods of analysis[S].16th ed.Gaithersburg,M.D.:Association of Official
277 Analytical Chemists,1997.
- 278 [31] VAN SOEST P J,ROBERTSON J B,LEWIS B A.Methods for dietary fiber,neutral detergent

- 279 fiber, and nonstarch polysaccharides in relation to animal nutrition[J].Journal of Dairy
280 Science,1991,74(10):3583–3597.
- 281 [32] 熊本海.国际反刍动物饲料成分及营养价值表[M].北京:中国农业科学技术出版社,2013.
- 282 [33] 熊本海,蒋林树.CNCPS 体系演变模型及饲料成分表[M].北京:中国农业科学技术出版
283 社,2015.
- 284 [34] BENCHAAR C,RIVEST J,POMAR C,et al.Prediction of methane production from dairy
285 cows using existing mechanistic models and regression equations[J].Journal of Animal
286 Science,1998,76(2):617–627.
- 287 [35] ØRSKOV E R,MCDONALD I.The estimation of protein degradability in the rumen from
288 incubation measurements weighted according to rate of passage[J].Journal of Agricultural
289 Science,1979,92(2):499–503.
- 290 [36] FOX D G,TEDESCHI L O,TYLUTKI T P,et al.The Cornell net carbohydrate and protein
291 system model for evaluating herd nutrition and nutrient excretion[J].Animal Feed Science
292 and Technology,2004,112(1/2/3/4):29–78.
- 293 [37] WANG M,TANG S X,TAN Z L.Modeling *in vitro* gas production kinetics:Derivation of
294 Logistic–Exponential (LE) equations and comparison of models[J].Animal Feed Science and
295 Technology,2011,165(3/4):137–150.
- 296 [38] LIN L I K.A concordance correlation coefficient to evaluate
297 reproducibility[J].Biometrics,1989,45(1):255–268.
- 298 [39] 谢天宇,王敏,王荣,等.奶牛胃肠道甲烷排放模型估算精度的评估分析[J].畜牧兽医学
299 报,2015,46(9):1574–1583.
- 300 [40] ALEMU A W,DIJKSTRA J,BANNINK A,et al.Rumen stoichiometric models and their
301 contribution and challenges in predicting enteric methane production[J].Animal Feed Science
302 and Technology,2011,166–167:761–778.
- 303 [41] BANNINK A,FRANCE J,LOPEZ S,et al.Modelling the implications of feeding strategy on
304 rumen fermentation and functioning of the rumen wall[J].Animal Feed Science &
305 Technology,2008,143(1/2/3/4):3–26.

- 306 [42] CHAMBERLAIN D G,THOMAS P C,ANDERSON F J.Volatile fatty acid proportions and
307 lactic acid metabolism in the rumen in sheep and cattle receiving silage diets[J].The Journal
308 of Agricultural Science,1983,101(1):47–58.
- 309 [43] LONCKE C,ORTIGUES-MARTY I,VERNET J,et al.Empirical prediction of net portal
310 appearance of volatile fatty acids,glucose,and their secondary metabolites
311 (beta-hydroxybutyrate,lactate) from dietary characteristics in ruminants:a meta-analysis
312 approach[J].Journal of Animal Science,2009,87(1):253–268.
- 313 [44] MORVAY Y,BANNINK A,FRANCE J,et al.Evaluation of models to predict the
314 stoichiometry of volatile fatty acid profiles in rumen fluid of lactating Holstein
315 cows[J].Journal of Dairy Science,2011,94(6):3063–3080.
- 316 [45] HOGAN J P.The absorption of ammonia through the rumen of the sheep[J].Australian
317 Journal of Biological Sciences,1961,14(3):448–460.
- 318 [46] DANIELLI J F,HITCHCOCK M W.The mechanism of absorption from the rumen as
319 exemplified by the behaviour of acetic,propionic and butyric acids[J].Journal of Experimental
320 Biology,1945,22:75–84.
- 321 [47] BANNINK A,DE VISSER H,VAN VUUREN A M.Comparison and evaluation of
322 mechanistic rumen models[J].British Journal of Nutrition,1997,78(4):563–581.
- 323 [48] BALDWIN R L,DONOVAN K C.Modeling ruminant digestion and
324 metabolism[C]//CLIFFORD A J, MÜLLER H G.Advances in Experimental Medicine &
325 Biology.Boston, M.A.:Springer,1995,445:325–345.
- 326 [49] 王荣,杨玲媛,王敏,等.基于挥发性脂肪酸化学计量模型体外预测山羊瘤胃甲烷产量的
327 精度[J].应用生态学报,2014,25(5):1518–1524.
- 328 [50] ELGERSMA A,TAMMINGA S,ELLEN G.Modifying milk composition through
329 forage[J].Animal Feed Science and Technology,2006,131(3/4):207–225.
- 330 [51] LIU S W,ZHANG R H,KANG R,et al.Milk fatty acids profiles and milk production from
331 dairy cows fed different forage quality diets[J].Animal Nutrition,2016,2(4):329–333.
- 332 [52] MURPHY M R.Modeling production of volatile fatty acids in ruminants[C]//Modeling

333 Ruminant Digestion and Metabolism, Proceedings of the 2nd International
 334 Workshop. Davis: University of California, 1984.

335 Accuracy analysis of Prediction of Ruminal Volatile Fatty Acid Profiles in Chinese Lactating
 336 Dairy Cows by Stoichiometry Models

337 MAO Hongxiang^{1,2,3} REN Ao^{2,3} WANG Min^{1,3*} GAO Fengxian^{2,3*} ZHANG Xiumin¹
 338 MAGN Zhiyuan¹ TAN Zhiliang¹

339 (1. Institute of Subtropical Agriculture, Chinese Academy of Sciences, Changsha 410125,
 340 China; 2. College of Animal Science and Technology, Hunan Agricultural University, Changsha
 341 410128, China; 3. Hunan Collaborative Innovation Center of Animal Production Safety,
 342 Changsha 410128, China)

343 Abstract: This study was conducted to evaluate the accuracy of models to predict ruminal volatile
 344 fatty acids (VFA) profiles in Chinese lactating dairy cows, and to analyze factors that affect the
 345 accuracy of the models. Three classical models of ruminal VFA stoichiometry were selected,
 346 which were MUR model, DIJ model and BAN model. The VFA data was selected from 18
 347 articles of Chinese scientists, including 14 SCI articles, 3 articles from Chinese Core Journals and
 348 1 unpublished manuscript, and data included diet, body weight, dry matter intake, feed additives,
 349 VFA proportions. Mean squared prediction error (MSPE) and consistent correlation coefficient
 350 (CCC) methods were employed to evaluate the prediction accuracy of MUR model, DIJ model
 351 and BAN model. The results showed as follow: BAN model had the highest prediction accuracy
 352 of acetate proportion ($R^2=0.140$; $P=0.007$, RMSPE=6.8%) , with overall bias being 47.8%.
 353 Propionate, butyrate and other acids proportions could not be predicted by the above three models. In
 354 conclusion, BAN model has highest prediction accuracy to predict acetate molar proportion
 355 among the three models, but the prediction accuracy is still low with the error mainly coming from
 356 the overall bias, and it is necessary to make use of more data to establish a VFA stoichiometry
 357 prediction model suitable for Chinese national conditions.

358 Key words: volatile fatty acid; model; prediction error mean square; consistency correlation

*Corresponding authors: WANG Min, associate professor, E-mail: mwang@isa.ac.cn; GAO
 Fengxian, professor, E-mail: gaofx1964@163.com (责任编辑 王智航)

359 coefficient; lactating dairy cow