

Universität of Kassel,
Faculty of Organic Agricultural Sciences
Department of Agricultural and Biosystems Engineering

Manual R-Software-Framework

**Statistical Framework not only for Precision Livestock Management and Ethology,
but for performing Sample Size Calculation for Binomially Distributed Traits, Incorporating
Simple Sample Size Planning, Post-Hoc Analysis, Confidence Interval Inflation, Bayesian
Integration of Prior Knowledge and Sampling Uncertainty**

<https://doi.org/10.48662/daks-559>

Version: v0.7beta

Boris Kulig, Bertram Schäfer,
Ulrike Wilczek, Anita Lange, Oliver Hensel, Lisa Jung

Datum: 19. Oktober 2026

UniK, FB11, FG Agrartechnik
Nordbahnhofstr. 1a
37213 Witzenhausen-Germany

[Boris Kulig](#)

Phone: +495542891637

Inhaltsverzeichnis

I	Deutsch	4
1	Installation der Grundsoftware (R, RStudio und TinyTeX)	5
2	Anleitung R-Software-Framework	7
2.1	Installationsanleitung: Einrichtung der Arbeitsumgebung	8
2.1.1	Einmalige R Paketinstallation in RStudio	8
2.1.2	Einmaliges Entpacken des R-Software-Frameworks	8
2.1.3	Grundsätzliche Bedienung des R-Software-Frameworks	9
2.2	Anleitung Tool A – Fallzahlplanung für ein spezifisches Szenario (. /Tool-A)	10
2.3	Anleitung Tool B – Anpassbare Tabellen für die Fallzahlplanung (. /Tool-B)	12
2.4	Anleitung Tool C – <i>post-hoc</i> -Analyse der Konfidenzintervalle (. /Tool-C)	13
2.5	Anleitung Tool D – Auswirkung der diagnostische Unschärfe auf Konfidenzintervalle (. /Tool-D)	15
3	Zitation, Feedback, Methoden	17
3.1	Zitation und wissenschaftliche Nutzung des R-Software-Frameworks	17
3.2	Feedback, Fehler und Open-Source-Kollaboration	17
3.3	Steckbriefe der statistischen Methoden	18
II	English	20
4	Installation of Base Software (R, RStudio and TinyTeX)	21
5	R Software Framework Manual	22
5.1	Installation Guide: Setting Up the Work Environment	22
5.1.1	Once: R Package Installation in RStudio	22
5.1.2	Once: Extraction of the R Software Framework	23
5.1.3	Basic Operation of the R Software Framework	24
5.2	Guide Tool A – Sample Size Planning for a Specific Scenario (. /Tool-A)	24
5.3	Guide Tool B – Customizable Tables for Sample Size Planning (. /Tool-B)	26
5.4	Guide Tool C – Post-Hoc Analysis of Confidence Intervals (. /Tool-C)	27
5.5	Guide Tool D – Impact of Diagnostic Uncertainty on Confidence Intervals (. /Tool-D)	28
6	Citation, Feedback, Methods	30
6.1	Citation and Scientific Use of the R Software Framework	30
6.2	Feedback, Error Reporting, and Open-Source Collaboration	30
6.3	Brief Overviews of Statistical Methods	31

Teil I

Deutsch

1 Installation der Grundsoftware (R, RStudio und TinyT_EX)

Um die R-Software-Frameworks auszuführen, benötigen Sie zwei kostenlose Open-Source Basis-Programme. Es ist das Statistikpaket R [1] und Programmieroberfläche RStudio Desktop [2]. Die Lauffähigkeit Frameworks ist mit R ab der Version 2.5.3 und der RStudio Version 2026.06.0 unter Windows und Ubuntu Linux 26.04 LTS getestet. Bitte installiert oder aktualisieren sie R und RStudio, sodass sie mindestens die genannten Versionsnummern haben. Gehen sie bitte wie folgt vor:

1. Grundsoftware installieren: Um das Tool auszuführen, benötigen Sie zwei kostenlose Basis-Programme R und RStudio:
 - R - *der Motor*: Laden Sie die aktuelle Version von R für Ihr Betriebssystem (Linux / MacOS / Windows) vom [CRAN](#)-Netzwerk herunter und installieren Sie diese mit den Standardeinstellungen.
 - RStudio - *das Armaturenbrett*: Laden Sie RStudio Desktop von der [Posit](#)-Website herunter und installieren Sie es ebenfalls. RStudio ist die Benutzeroberfläche, in der wir arbeiten werden.
 - Die Erstellung von formatierten Reports ist eine Grundfunktion der R-Software-Frameworks. Diese Funktion wird durch Quarto [3], ein Bestandteil der RStudio Software ermöglicht. Quarto ist in aktuellen RStudio-Versionen (ab Version 2022.07.1) bereits vorinstalliert.
2. In Quarto wird das Tool TinyT_EX [4] für die formatierten Reports benötigt. Die Installation der PDF-Engine (TinyT_EX) wird wie folgt durchgeführt:
 - Damit RStudio aus dem Code eigenständig professionelle PDF-Dokumente generieren kann, ohne dass Sie sperrige und fehleranfällige Drittsoftware (wie MiK_TE_X) benötigen, nutzen wir die in Quarto integrierte Engine TinyT_EX.
 - Suchen Sie in RStudio unten links (direkt neben der Console) den Reiter Terminal.
 - Tippen (oder kopieren) Sie exakt diesen Befehl hinein
`quarto install tool tinytex`
 - Drücken Sie Enter und warten Sie den automatischen Download ab.
 - Die Umgebung ist nun dauerhaft einsatzbereit!

Folgen sie den Links für eine ausführliche YouTube Installationsanleitungen für die Installation von R, RStudio und TinyTeX: [Windows](#); [MacOS](#); [Ubuntu Linux](#).

Bitte beachten sie bei der Nutzung von R und RStudio die jeweiligen Besonderheiten ihres bevorzugten Betriebssystems. Lesen sie entsprechendes in der Betriebssystem und in der R und RStudio Dokumentation nach. Typische Quellen von Ungemach sind:

- Die spezifische Art wie die Programme mit der Angabe von Verzeichnispfaden umgehen.
- Das unterschiedliche Setting für Zeilen-Endzeichen (CR, LF oder CR+LF) in Text- und Code-Dateien kann auch oft irritieren.
- Sie sollten RStudio unabhängig vom Betriebssystem auf die Nutzung und Speicherung von UTF-8-Zeichencodierung für alle Dateien einstellen.

2 Anleitung R-Software-Framework

Diese Anleitung führt Sie Schritt für Schritt durch die einmalige Einrichtung Ihres Computers, um das R-basierte Planungs-Framework nutzen zu können. Das Framework besteht aus vier unabhängigen Werkzeugen:

1. *Tool A* – Fallzahlplanung für ein spezifisches Szenario

(`SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd`):

Dieses Tool berechnet die optimale Fallzahl für eine ganz konkrete Studie unter Berücksichtigung von FPC, Vorwissen (Bayes) und Cluster-Effekten (inklusive Limits bezüglich Clusterzahl). Es werden die Methoden Wald / Cochran (Normalapproximation), Wilson-Score-Intervall, Clopper-Pearson (Exaktes Intervall) und Bayes (Credible Interval) gerechnet.

2. *Tool B* – Anpassbare Tabellen für die Fallzahlplanung

(`SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd`):

Dieses Tool erzeugt ein konfigurierbares Set aus Planungstabellen (Tabellen-Grids) für Publikationen oder den schnellen Feldgebrauch. Es werden die Methoden Wald / Cochran (Normalapproximation), Wilson-Score-Intervall, Clopper-Pearson (Exaktes Intervall) und Bayes (Credible Interval) gerechnet.

3. *Tool C* – *post-hoc*-Analyse der Konfidenzintervalle

(`SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd`):

Dieses Tool quantifiziert die Auswirkungen fehlerhafter Prävalenz-Annahmen auf die Präzision der Studie. Es kann ein spezifisches Szenario definiert werden. Für die Kalkulation von Konfidenzintervallbreiten in Abhängigkeit von beobachteten / bzw. fakultativen Prävalenzen wird der durch das Szenario definierte Stichprobenumfang genutzt. In Tabellen wird ausgewiesen, wie breit die daraus resultierenden Konfidenzintervalle sind. Es werden die Methoden Wald / Cochran (Normalapproximation), Wilson-Score-Intervall, Clopper-Pearson (Exaktes Intervall) und Bayes (Credible Interval) gerechnet.

4. *Tool D* – Auswirkung der diagnostische Unschärfe auf Konfidenzintervalle

(`SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd`):

Dieses Tool quantifiziert und visualisiert die Auswirkungen verminderter Sensitivität und Spezifität bei der Bonitur von einem Merkmal auf die Konfidenzintervalle. Die Wirkung der diagnostischen Unschärfe wird mit Hilfe eines Bootstrapping Verfahrens bestimmt. Es werden die Konfidenzintervalle der klassischen Wald-Methode gegen die probabilistische Simulation (Bootstrap) aufgetragen.

2.1 Installationsanleitung: Einrichtung der Arbeitsumgebung

2.1.1 Einmalige R Paketinstallation in RStudio

Paketinstallation in RStudio: Damit R die mathematischen Operationen und die komplexe Tabellenformatierung durchführen kann, müssen einmalig Zusatzpakete installiert werden.

1. Öffnen Sie RStudio.
2. Suchen Sie unten links das Fenster mit dem Reiter Console.
3. Kopieren Sie den folgenden Befehl exakt so heraus: `install.packages(c("yaml", "rmarkdown", "dplyr", "knitr", "stringr", "tidyr", "tidyverse", "ggplot2", "grid", "gridExtra", "gt"))` [5], [6], [7], [4], [8], [9], [10], [11], [12], [13], [14]
4. Fügen Sie ihn in die Console ein und drücken Sie Enter. Warten Sie, bis der rote Text aufhört durchzulaufen. Die Umgebung ist nun dauerhaft einsatzbereit!

2.1.2 Einmaliges Entpacken des R-Software-Frameworks

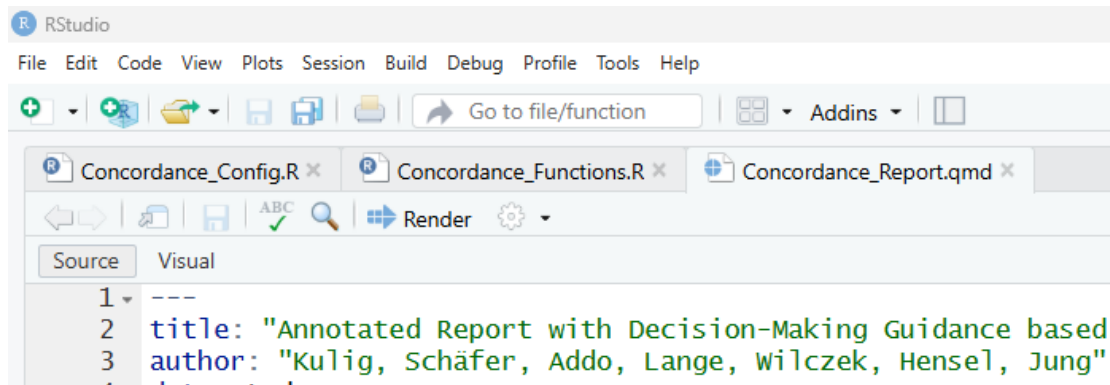
Sie erhalten das Konkordanz-Framework als komprimierte [TAR-Datei](#) aus dem Universität Kassel Research Data Repository (DaKS). Gehen sie bei der Installation bitte wie folgt vor:

1. Laden Sie die TAR-Datei auf Ihren Computer herunter.
2. Sehr wichtig: Entpacken (extrahieren) sie die TAR-Datei vollständig in einen neuen Ordner auf ihrer Festplatte (z.B. unter Dokumente/Fallzahlplanung). Das geht meist mit Bordmitteln der jeweiligen Betriebssysteme, in de gleichen Form, wie sie es auch mit ZIP-Dateien machen würden. Starten Sie die Dateien niemals direkt aus der TAR-Vorschau heraus, da die Skripte sonst die verknüpften Dateien nicht finden können.
3. Nach dem Entpacken muss nachfolgende Verzeichnisstruktur entstehen. Es sind die Unterverzeichnisse für die beiden Einzel-Tools des Frameworks:
 - Fundamental-Calc
 - Tool-A
 - Tool-B
 - Tool-C
 - Tool-D
 - Die Anleitung, die sie gerade lesen: User_Manual.pdf
4. In den jeweiligen Unterverzeichnissen befinden sich folgende Dateien und Dateitypen:
 - Kurzanleitung: Readme.txt
 - Für jedes der beiden Tools gibt es jeweils drei Dateien mit folgender Namensregeln und Funktionen:

- `*_Config.R`: Die Steuerzentrale bzw. Konfigurationsdatei.
- `*_Functions.R`: Der mathematische Hintergrund – bitte nicht ändern!
- `*_Report.qmd`: Das Hauptskript für die Erzeugung des PDF-Bericht;
- Literaturquellen und Styles für die Literaturliste: `References.bib`; `apa.csl`; `ieee.cls`
- Hilfsdateien im Verzeichnis `Fundamental-Calc`:
Die Datei `A_Fundamental_Calc_CI_z_vs_t_Intervalls.R` berechnet, visualisiert und vergleicht die Konfidenzintervalle der z - und t -Verteilung unter Berücksichtigung des Stichprobenumfangs und die Datei `B_Fundamental_Calc_CI_Clopper_and_Pearson_Nomogram.R` erstellt ein konfigurierbares Nomogramm mit Konfidenzintervallen nach Clopper und Pearson in Abhängigkeit von der Stichprobengröße.

2.1.3 Grundsätzliche Bedienung des R-Software-Frameworks

1. Wählen sie `File > Open` in `RStudio` und wechseln sie in das Verzeichnis des Tools, welches sie nutzen möchten. Es ist eines der Unterverzeichnisse im Verzeichnis in das sie das Framework entpackt haben.
2. Laden sie bitte ein Toolset bestehend aus einem zusammengehörigen Datei-Dreierset:
`*_Config.R`: Die Steuerzentrale bzw. Konfigurationsdatei.
`*_Functions.R`: Der mathematische Hintergrund – bitte nicht ändern!
`*_Report.qmd`: Das Hauptskript für die Erzeugung des PDF-Bericht;
in `RStudio`. Welches Tool für welche Aufgabe bestimmt ist, wird in den nächsten Kapiteln beschrieben.
3. Wechseln sie in `RStudio` auf den Reiter mit der geladenen `*_Config.R` Steuerzentrale. Stellen sie in der `*_Config.R` ihre Konfiguration ein und passen sie alle Variablen an ihr Studiendesign an. Die Vorgehensweise und die Bedeutung der einzelnen Variablen wird ebenso in den nächsten Kapiteln für die jeweiligen Tools beschrieben.
4. Falls das zu verwendende Tool eine Datendatei benötigt, so habe sie diese eben in der Konfiguration angegeben und auch eine Spaltenzuordnung konfiguriert. Damit alles problemlos funktioniert, ist es ideal, die Datendatei in das selbe Verzeichnis wie das Datei-Dreierset des zu verwendenden Tools zu kopieren. Dann müssen sie sich nicht mit der Angabe von Pfaden in der Konfigurationsdatei rumschlagen.
5. Nun sind sie bereit eine Report zu generieren. Wechseln sie bitte auf den Reiter mit der `*_Report.qmd` Datei und klicken sie auf den `Render` Button im `RStudio` Menü (vgl. Abbildung).



6. Beachten sie bitte auch sowohl die Kommentare in den *.R Dateien und auch die möglicherweise vorhandenen Readme.txt Dateien.
7. Falls sie das Framework irgendwie „versemmelt“ haben und es nicht mehr läuft, dann entpacken sie es einfach neu aus der TAR-Datei und fangen wieder von vorne an.

2.2 Anleitung Tool A – Fallzahlplanung für ein spezifisches Szenario (./Tool-A)

Das Framework ist so aufgebaut, dass Sie niemals im eigentlichen mathematischen Code arbeiten müssen. Die gesamte Steuerung der Analyse erfolgt ausschließlich über die Textdateien *_Config.R.

Dieses Tool generiert ein Gutachten für ein einzelnes, spezifisches Herden-Szenario. Die Steuerung des Tools erfolgt ausschließlich über die Datei SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R. Ändern Sie niemals den Code in den Dateien SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd oder SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R.

1. Öffnen sie bitte die drei Tool-Dateien SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R, SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R und SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd in RStudio.
2. Bearbeiten sie die geöffnete Konfigurationsdatei SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R im entsprechenden Reiter in RStudio. Passen Sie die Werte innerhalb der Listen an Ihre geplante Studie an. Da es sich um ein R-Skript handelt, achten sie darauf die exakte Notationen von Zahlen und Texten einhalten. Die Kommentarzeilen liefern die korrekten Beispiele. Logische Werte werden komplett großgeschrieben: TRUE oder FALSE. Konfigurieren sie die Variablen wie folgt:

- **setup** (Basispilotierung):
Legen Sie Herdengröße (N), angenommene Prävalenz (pi_apriori), Konfidenz (conf_level) und Präzision / Margin of Error (A) fest.
 - N: Herdengröße, z.B. 200;
 - pi_apriori: Die angenommene Prävalenz als Dezimalzahl, z.B. 0.1 für 10%;
 - conf_level: Das angestrebte Konfidenzniveau für das Fokus-Szenario, z.B. 0.95 für 95%;

- A: Die geforderte Präzision bzw. der Margin of Error, z.B. 0.05 für $\pm 5\%$.
 - `cluster` (Cluster-Struktur):

Aktivieren Sie nach Bedarf die Cluster-Planung (`use_cluster = TRUE`), definieren Sie die Tiere pro Bucht (`m`), die Intra-Klassen-Korrelation (`rho`) und optional das Limit für die Anzahl physisch existierender Buchten (`k_avail`).

 - `use_cluster`: `TRUE` für Cluster-Planung aktivieren oder `FALSE` für ein Simple Random Sampling;
 - `m`: Die geplante Anzahl an Tieren, die pro Bucht/Stall beprobt werden sollen, z.B. 50;
 - `rho`: Der Intra-Klassen-Korrelationskoeffizient (ICC) als Dezimalzahl, z.B. 0.1;
 - `k_avail`: Die Anzahl der physisch im Bestand verfügbaren Buchten, z.B. 2. Geben Sie NA ein, wenn die Anzahl nicht limitiert ist.
 - `bayesian_prior` (Vorwissen integrieren):

Integrieren Sie Vorwissen aus Vorstudien (`alpha_0`, `beta_0`). Für ein Setup ohne Vorwissen belassen Sie beide Werte auf 1.

 - `alpha_0`: Anzahl der in Vorstudien positiv getesteten Tiere, Standard ist 1;
 - `beta_0`: Anzahl der in Vorstudien negativ getesteten Tiere, Standard: 1;
 - Hinweis: Belassen Sie beide Werte auf 1, um einen flachen (non-informativen) Prior ohne Vorwissen zu nutzen.
 - `variations` (Vergleichsmatrix):
 - Passen Sie die Vektoren `c( . . . )` an, wenn Sie in der größeren Übersichtstabelle andere Konfidenzniveaus oder Präzisionsstufen vergleichen möchten.
 - Speichern Sie die `SampleSize_Config.R` (z.B. über File → Save oder Strg+S) nach Ihren Änderungen ab.
- ### 3. Den PDF-Bericht generieren (Render)
- Haben Sie die Konfiguration gespeichert, ist die eigentliche Arbeit erledigt.
- a) Öffnen Sie die Datei `SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd` in RStudio.
 - b) Klicken Sie ganz oben in der Werkzeugleiste des Skripts auf den blauen Pfeil mit der Aufschrift `Render` (Alternativ: Tastenkombination `Strg + Shift + K`).
 - c) Das Skript liest nun Ihre Konfiguration aus der `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R`, führt die FPC- und Design-Effekt-Korrekturen durch und vergleicht vier verschiedene statistische Verfahren. Die Rechenanweisungen sind im Datei `SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R` hinterlegt.
 - d) Nach wenigen Sekunden öffnet sich ein fertig formatiertes PDF-Dokument.

4. Interpretation der Ergebnisse (Benchmarks und Faustregeln)

Das Skript berechnet nicht nur stur Zahlen, sondern wendet automatisch epidemiologische Standardfunktionen an, um Sie bei der Methodenauswahl zu unterstützen. Folgende Benchmarks sind im System hinterlegt:

- **Methoden-Benchmark (Extremwerte):** Das Skript prüft, ob Ihre angenommene Prävalenz im Bereich unter 20% oder über 80% liegt. Ist dies der Fall, gibt das PDF eine ausdrückliche Warnung aus, da die asymmetrische Binomialverteilung hier zu starken Verzerrungen bei der klassischen Wald-Methode führt. Es wird dann empfohlen, die (ebenfalls ausgewiesenen) exakten Methoden (Clopper-Pearson, Wilson) zu nutzen.
- **FPC-Benchmark (Endlichkeitskorrektur):** Das Skript berechnet im Hintergrund, wie viel Prozent der Herde durch Ihre Stichprobe beprobt werden. Übersteigt dieser Wert die klassische Benchmark-Grenze von 5%, wird der FPC-Faktor als "zwingend erforderlich" markiert und automatisch auf alle Fallzahlen angewendet.
- **ICC-Benchmark (ρ):** Der Intra-Klassen-Korrelationskoeffizient wird für die Interpretation im Fließtext standardisiert eingestuft: gering (< 0.05), moderat (0.05 bis < 0.15) und hoch (≥ 0.15).
- **Vollerhebungsgrenze (Sampling Frame Limit):** Fordert das errechnete Cluster-Design aufgrund eines zu hohen Design-Effekts mehr Tiere an, als die Herde (N) groß ist, oder mehr Buchten, als verfügbar sind (k_{avail}), kappt das Skript die Fallzahl bei der realen Bestandsgröße. Das PDF warnt Sie in diesem Fall ausdrücklich vor dem mathematischen Paradoxon und empfiehlt die Vollerhebung (Census).

2.3 Anleitung Tool B – Anpassbare Tabellen für die Fallzahlplanung (. / Tool-B)

Das Framework ist so aufgebaut, dass Sie niemals im eigentlichen mathematischen Code arbeiten müssen. Die gesamte Steuerung der Analyse erfolgt ausschließlich über die Textdateien *_Config.R.

Dieses Tool generiert acht detaillierte Nachschlagetabellen (auf- und abgerundet für 4 Methoden) über ein frei definierbares Raster (Grid). Die Steuerung erfolgt ausschließlich über die Datei SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R. Ändern Sie niemals den Code in den Dateien SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd oder SampleSize_Tool-B_Grid_Functions.R.

1. Die Konfiguration erfolgt über SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R:

Öffnen Sie diese Datei in RStudio. Hier definieren Sie über Vektoren `c(...)`, welche Dimensionen das Raster haben soll.

- `flock_size`: Herdengröße = `c(100, 200, 600, 1000)`;
- `moe`: Die geforderte Präzision bzw. der Margin of Error = `c(0.01, 0.02, 0.05, 0.10)`;
- `expected_prevalence`: Die angenommene Prävalenz als Dezimalzahl = `c(0.01, 0.05, 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.50, 0.60, 0.70, 0.80, 0.90, 0.95, 0.99)`;
- `confidence_level`: Das angestrebte Konfidenzniveau für das Fokus-Szenario = `c(0.90, 0.95, 0.99)`;

- **bayesian_prior:** (Vorwissen integrieren):
Integrieren Sie Vorwissen aus Vorstudien (`alpha_0`, `beta_0`). Für ein Setup ohne Vorwissen belassen Sie beide Werte auf 1.
 - `alpha_0`: Anzahl der in Vorstudien positiv getesteten Tiere, Standard ist 1;
 - `beta_0`: Anzahl der in Vorstudien negativ getesteten Tiere, Standard: 1;
 - Hinweis: Belassen Sie beide Werte auf 1, um einen flachen (**non-informativen**) Prior ohne Vorwissen zu nutzen.
- Wichtiger Hinweis zur Tabellengröße (PDF-Layout):
Das Skript generiert saubere DIN-A4-Seiten im Hochformat. Um zu verhindern, dass die Tabellen am unteren Seitenrand fehlerhaft umgebrochen oder Zeilen ineinandergeschoben werden, gibt es ein physisches Platzlimit auf dem Papier. Als feste Faustregel gilt: Das Produkt aus untersuchten Herdengrößen und Prävalenzstufen darf den Wert von 52 Rechenzeilen pro Seite nicht überschreiten.
 - Standard-Setup: 4 Herdengrößen $\times$ 13 Prävalenzstufen = 52 Zeilen $\rightarrow$ Sinnvoller Seitenumbruch.
 - Prävalenz-Fokus: 2 Herdengrößen $\times$ 25 Prävalenzstufen = 50 Zeilen $\rightarrow$ Sinnvoller Seitenumbruch.
- Sollten Sie deutlich mehr Parameter vergleichen wollen, generieren Sie bitte einfach zwei getrennte PDF-Berichte nacheinander (z.B. PDF 1 für kleine Bestände, PDF 2 für Großbestände).
- Speichern Sie die Konfiguration (**Strg+S**).

2. Den PDF-Bericht generieren (Render)

Haben Sie die Konfiguration gespeichert, ist die eigentliche Arbeit erledigt.

- Öffnen Sie die Datei `SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd` in RStudio.
- Klicken Sie ganz oben in der Werkzeugleiste des Skripts auf den blauen Pfeil mit der Aufschrift **Render** (Alternativ: Tastenkombination **Strg + Shift + K**).
- Das Skript liest nun Ihre Konfiguration aus der `SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R` und nutzt die `SampleSize_Tool-B_Grid_Functions.R` für die Berechnung.
- Nach wenigen Sekunden öffnet sich ein fertig formatiertes PDF-Dokument. Es wird ebenso in das Arbeitsverzeichnis abgespeichert.

2.4 Anleitung Tool C – post-hoc-Analyse der Konfidenzintervalle (. / Tool-C)

Das Framework ist so aufgebaut, dass Sie niemals im eigentlichen mathematischen Code arbeiten müssen. Die gesamte Steuerung der Analyse erfolgt ausschließlich über die Textdateien `*_Config.R`.

Dieses Tool wertet aus, wie sich fehlerhafte Annahmen oder pauschal vorgegebene Fallzahlen in der Studienplanung auf die finale Güte und Aussagekraft der Untersuchung auswirken, wenn die tatsächlich im Feld beobachtete

Prävalenz abweicht. Die Steuerung erfolgt ausschließlich über die Datei `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Config.R`. Ändern Sie niemals den Code in den Dateien `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd` oder `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Functions.R`.

1. Die Konfiguration erfolgt über `SampleSize_Tool-C_Grid_Config.R`:

Öffnen Sie diese Datei in RStudio. Hier definieren Sie über die Liste `list(...)`, welches Setup die *post-hoc*-Analyse haben soll.

- `N`: Tatsächliche Herdengröße, fester Wert, z.B. 200;
- `n`: Tatsächlich untersuchte Fallzahl, fester Wert, z.B. 140
- `assumend_prev`: Ursprünglich angenommene Prävalenz, z.B. $0.05 = 5\%$;
- `target_moe`: Ursprünglich angestrebter Margin of Error, z.B. $0.02 = \pm 2\%$;
- `conf_level`: Angestrebtes Konfidenzniveau, z.B. $0.95 = 95\%$;
- `observed_prevalence`: Szenarien: Welche tatsächlichen Prävalenzen wurden im Stall beobachtet, z.B. `c(0.01, 0.025, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35, 0.40, 0.45, 0.50)`
- `bayesian_prior`: (Vorwissen integrieren):
Integrieren Sie Vorwissen aus Vorstudien (`alpha_0`, `beta_0`). Für ein Setup ohne Vorwissen belassen Sie beide Werte auf 1.
 - `alpha_0`: Anzahl der in Vorstudien positiv getesteten Tiere, Standard ist 1;
 - `beta_0`: Anzahl der in Vorstudien negativ getesteten Tiere, Standard: 1;
 - Hinweis: Belassen Sie beide Werte auf 1, um einen flachen (non-informativen) Prior ohne Vorwissen zu nutzen.
- Speichern Sie die Konfiguration (`Strg+S`).

2. Den PDF-Bericht generieren (Render)

Haben Sie die Konfiguration gespeichert, ist die eigentliche Arbeit erledigt.

- Öffnen Sie die Datei `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd` in RStudio.
- Klicken Sie ganz oben in der Werkzeugleiste des Skripts auf den blauen Pfeil mit der Aufschrift `Render` (Alternativ: Tastenkombination `Strg + Shift + K`).
- Das Skript liest nun Ihre Konfiguration aus der `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Config.R` und nutzt die `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Functions.R` für die Berechnung.
- Nach wenigen Sekunden öffnet sich ein fertig formatiertes PDF-Dokument. Es wird ebenso in das Arbeitsverzeichnis abgespeichert.

2.5 Anleitung Tool D – Auswirkung der diagnostische Unschärfe auf Konfidenzintervalle (. / Tool-D)

Das Framework ist so aufgebaut, dass Sie niemals im eigentlichen mathematischen Code arbeiten müssen. Die gesamte Steuerung der Analyse erfolgt ausschließlich über die Textdateien *_Config.R.

Dieses Tool wertet aus, wie sich fehlerhafte Annahmen oder pauschal vorgegebene Fallzahlen in der Studienplanung auf die finale Güte und Aussagekraft der Untersuchung auswirken, wenn die tatsächlich im Feld beobachtete Prävalenz abweicht. Die Steuerung erfolgt ausschließlich über die Datei SampleSize_Tool-D_Bootstrap_PostHoc_Config.R. Ändern Sie niemals den Code in den Dateien SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd oder SampleSize_Tool-D_Bootstrap_PostHoc_Functions.R.

1. Die Konfiguration erfolgt über SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Config.R:

Öffnen Sie diese Datei in RStudio. Hier definieren Sie über die Liste `list(...)`, welches Setup die durchgeführte Studie hatte.

a) Parameter der durchgeführten Studie

- `N`: Tatsächliche Herdengröße, fester Wert, z.B. 5000;
- `n`: Tatsächlich untersuchte Fallzahl, fester Wert, z.B. 150
- `observed_cases`: Anzahl der tatsächlich gefundene Tiere mit positivem Befund, z.B. 30;
- `conf_level`: Angestrebtes Konfidenzniveau, z.B. $0.95 = 95\%$;

b) Diagnostische Güte (modelliert als Beta-Verteilungen)

- `bayesian_prior` (Vorwissen integrieren) der Sensitivität (Se): z.B. ca. 80% (= 20% falsch-negativ):
 - `Se_alpha`: Anteil der richtig positiven Fälle, z.B. $80 = 80\%$;
 - `Se_beta`: Anteil der falsch positiven Fälle, z.B. $80 = 80\%$;
- `bayesian_prior` (Vorwissen integrieren) der Spezifität (Sp): z.B. ca. 90% (= 10% falsch-positiv):
 - `Sp_alpha`: Anteil der richtig negativen Fälle, z.B. $90 = 90\%$;
 - `Sp_beta`: Anteil der falsch negativen Fälle, z.B. $10 = 10\%$;

c) Speichern Sie die Konfiguration (Strg+S).

2. Den PDF-Bericht generieren (Render)

Haben Sie die Konfiguration gespeichert, ist die eigentliche Arbeit erledigt.

a) Öffnen Sie die Datei SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd in RStudio.

b) Klicken Sie ganz oben in der Werkzeugleiste des Skripts auf den blauen Pfeil mit der Aufschrift Render (Alternativ: Tastenkombination Strg + Shift + K).

- c) Das Skript liest nun Ihre Konfiguration aus der `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_PostHoc_Config.R` und nutzt die `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Functions.R` für die Berechnung.
- d) Nach wenigen Sekunden öffnet sich ein fertig formatiertes PDF-Dokument. Es wird ebenso in das Arbeitsverzeichnis abgespeichert.

3 Zitation, Feedback, Methoden

3.1 Zitation und wissenschaftliche Nutzung des R-Software-Frameworks

Wenn Sie dieses Framework für die Fallzahlplanung und das Studiendesign in einer wissenschaftlichen Publikation, Dissertation oder einem Projektbericht nutzen, bitten wir um eine entsprechende Zitation. Die korrekte Angabe der verwendeten Werkzeuge ist ein Grundpfeiler der Reproduzierbarkeit (Open Science) und hilft anderen Forschern, Ihre methodischen Entscheidungen (z.B. die Wahl der Cluster-Parameter oder die Integration von Vorwissen) transparent nachzuvollziehen. Bitte zitieren Sie das Tool wie folgt (bzw. passen Sie es an den Zitierstil Ihres Journals an):

Fallzahlplanung

Kulig, Boris; Schäfer, Bertram; Wilczek, Ulrike; Lange, Anita; Hensel, Oliver; Jung, Lisa. (2026). Statistical Framework not only for Precision Livestock Management and Ethology, but for performing Sample Size Calculation for Binomially Distributed Traits, Incorporating Simple Sample Size Planning, *Post-Hoc* Analysis, Confidence Interval Inflation, Bayesian Integration of Prior Knowledge and Sampling Uncertainty; Universität of Kassel, Faculty of Organic Agricultural Sciences, Department of Agricultural and Biosystems Engineering. DaKS: <https://doi.org/10.48662/daks-542>; [15]

Hinweis für den Methodenteil Ihres Artikels: Denken Sie daran, die angewendeten mathematischen Methoden (wie z.B. Clopper-Pearson oder die iterative Wilson-Score-Inversion) sowie die Nutzung von R und R-Bibliotheken in Ihrem Text zu erwähnen.

3.2 Feedback, Fehler und Open-Source-Kollaboration

Die angewandte Nutztierethologie und das Precision Livestock Management entwickeln sich rasant weiter. Diese Frameworks verstehen sich daher nicht als starre Endprodukt, sondern als „lebendes Dokument“ und methodisches Fundament für die Community. Wir laden die wissenschaftliche Leserschaft ausdrücklich dazu ein, diese Tools kritisch zu prüfen und aktiv an seiner Verbesserung mitzuwirken. So können Sie beitragen:

- *Fehlermeldungen (Bugs):* Wenn das Skript abstürzt oder RStudio einen Fehler wirft, der nicht auf einen Tippfehler in der Konfiguration zurückzuführen ist.
- *Methodische Wünsche:* Fehlt ein bestimmtes Planungsverfahren oder eine bestimmte Funktion, oder gibt es eine Anfrage bezüglich weiterer Stichprobenverfahren (z. B. geschichtete Stichprobenverfahren)?

- *Eigene Erweiterungen:* Haben Sie selbst eine clevere Berechnungsfunktion oder eine Plot-Erweiterung für die PDF-Ausgabe programmiert?

Bitte senden Sie Ihre Rückmeldungen, Fehlermeldungen oder Code-Erweiterungen direkt per E-Mail an: Boris Kulig bkulig@uni-kassel.de. Unterstützen Sie uns dabei, dieses Framework zum Standard-Werkzeug für robuste Studiendesigns im Bereich Tierwohl auszubauen!

3.3 Steckbriefe der statistischen Methoden

- *Wald / Cochran (Normalapproximation):*

Die klassische Wald-Methode ist das in der Literatur am weitesten verbreitete Standardverfahren zur Fallzahl- und Intervallberechnung. Sie basiert auf einer Näherungsformel, die von einer symmetrischen Verteilung der Prävalenzschätzung ausgeht. An den Rändern der Binomialverteilung (Prävalenzen $\pi < 20\%$ und $\pi > 80\%$ oder $\pi < 30\%$ und $\pi > 70\%$, je nach Quelle) führt diese Vereinfachung jedoch zu mathematischen Verzerrungen, weshalb das Verfahren für extreme Prävalenzen nicht empfohlen wird.

- *Wilson-Score-Intervall:*

Das Wilson-Score-Intervall ist eine mathematische Weiterentwicklung der Normalapproximation, die Asymmetrien in der Datenverteilung effektiv ausgleicht. Die Methode verschiebt den Mittelpunkt des Schätzintervalls leicht in Richtung 50% und verhindert so zuverlässig unlogische Konfidenzgrenzen unter 0% oder über 100%. In der modernen Epidemiologie gilt das Wilson-Intervall als der absolute „Goldstandard“ für approximative Berechnungen.

- *Clopper-Pearson (Exakte Methode):*

Die Clopper-Pearson-Methode verzichtet auf jegliche Näherungsformeln und berechnet die Konfidenzintervalle iterativ direkt aus der zugrunde liegenden, exakten Binomialverteilung. Sie ist ein strikt konservatives Verfahren, das das geforderte Konfidenzniveau unter allen Umständen garantiert. In der Praxis führt diese kompromisslose mathematische Sicherheit jedoch häufig dazu, dass die Methode systematisch die größten Stichprobenumfänge fordert.

- *Bayesianisches Credible Interval:*

Der bayessche Ansatz integriert empirische Vorinformationen über konjugierte Beta-Verteilungen in die Planung des Stichprobenumfangs und berechnet sogenannte Glaubwürdigkeitsintervalle. Diese zeichnen sich durch die Fähigkeit aus, bereits vorhandenes Vorwissen strukturiert in die Planung zu integrieren. Frühere Positiv- und Negativbefunde werden als $Beta(\alpha_0, \beta_0)$ parametrisiert. Die Festlegung einer flachen Priorverteilung ($Beta(1, 1)$), es wird von absolutem Nichtwissen ausgegangen, führt zu Intervallschätzungen, die den exakten frequentistischen Grenzen sehr ähnlich sind.

Alle vier Tools wenden automatisch epidemiologische Standardfunktionen an, um Sie bei der Methodenauswahl zu unterstützen. Folgende Benchmarks sind im System hinterlegt:

- *Methoden-Auswahl:* Die klassische Wald-Methode (Normalapproximation) ist fehleranfällig an den Rändern der Binomialverteilung. Fällt Ihre geplante Prävalenz unter 20% oder über 80%, warnen die Skripte Sie methodisch und empfehlen "exakte" Inversionen (Clopper-Pearson) oder das asymmetrische Wilson-Score-Intervall.

- *Ceiling vs. Floor (Auf-/Abrunden)*: Da Fallzahlen oft in Dezimalzahlen resultieren, geben die Tabellen stets zwei Optionen aus. Aufrunden (Ceiling) liefert eine methodisch strikt konservative Planung. Abrunden (Floor) wird oft aus ethischen Gründen (Vermeidung unnötiger Eingriffe) toleriert, kostet jedoch marginal statistische Power.
- *Endlichkeitskorrektur (FPC)*: Übersteigt die berechnete Stichprobe 5% der Grundgesamtheit, deklariert das Tool A die FPC als "zwingend erforderlich".
- *Die Vollerhebungsgrenze (N)*: Fordert das errechnete Design (z.B. durch einen extrem hohen Cluster-Design-Effekt oder hohe Präzisionsvorgaben) mehr Tiere an, als die Herde groß ist, kappt das Skript die Fallzahl. In den Tabellen wird der Wert N ausgewiesen. Dies indiziert, dass eine Stichprobe hier keinen Sinn mehr ergibt und stattdessen eine Vollerhebung (Census) aller Tiere erfolgen muss.
- *Stichprobenrahmen-Limit (k_aval)*: Gibt es im Stall physisch weniger Buchten, als das Cluster-Design statistisch fordert, schlägt Tool A Alarm und erläutert die Konsequenz (zwingende Erhöhung der Tiere pro Bucht, was wiederum den Design-Effekt inflationiert).

Teil II

English

4 Installation of Base Software (R, RStudio and TinyT_EX)

To execute the R software framework, two free, open-source base programs are required: the statistical computing environment R [1] and the integrated development environment RStudio Desktop [2]. Compatibility has been verified with R version 2.5.3 or higher and RStudio version 2026.06.0 under Windows and Ubuntu Linux 26.04 LTS. Install or update R and RStudio to at least these version numbers. Proceed as follows:

1. Installing base software:

- R – the engine: Download the current version of R for your operating system (Linux / MacOS / Windows) from the Comprehensive R Archive Network [CRAN](#) and install it using standard settings.
- RStudio – the dashboard: Download RStudio from the [Posit](#) website and install it. RStudio serves as the user interface in which the scripts are executed.

2. Generating formatted reports is a core function of the R software framework. This function is enabled by Quarto [3], a component of RStudio. Quarto is pre-installed in RStudio versions 2022.07.1 and later.

- a) Installing TinyT_EX [16] for formatted reports in Quarto:
- b) To enable RStudio to compile code directly into professional PDF documents without requiring large third-party distributions (such as MiK_TE_X), the framework utilizes the TinyT_EX engine integrated into Quarto.
- c) Locate the Terminal tab in the bottom-left panel of RStudio (directly adjacent to the Console tab).
- d) Enter the command: `quarto install tool tinytex`
- e) Press Enter and wait for the automated download and setup to finish. The environment is then permanently configured.

Detailed video installation tutorials for R, RStudio, and TinyT_EX are accessible via the following links: [Windows](#); [MacOS](#); [Ubuntu Linux](#). When working with R and RStudio, be aware of the operating system-specific characteristics:

1. File path syntax differences between operating systems.
2. Inconsistent line-ending settings (CR, LF, or CR+LF) in text and code files.
3. Configure RStudio to use and save UTF-8 character encoding for all files across all operating systems.

5 R Software Framework Manual

This guide outlines the one-time configuration required to use the R-based sample size planning framework. The framework consists of four independent tools:

1. *Tool A – Sample Size Planning for a Specific Scenario* (`SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd`): Calculates the required sample size for a specific study design, incorporating finite population correction (FPC), Bayesian prior information, and cluster effects (including physical boundaries on available clusters). Calculations are performed using the Wald / Cochran method (normal approximation), Wilson score interval, Clopper-Pearson method (exact interval), and Bayesian credible intervals.
2. *Tool B – Customizable Tables for Sample Size Planning* (`SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd`): Generates a configurable set of planning grids for publications or field reference. Calculations cover the Wald / Cochran method, Wilson score interval, Clopper-Pearson method, and Bayesian credible intervals.
3. *Tool C – Post-Hoc Analysis of Confidence Intervals* (`SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd`): Evaluates the precision impact when observed field prevalences deviate from a priori planning assumptions. For a defined scenario sample size, the resulting confidence interval widths are quantified across observed or hypothetical prevalences using the Wald, Wilson, Clopper-Pearson, and Bayesian methods.
4. *Tool D – Impact of Diagnostic Uncertainty on Confidence Intervals* (`SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd`): Quantifies and visualizes the effects of imperfect diagnostic sensitivity and specificity on confidence intervals during trait scoring. Diagnostic uncertainty is modeled via a bootstrapping approach, contrasting the classical Wald interval against probabilistic simulation.

5.1 Installation Guide: Setting Up the Work Environment

5.1.1 Once: R Package Installation in RStudio

Package Installation in RStudio: To enable R to perform mathematical operations and complex table formatting, you must install additional packages once.

1. Open RStudio.
2. Select the Console tab in the lower-left window.
3. Execute the following command, use copy & paste: `install.packages(c("yaml", "rmarkdown", "dplyr", "knitr", "stringr", "tidyr", "tidyverse", "ggplot2", "grid", "gridExtra", "gt"))` [5], [6], [7], [4], [8], [9], [10], [11], [12], [13], [14]

4. Paste it into the Console and press Enter. Wait until the text stops scrolling. The environment is now permanently ready for use!

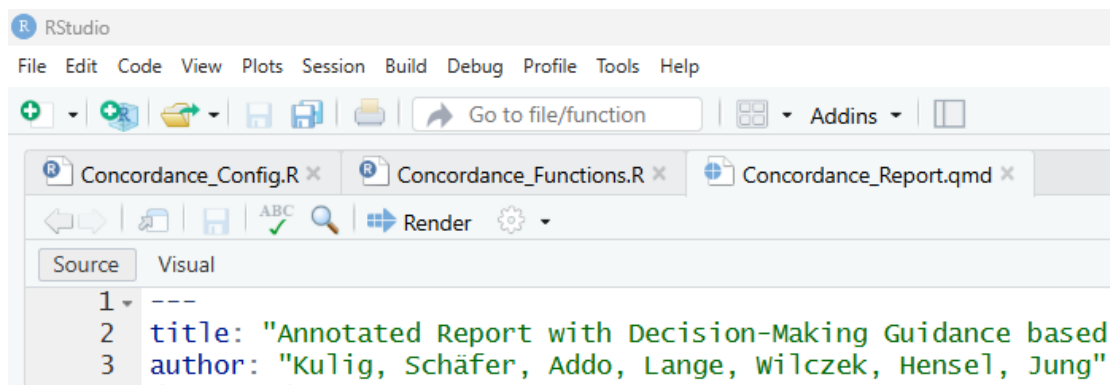
5.1.2 Once: Extraction of the R Software Framework

You can download the concordance framework as a compressed [TAR-File](#) from the University of Kassel Research Data Repository (DaKS). To install it, please follow these steps:

1. Download the TAR file.
2. Extract the TAR archive completely into a dedicated local directory (e.g., Documents/Sample_Size_Planning). Use standard OS extraction utilities. Do not run scripts directly from within the archive preview, as relative paths will fail.
3. Verify that the extraction yields the following directory structure:
 - Fundamental-Calc
 - Tool-A
 - Tool-B
 - Tool-C
 - Tool-D
 - Manual: User_Manual.pdf
4. The directories contain the following components:
 - Instructions: Readme.txt
 - A three-file set for each tool:
 - *_Config.R: Configuration and parameter control script.
 - *_Functions.R: Underlying mathematical functions (do not modify).
 - *_Report.qmd: Primary Quarto document used to compile the PDF report.
 - Reference and citation styles: References.bib, apa.csl, ieee.csl
 - Supplementary scripts in Fundamental-Calc:
 - A_Fundamental_Calc_CI_z_vs_t_Intervalls.R: Calculates, visualizes, and compares z- and t-distribution confidence intervals across sample sizes.
 - B_Fundamental_Calc_CI_Clopper_and_Pearson_Nomogram.R: Generates a configurable nomogram of Clopper-Pearson intervals as a function of sample size.

5.1.3 Basic Operation of the R Software Framework

1. In RStudio, navigate via **File > Open** to the respective subdirectory of the intended tool.
2. Open the three-file set (`*_Config.R`, `*_Functions.R`, `*_Report.qmd`).
3. In RStudio, switch to the tab containing the loaded `*_Config.R` configuration file. Set your configuration in the `*_Config.R` file and adjust all variables to match your study design. The procedure and the meaning of the individual variables are also described in the following chapters for the respective tools.
4. If the tool you're using requires a data file, simply specify it in the configuration and set up a column mapping. To ensure everything works smoothly, it's best to copy the data file into the same directory as the tool's set of three files. That way, you won't have to deal with specifying paths in the configuration file.
5. You are now ready to generate a report. Please switch to the tab containing the `*_Report.qmd` file and click the **Render** button in the RStudio menu (see figure).



6. Please also note the comments in the `*.R` files as well as any `Readme.txt` files that may be present.
7. If you've somehow "messed up" the framework and it's no longer working, just unzip it again from the [TAR-File](#) and start over from the beginning.

5.2 Guide Tool A – Sample Size Planning for a Specific Scenario (`./Tool-A`)

The framework is structured so that you do not need to modify the underlying mathematical code. The entire analysis is controlled exclusively via the `*_Config.R` text files.

This tool generates an evaluation report for an individual, specific herd scenario. The tool is controlled exclusively via the file `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R`. Do not modify the code in `SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd` or `SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R`.

1. Open the three tool files in RStudio: `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R`, `SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R`, and `SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd`.

2. Edit the opened configuration file `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R` in the corresponding tab in RStudio. Adjust the values within the lists to match your study design. Because this is an R script, ensure exact syntax for numbers and text strings. Comment lines provide syntax examples. Logical values must be written in uppercase: TRUE or FALSE. Configure the parameters as follows:

- setup (baseline parameterization): Define herd size (N), assumed prevalence (pi_apriori), confidence level (conf_level), and precision / margin of error (A).
 - N: Herd size, e.g., 200;
 - pi_apriori: Assumed prevalence as a decimal, e.g., 0.1 for 10%;
 - conf_level: Target confidence level for the focus scenario, e.g., 0.95 for 95%;
 - A: Required precision or margin of error, e.g., 0.05 for $\pm 5\%$.
- cluster (cluster structure): Enable cluster-based planning as required (use_cluster = TRUE), define animals sampled per pen (m), the intraclass correlation coefficient (rho), and optionally the limit on physically available pens (k_avail).
 - use_cluster: TRUE to activate cluster sampling, or FALSE for simple random sampling;
 - m: Planned number of animals to be sampled per pen/unit, e.g., 50;
 - rho: Intraclass correlation coefficient (ICC) as a decimal, e.g., 0.1;
 - k_avail: Number of pens physically available in the herd, e.g., 2. Enter NA if the number is unconstrained.
- bayesian_prior (incorporating prior information): Incorporate prior knowledge from preliminary studies (alpha_0, beta_0). For an analysis without prior information, retain both values at 1.
 - alpha_0: Number of positive cases observed in prior studies; default is 1;
 - beta_0: Number of negative cases observed in prior studies; default is 1;
 - Note: Retain both parameters at 1 to specify a flat (non-informative) prior representing no prior information.
- variations (comparison matrix): Modify the c(...) vectors if you wish to evaluate alternative confidence levels or precision margins in the expanded overview table.
- Save `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R` (e.g., via File → Save or Ctrl + S) after making your changes.

3. Generating the PDF report (Render): Once the configuration is saved, proceed as follows:

- a) Open the file `SampleSize_Tool-A_Calc_Report.qmd` in RStudio.
- b) Click the blue Render arrow at the top of the editor toolbar (alternatively: Ctrl + Shift + K).
- c) The script imports your configuration from `SampleSize_Tool-A_Calc_Config.R`, applies finite population correction (FPC) and design effect adjustments, and evaluates four statistical methods. The calculation algorithms are located in `SampleSize_Tool-A_Calc_Functions.R`.

- d) The compiled PDF document opens automatically.
4. Interpretation of results (benchmarks and decision rules) The script applies standard epidemiological decision rules to guide method selection:
- Method benchmark (extreme proportions): The script checks whether the assumed prevalence falls below 20% or exceeds 80%. If so, the compiled report issues a warning, as skewness in the binomial distribution introduces substantial approximation errors in the classical Wald interval. In such cases, exact or asymmetric methods (Clopper-Pearson, Wilson) are recommended.
 - FPC benchmark (finite population correction): The script calculates the sampling fraction relative to total herd size. If this fraction exceeds the 5% threshold, the finite population correction is flagged as mandatory and applied to all calculated sample sizes.
 - ICC benchmark (ρ): The intraclass correlation coefficient is categorized into standard intervals: low (< 0.05), moderate (0.05 to < 0.15), and high (≥ 0.15).
 - Census threshold (sampling frame limit): If cluster inflation or high precision requirements demand more individuals than the total herd size (N), or more pens than physically available (k_{avail}), the script caps the required sample size at the population size N . The report highlights this boundary condition and recommends a complete census.

5.3 Guide Tool B – Customizable Tables for Sample Size Planning (. /Tool-B)

The framework is structured so that you do not need to modify the underlying mathematical code. The entire analysis is controlled exclusively via the `*_Config.R` text files.

This tool generates eight reference tables (rounded up and down across four estimation methods) spanning a user-defined grid. Configuration is controlled exclusively via `SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R`. Do not modify the code in `SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd` or `SampleSize_Tool-B_Grid-Functions.R`.

1. Configuration via `SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R`: Open this file in RStudio. Define the grid dimensions using vectors (`c(...)`):
 - `flock_size`: Herd/flock sizes, e.g., `c(100, 200, 600, 1000)`;
 - `moe`: Required precision or margin of error, e.g., `c(0.01, 0.02, 0.05, 0.10)`;
 - `expected_prevalence`: Assumed prevalence rates as decimals, e.g., `c(0.01, 0.05, 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.50, 0.60, 0.70, 0.80, 0.90, 0.95, 0.99)`;
 - `confidence_level`: Target confidence levels, e.g., `c(0.90, 0.95, 0.99)`;
 - `bayesian_prior` (incorporating prior information): Incorporate prior knowledge from preliminary studies (`alpha_0`, `beta_0`). For an analysis without prior information, retain both values at 1.
 - `alpha_0`: Number of positive cases observed in prior studies; default is 1;

- `beta_0`: Number of negative cases observed in prior studies; default is 1;
 - Note: Retain both parameters at 1 to specify a flat (non-informative) prior without prior knowledge.
 - Important note on table dimensions (PDF layout): The script compiles formatted portrait DIN A4 pages. To prevent irregular page breaks or compressed table rows at the bottom margin, printable space is constrained. As a practical rule, the product of evaluated herd sizes and prevalence levels must not exceed 52 rows per page:
 - Standard setup: 4 herd sizes $\times$ 13 prevalence levels = 52 rows $\rightarrow$ clean page break.
 - Prevalence focus: 2 herd sizes $\times$ 25 prevalence levels = 50 rows $\rightarrow$ clean page break. If substantially more parameter combinations are required, generate two separate PDF reports sequentially (e.g., Report 1 for small herds, Report 2 for large herds).
 - Save the configuration (Ctrl + S).
2. Generating the PDF report (Render): Once the configuration is saved:
- a) Open the file `SampleSize_Tool-B_Grid_Report.qmd` in RStudio.
 - b) Click the blue Render arrow at the top of the editor toolbar (alternatively: Ctrl + Shift + K).
 - c) The script imports your configuration from `SampleSize_Tool-B_Grid_Config.R` and executes calculations via `SampleSize_Tool-B_Grid_Functions.R`.
 - d) The compiled PDF document opens automatically and is saved in the working directory.

5.4 Guide Tool C – Post-Hoc Analysis of Confidence Intervals (. / Tool-C)

The framework is structured so that you do not need to modify the underlying mathematical code. The entire analysis is controlled exclusively via the `*_Config.R` text files.

This tool evaluates how inaccurate planning assumptions or fixed sample sizes impact the achieved precision and inferential validity of a study when the actual prevalence observed in the field deviates from prior expectations. Operation is controlled exclusively via `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Config.R`. Do not modify the code in `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd` or `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Functions.R`.

1. Configuration via `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Config.R`: Open this file in RStudio. Define the parameters for the post-hoc analysis within the `list(...)` structure:
 - `N`: Actual herd size, fixed integer, e.g., 200;
 - `n`: Actual sample size examined, fixed integer, e.g., 140;
 - `assumed_prev`: Originally assumed prevalence, e.g., 0.05 (5%);
 - `target_moe`: Originally targeted margin of error, e.g., 0.02 ($\pm 2\%$);
 - `conf_level`: Target confidence level, e.g., 0.95 (95%);

- `observed_prevalence`: Scenario vector of actual prevalences observed in the field, e.g., `c(0.01, 0.025, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35, 0.40, 0.45, 0.50)`;
 - `bayesian_prior` (incorporating prior information): Incorporate prior knowledge from preliminary studies (`alpha_0`, `beta_0`). For an analysis without prior information, retain both values at 1.
 - `alpha_0`: Number of positive cases observed in prior studies; default is 1;
 - `beta_0`: Number of negative cases observed in prior studies; default is 1;
 - Note: Retain both parameters at 1 to specify a flat (non-informative) prior without prior knowledge.
 - Save the configuration (Ctrl + S).
2. Generating the PDF report (Render): Once the configuration is saved:
- a) Open the file `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Report.qmd` in RStudio.
 - b) Click the blue Render arrow at the top of the editor toolbar (alternatively: Ctrl + Shift + K).
 - c) The script imports your configuration from `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Config.R` and executes calculations via `SampleSize_Tool-C_PostHoc_Functions.R`.
 - d) The compiled PDF document opens automatically and is saved in the working directory.

5.5 Guide Tool D – Impact of Diagnostic Uncertainty on Confidence Intervals (. / Tool-D)

The framework is structured so that you do not need to modify the underlying mathematical code. The entire analysis is controlled exclusively via the `*_Config.R` text files.

This tool quantifies and visualizes the effects of imperfect diagnostic sensitivity and specificity on confidence intervals during trait scoring. Diagnostic uncertainty is evaluated using a bootstrapping procedure, contrasting the classical Wald interval against probabilistic simulation. Operation is controlled exclusively via `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Config.R`. Do not modify the code in `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd` or `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Functions.R`.

1. Configuration via `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Config.R`: Open this file in RStudio. Define the parameters of the conducted study within the `list(...)` structure:
 - a) Parameters of the conducted study:
 - `N`: Actual herd size, fixed integer, e.g., 5000;
 - `n`: Actual sample size examined, fixed integer, e.g., 150;
 - `observed_cases`: Number of confirmed positive animals observed, e.g., 30;
 - `conf_level`: Target confidence level, e.g., 0.95 (95%);
 - b) Diagnostic accuracy (modeled as beta distributions):

- bayesian_prior of sensitivity (Se): e.g., approx. 80% (20% false negatives):
 - Se_alpha: Positive parameter / true positive cases, e.g., 80;
 - Se_beta: Negative parameter / false negative cases, e.g., 20;
 - bayesian_prior of specificity (Sp): e.g., approx. 90% (10% false positives):
 - Sp_alpha: Negative parameter / true negative cases, e.g., 90;
 - Sp_beta: Positive parameter / false positive cases, e.g., 10;
- c) Save the configuration (Ctrl + S).
2. Generating the PDF report (Render): Once the configuration is saved:
- a) Open the file `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Report.qmd` in RStudio.
 - b) Click the blue Render arrow at the top of the editor toolbar (alternatively: Ctrl + Shift + K).
 - c) The script imports your configuration from `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Config.R` and executes calculations via `SampleSize_Tool-D_Bootstrap_Functions.R`.
 - d) The compiled PDF document opens automatically and is saved in the working directory.

6 Citation, Feedback, Methods

6.1 Citation and Scientific Use of the R Software Framework

If you use this framework for sample size planning and study design in a scientific publication, dissertation, or project report, please cite it accordingly. Properly citing the tools used is a cornerstone of reproducibility (Open Science) and helps other researchers transparently understand your methodological decisions (e.g., the choice of cluster parameters or the incorporation of prior knowledge). Please cite the tool as follows (or adapt it to your journal's citation style):

Sample Size Calculation

Kulig, Boris; Schäfer, Bertram; Wilczek, Ulrike; Lange, Anita; Hensel, Oliver; Jung, Lisa. (2026). Statistical Framework not only for Precision Livestock Management and Ethology, but for performing Sample Size Calculation for Binomially Distributed Traits, Incorporating Simple Sample Size Planning, *Post-Hoc* Analysis, Confidence Interval Inflation, Bayesian Integration of Prior Knowledge and Sampling Uncertainty; Universität of Kassel, Faculty of Organic Agricultural Sciences, Department of Agricultural and Biosystems Engineering. DaKS: <https://doi.org/10.48662/daks-XXX>; [17]

Methodological details in manuscripts: Report the mathematical formulation used (such as Clopper-Pearson exact inversion or iterative Wilson score calculations) alongside references to R and the relevant software packages.

6.2 Feedback, Error Reporting, and Open-Source Collaboration

Applied livestock ethology and precision livestock management are evolving rapidly. These frameworks are therefore not intended to be rigid, final products, but rather “living documents” and a methodological foundation for the community. We expressly invite the scientific community to critically evaluate these tools and actively contribute to their improvement. Here's how you can help:

- *Error messages (bugs):* When the script crashes or RStudio throws an error that is not due to a typo in the configuration.
- *Methodological preferences:* Is there a specific planning procedure or feature missing or an inquiry regarding additional sampling designs (e.g., stratified sampling schemes).
- *Code contributions:* Have you programmed a clever calculation function or a plot extension for the PDF output yourself?

Please send your feedback, bug reports, or code extensions directly by email to: Boris Kulig bkulig@uni-kassel.de. Help us make this framework the standard tool for robust study designs in the field of animal welfare!

6.3 Brief Overviews of Statistical Methods

- *Wald/Cochran (Normal Approximation):*

The classical Wald method is the most widely used standard procedure in the literature for calculating case numbers and confidence intervals. It is based on an approximation formula that assumes a symmetric distribution of the prevalence estimate. However, at the extremes of the binomial distribution (prevalences $\pi < 20\%$ and $\pi > 80\%$ or $\pi < 30\%$ and $\pi > 70\%$, depending on the source), this simplification leads to mathematical distortions, which is why the method is not recommended for extreme prevalences.

- *Wilson-Score-Intervall:*

The Wilson score interval is a mathematical extension of the normal approximation that effectively compensates for asymmetries in the data distribution. The method shifts the midpoint of the confidence interval slightly toward 50%, thereby reliably preventing illogical confidence limits below 0% or above 100%. In modern epidemiology, the Wilson interval is considered the absolute “gold standard” for approximate calculations.

- *Clopper-Pearson (Exact Method):*

The Clopper-Pearson method does not use any approximation formulas and calculates confidence intervals iteratively, directly from the underlying, exact binomial distribution. It is a strictly conservative method that guarantees the required confidence level under all circumstances. In practice, however, this uncompromising mathematical certainty often results in the method systematically requiring the largest sample sizes.

- *Bayesian Credible Interval:*

The Bayesian approach integrates empirical prior information about conjugate beta distributions into sample size planning and calculates so-called credibility intervals. These are characterized by their ability to integrate existing prior knowledge into the planning process in a structured manner. Previous positive and negative findings are parameterized as $Beta(\alpha_0, \beta_0)$. Specifying a flat prior distribution ($Beta(1, 1)$) – which assumes absolute unknownness – leads to interval estimates that are very similar to the exact frequentist limits.

All four tools automatically apply standard epidemiological functions to help you select the appropriate method. The following benchmarks are stored in the system:

- *Method Selection:* The classic Wald method (normal approximation) is prone to error at the extremes of the binomial distribution. If your estimated prevalence is $\pi < 20\%$ and $\pi > 80\%$ or $\pi < 30\%$ and $\pi > 70\%$, the scripts will issue a methodological warning and recommend “exact” inversions (Clopper-Pearson) or the asymmetric Wilson score interval.
- *Ceiling vs. Floor (Rounding Up/Down):* Since sample sizes often result in decimal numbers, the tables always provide two options. Rounding up (Ceiling) results in a methodologically strict and conservative plan. Rounding down (Floor) is often tolerated for ethical reasons (to avoid unnecessary interventions), but comes at the cost of a marginal loss of statistical power.
- *Finiteness Correction (FPC):* If the calculated sample size exceeds 5% of the population, Tool A flags the FPC as “mandatory”.

- *The census threshold (N)*: If the calculated design (e.g., due to an extremely high cluster design effect or high precision requirements) calls for more animals than the herd size, the script caps the number of cases. The tables display the value N . This indicates that a sample is no longer feasible here and that a census of all animals must be conducted instead.
- *Sampling frame limit (k_{avail})*: If there are physically fewer pens in the barn than the cluster design statistically requires, Tool A triggers an alert and explains the consequence (a mandatory increase in the number of animals per pen, which in turn inflates the design effect).

Literatur

- [1] R Core Team, *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, Version 4.5.3, Vienna, Austria, 2026. Adresse: <https://www.r-project.org/>
- [2] Posit Team, *RStudio: Integrated Development Environment for R*, Boston, MA, USA, Feb. 2026. Adresse: <http://www.posit.co/>
- [3] J. J. Allaire, C. Teague, Y. Xie, C. Dervieux und G. Woodhull, *Quarto*, Version 1.9, 2026. DOI: [10.5281/zenodo.5960047](https://doi.org/10.5281/zenodo.5960047) Adresse: <https://quarto.org/%20https://github.com/quarto-dev/quarto-cli>
- [4] Y. Xie, *knitr: A General-Purpose Package for Dynamic Report Generation in R*, Vienna, Sep. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.knitr](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.knitr) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=knitr>
- [5] J. Stephens und K. Simonov, *yaml: Methods to Convert R Data to YAML and Back*, Vienna, Dez. 2025. DOI: [10.32614/CRAN.package.yaml](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.yaml) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=yaml>
- [6] J. J. Allaire u. a., *rmarkdown: Dynamic Documents for R*, Vienna, Sep. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.rmarkdown](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.rmarkdown) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=rmarkdown>
- [7] H. Wickham, R. François, L. Henry, K. Müller und D. Vaughan, *dplyr: A Grammar of Data Manipulation*, Vienna, Apr. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.dplyr](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.dplyr) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=dplyr>
- [8] H. Wickham, *stringr: Simple, Consistent Wrappers for Common String Operations*, Vienna, Nov. 2009. DOI: [10.32614/CRAN.package.stringr](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.stringr) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=stringr>
- [9] H. Wickham, D. Vaughan und M. Girlich, *tidyr: Tidy Messy Data*, Vienna, Juli 2014. DOI: [10.32614/CRAN.package.tidyr](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.tidyr) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=tidyr>
- [10] H. Wickham, *tidyverse: Easily Install and Load the 'Tidyverse'*, Vienna, Feb. 2023. DOI: [10.32614/CRAN.package.tidyverse](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.tidyverse) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=tidyverse>
- [11] H. Wickham u. a., *ggplot2: Create Elegant Data Visualisations Using the Grammar of Graphics*, Vienna, Feb. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.ggplot2](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.ggplot2) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=ggplot2>
- [12] P. Murrell, *grid: The Grid Graphics Package, part of the R base system*, Vienna, Sep. 2026. Adresse: <https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-devel/packages/grid/refman/grid.html#Grid>
- [13] B. Auguie, *gridExtra: Miscellaneous Functions for "Grid" Graphics*, Vienna, Juni 2010. DOI: [10.32614/CRAN.package.gridExtra](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.gridExtra) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=gridExtra>

- [14] R. Iannone u. a., *gt: Easily Create Presentation-Ready Display Tables*, Vienna, Jan. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.gt](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.gt) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=gt>
- [15] B. Kulig u. a., *Statistical Framework not only for Precision Livestock Management and Ethology, but for performing Concordance Analysis and MSA for Scoring Data*, Kassel, Jan. 2026. DOI: [10.48662/daks-542](https://doi.org/10.48662/daks-542) Adresse: <https://daks.uni-kassel.de/handle/123456789/771>
- [16] Y. Xie, *tinytex: Helper Functions to Install and Maintain TeX Live, and Compile LaTeX Documents*, Vienna, Sep. 2026. DOI: [10.32614/CRAN.package.tinytex](https://doi.org/10.32614/CRAN.package.tinytex) Adresse: <https://cran.r-project.org/package=tinytex>
- [17] B. Kulig, B. Schäfer, U. Wilczek, A. Lange, O. Hensel und L. Jung, *Statistical Framework not only for Precision Livestock Management and Ethology, but for performing Sample Size Calculation for Binomially Distributed Traits, Incorporating Simple Sample Size Planning, Post-Hoc Analysis, Confidence Interval Inflation, Baye*, Kassel, Sep. 2026. DOI: [10.48662/daks-559](https://doi.org/10.48662/daks-559) Adresse: <https://daks.uni-kassel.de/handle/123456789/XXX>