# Bio Matemática

15

XXVIII CNMAC – São Paulo/SP

IMECC – UNICAMP

Campinas
2005
ISSN 1679-365X

Orquídea - Foto G.L.Diniz

**Comitê Editorial**

- Rodney C. Bassanezi (Coordenador)
- João Frederico C. A. Meyer
- Laécio C. Barros
- Laércio L. Vendite
- Sílvio A. Pregnolatto
- Wilson C. Ferreira Jr.
- Yuri D. Bozhkov
- Geraldo L. Diniz

## Prezado(a) Leitor(a)

"*Dream like you'll live forever... ...*
*Love like you´ve never been hurt... ...*
*Work like you don´t need the money...*
*and,*
*Dance like nobody is watching!*"

Satchel Paige http://www.satchelpaige.com/quote2.html

Como esta é a parte de um livro que, de duas, uma, ou não é sequer lida pelo leitor mais ansioso pela matéria em epígrafe, ou, é a única lida pelo leitor desanimado da mesma, torna-se necessário, pelo menos interessante, que seja iniciada por uma justificação, ou seja, com um pré-"prefácio". Para evitar que este argumento cause uma regressão "*ad infinitum*", truncarei o processo nesta segunda etapa.

"Prefácio" é uma palavra que tem óbvias raízes latinas e de significado ululante: "o que se faz com antecedência". Segundo o "Aurélio": "sm. Discurso ou advertência que antecede uma obra escrita; prólogo, proêmio, preâmbulo, introdução". Nenhuma destas alternativas me serve para classificar esta página, já que foi escrita muito depois daquilo que o livro encerra na sua seqüência, aliás, pouco antes do Geraldinho Diniz desistir dela. Alguns, mais espertos em tergiversações, poderiam até contra-argumentar que o "fazer" no caso não é o "escrever" mas, o "ler". Estes, que sigam os seus corações racionais; convido os restantes, se houver, que sigam o meu, mais vagabundo!

E, pensando bem no assunto, se não fosse exigir mais ainda dos editores da Revista de Biomatemática, gostaria de lhes pedir uma "licença poética" para denotar o presente espaço tipográfico de "**Prelúdio**" e, vou explicar o porquê. Para este vocábulo, o "Aurélio" segue o uso comum e o define em termos musicais, o que, suponho, não caiba neste contexto. Entretanto, as suas raízes latinas são muito mais ricas, e, estas sim, servirão melhor para o nosso propósito. A palavra latina chave neste caso é "*ludens*" cujo significado original está bem representado no vocábulo "lúdico" que o "Aurélio" caracteriza como: "Adj.-Relativo a jogos, brinquedos e divertimentos". Ora, dirão os mais sisudos, compenetrados e de visão focalizada: 'mas o que se faz aqui é pesquisa[1], "coisa séria", de "gente com responsabilidade", uma atividade altamente racional, única e peculiar do *homo sapiens*' !! Nada contra, de minha parte, com respeito a estes três atributos que, na verdade, muito prezo, desde que subentendidas algumas ressalvas semânticas. A mais importante, é a de que eles não sejam antagônicos à existência de aspectos lúdicos, embora, com freqüência, irritante mesmo, venham medidos segundo a ausência destes últimos.

E, é aí que está o busílis sobre o qual gostaria de chamar a atenção do(a) leitor(a).

Não há trabalho científico notável sem esforço, a questão fundamental é a origem deste esforço. Se ele for impulsionado tão somente pelo "esporão" monetário e/ou social, o resultado não será agradável para quem o fez e, certamente, carregará esta marca cinzenta até o(a) seu(ua) possível leitor(a). O trabalho "triste" pode ser resultado de um enorme esforço, mas será como um parto traumático que somente os especialistas têm prazer, ou vantagens, em assistir.

Na verdade, a matemática "pura" tem sido utilizada freqüentemente como "filtro" ou "chicote" sociais, objetivos completamente alheios ao seu caráter intelectual ou científico. Basta que observemos as ementas e os exames de concursos, vestibulares e outros! Ou seja, aprendemos a "engolir giletes" para obtermos a aprovação em doloroso exame nesta tão difícil quanto inútil arte. Com isso,

[1]Sobre a peculiar e interessante raiz latina do termo português "pesquisa", obviamente ligada à palavra "pesce" e, completamente distinta da etimologia dos termos correspondentes em inglês ("research"), francês ("recherche"), italiano ("ricerca") e em espanhol ("investigación"), trataremos alhures.

alcançamos uma almejada promoção na escala social, ainda que não se tenha mais a "oportunidade" de praticar a arte, a menos que sigamos a carreira padrão do magistério.

Muito já foi dito do esforço que um trabalho científico exige e da necessidade de que os seus resultados signifiquem algum progresso humano, e muito mais se poderia dizer com farta e sólida argumentação. No entanto, o que queremos enfatizar aqui é a importância do ingrediente lúdico da atividade de pesquisa. O historiador holandês J. Huizinga foi um dos primeiros a enfatizar a importância do "motor lúdico" nas realizações humanas, especialmente nas de caráter intelectual. Para ressaltar este traço fundamental da natureza humana ele cunhou o termo "*homo ludens*" e deu origem a um movimento contra-cultural que se opõe ao "*homo faber*", isto é, aquele que faz, faz, e faz.....até cair morto, sem nunca fazer outra coisa além de "fazer". Assim é que um "prelúdio", pretende indicar uma atividade que abrange muito mais do que aquela que foi simplesmente "prefaciada".

Se algum trabalho que se encontra nas páginas seguintes ou, em qualquer outro lugar, foi realizado apenas e tão somente com suor e lágrimas mentais, a sua leitura mostrará isto de alguma maneira triste e o seu impacto, sob o ponto de vista intelectual, dificilmente justificará sequer a árvore que foi sacrificada para o papel que o suporta.

A fascinação da matemática aplicada, e, particularmente da biomatemática como campo de pesquisa, não é que ela exija menor esforço intelectual, pois, cada um empregará nela toda a energia que o seu "*motus ludens*"(?) consiga produzir. A sua grande vantagem começa pelo seu espaço lúdico extraordinariamente amplo e variado, que dá motivação suficiente para a produção de trabalhos com calibre intelectual difícil de ser empatado, e oferece ainda oportunidades de contribuição para o progresso humano impossíveis de serem superados por qualquer outra atividade; afinal, ali estamos tratando da vida!

Portanto, leitor(a), neste pré-lúdio fica o convite para você se "enturmar" (neol.) com os atores que se apresentam a seguir e, que participe de uma atividade que é o palco natural para o exercício das três facetas mais importantes do gênero humano: *Homo sapiens*, *Homo ludens* e *Homo mensch* (˜Ídiche/Alemão: "pessoa digna, de valor").

Wilson Castro Ferreira Jr. Campinas, 08 de Agosto de 2005.

# Índice

*Um Modelo Diferencial de Macroevolução: primeiros resultados*, R. A. Assis & W. C. Ferreira Jr. 1

*Inteligência Coletiva: Rotação da Direção de Busca de Presas em uma Colônia de Formigas (Eciton burchelli)*, R. A. Assis & W. C. Ferreira Jr. 13

*Using Fuzzy sets theory to analyze environmental condition in order to improve animal productivity*, M. Amendola, M. Mollo Neto & V. F. Cruz 29

*Modelo Matemático Fuzzy para Descrever o Crescimento do Câncer de Próstata*, M. J. P. Castanho, L. C. de Barros, L. L. Vendite & A. Yamakami 41

*Um Modelo Presa-Predador e a Morte Súbita dos Citros*, M. S. Peixoto, L. C. Barros & R. C. Bassanezi 53

*Controle Fuzzy de Biocida na Morte Súbita dos Citros*, M. S. Peixoto, L. C. Barros & Rodney C. Bassanezi 67

*Modelagem Fuzzy de Diagnóstico Médico e Monitoramento do Tratamento da Pneumonia*, W. A. Lopes, R. S. M. Jafelice & L. C. Barros 77

*Um estudo de modelagens alternativas: Podridão da Maçã*, Rodney C. Bassanezi & Geraldo Pompeu Jr 97

*Descarga de Água de Produção em Operações offshore: Modelagem Matemática, Aproximação Numérica e Simulação Computacional*, Julio C. Vásquez & João F. C. A. Meyer 119

*Aprendizagem Escolar e Qualidade de Vida via Modelagem Matemática e Simulações*, J. F. C. A. Meyer & N. S. P. Stahl 137

*O uso de Controladores Fuzzy para Resolução de Equações Diferenciais Ordinárias*, M. R. B. Dias & L. C. Barros 147

*Extensión de un modelo de difusión de partículas contaminantes en medios acuíferos planos a la superficie esférica*, R. M. Mendez Parra & D. A. Villa Zapata 157

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 1-12* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Um Modelo Diferencial de Macroevolução: primeiros resultados

Raul Abreu de Assis[1],
Dep. de Matemática, UNEMAT, 78390-000 – Barra do Bugres/MT.

Wilson Castro Ferreira Jr.[2],
DMA, IMECC–UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.

**Resumo**. Neste trabalho apresentamos um modelo diferencial de macroevolução, detalhando o processo de modelagem para obtenção das equações diferenciais. Primeiros resultados, obtidos a partir da análise numérica, indicam que o comportamento do modelo depende de um parâmetro adimensional das equações, tendo pouca dependência das condições iniciais.

***Palavras-chave***: *Evolução; Modelagem; Equações diferenciais; Biomatemática.*

## 1 Introdução e Objetivos

No ano de 1859, a publicação do livro "A Origem das Espécies", de Charles Darwin, revolucionou a maneira de se pensar em Biologia. Sob a luz da Teoria da Evolução através da seleção natural, muitas observações biológicas puderam ser melhor compreendidas e interpretadas. Como exemplo, poderíamos citar a similaridade entre os organismos de espécies distintas,

[1]raulassis@yahoo.com
[2]wilson@ime.unicamp.br

que, atualmente, pode ser explicado através da existência de uma espécie ancestral comum não muito distante.

Sendo umas das mais poderosas ferramentas do raciocínio humano, a Matemática também foi, e é, utilizada para melhor compreensão do fenômeno de evolução das espécies. R. A. Fisher foi um dos primeiros a propor modelos matemáticos para o processo de propagação de genes vantajosos (Fisher, 1937). Através do desenvolvimento da genética e com uma maior compreensão dos mecanismos que regulam a evolução dos organismos, a aplicação de modelos e conceitos matemáticos nessa área de estudo desenvolveu-se significativamente, sendo conhecida atualmente como "Genética de Populações"- (Crow e Kimura, 1970; Hartl e Clark, 1989).

A Genética de Populações propõe modelos para se estudar a variação da freqüência dos genes em uma certa população, sendo, em sua grande maioria, modelos estocásticos. A velocidade de multiplicação de um gene mutante, sua chance de permanência na espécie, a freqüência de indivíduos homozigotos e heterozigotos, são objetos de estudo da Genética de Populações. Dessa forma, a Genética de Populações se estabeleceu como uma ferramenta de análise teórica dos processos evolutivos.

Contudo, do ponto de vista biológico, no estudo do processo de evolução há uma distinção entre *micro* e *macroevolução*(Eldredge e Gould, 1972; Eldredge, 1992). Como o próprio nome sugere, o processo de *microevolução* é aquele em que ocorrem "pequenas" modificações na espécie em estudo, ocorrendo de geração em geração. Um exemplo clássico de *microevolução* é o caso da espécie *Biston betularia* (uma mariposa) que teve a freqüência do gene que determinava uma cor clara diminuída em sua população durante o período da revolução industrial na Inglaterra (Sargent et al., 1998; Grant et al., 1995). Nesse período, a poluição do ar fez com que as superfícies das árvores ficassem escuras, tornando os indivíduos de cor clara presas de fácil localização por parte dos predadores, de maneira que houve uma seleção natural dos indivíduos (e portanto dos genes) que determinam uma cor escura. Um exemplo de *macroevolução* é a descendência das espécies

de baleias dos mamíferos terrestres. Essa mudança só pode ocorrer em uma larga escala de tempo, comparada com àquela da microevolução, e apresenta mudanças radicais no organismo da espécie, podendo gerar, durante o processo, espécies totalmente diferentes, dependendo da "direção" de evolução (Eldredge, 1992).

Uma diferença fundamental entre micro e macro evolução é que primeira pode ser estudada diretamente, através de experimentos, enquanto a segunda, devido à sua natureza lenta, só pode ser estudada indiretamente, como por exemplo, através de fósseis, análise de seqüências de DNA e, é claro, modelos matemáticos. Naturalmente, isso torna muito mais difícil compreender os mecanismos e processos macroevolutivos do que os processos da microevolução.

Os modelos utilizados em Genética de Populações refletem, em geral, os processos de microevolução, geração após geração. Existe ainda uma controvérsia se a macroevolução é apenas microevolução acumulada ou se esta possui outros mecanismos além daqueles da microevolução (seleção natural, variação genética, fluxo de genes). De qualquer forma, os modelos da Genética de Populações que visam reproduzir a evolução da freqüência de genes na população refletem, na verdade, exatamente esses mecanismos de microevolução. Propomos, então, uma abordagem diferenciada para o processo macroevolutivo, onde "esquecemos", os detalhes das distribuições de freqüência de genes e buscamos criar um modelo "macro", onde tenhamos a visão do processo em larga escala de tempo.

De maneira a tornar claras nossas limitações e intenções, listamos a seguir quais são e quais *não* são os nossos objetivos neste artigo:

- Buscamos criar um modelo de macroevolução baseado em uma modelagem em um espaço de aspecto, onde a população se distribui, sujeita às forças de seleção natural e variação genética. Esse modelo pode servir como alternativa aos modelos estocásticos da Genética de Populações.

- Ainda que em fase inicial, testar o comportamento do modelo, através de simulações numéricas.
- *Não* temos a intenção de comparar uma abordagem e outra, apenas oferecer uma alternativa para a modelagem de macroevolução.

# 2 Modelagem Matemática

Nesta seção apresentamos o processo de modelagem através do qual podemos obter as equações diferenciais que regem o modelo.

## 2.1 O Espaço de Aspecto

O conceito de espaço de aspecto, amplamente utilizado em dinâmica de fluidos e na modelagem da movimentação de populações (Lin e Segel, 1988) é a abordagem que utilizaremos para modelar o processo de macroevolução. Os indivíduos de uma população se distribuem em um "espaço de características". Esse espaço é abstrato, teórico, e sobre ele, ocorrem os processos de seleção natural e variação genética.

Para criar um exemplo mais claro, suponha que estamos estudando apenas a evolução do *tamanho da asa* em uma certa espécie. Então o espaço de aspecto, nesse caso, seria um intervalo da reta real, onde se distribuem os indivíduos, sendo que a seleção natural pode favorecer certos indivíduos com tamanho de asa dentro de um intervalo específico e a variação genética é responsável por gerar indivíduos de diferentes tamanhos de asas. Deixamos claro que esse exemplo é apenas para uma melhor compreensão do modelo, pois não estamos interessados em criar modelos específicos de evolução de certas características ou traços em uma população, senão que estamos interessados no *movimento* de uma população através de um espaço de aspecto abstrato.

De maneira a tornar viável a análise e também por ser esse o primeiro modelo criado com essa intenção, tomaremos nosso espaço de aspecto como

sendo um intervalo da reta real, a dizer $\Omega = [0, L]$. Esse será o espaço onde a população irá movimentar-se, sujeita às forças de seleção natural e variação genética.

## 2.2 Modelo Discreto

O modelo pode ser deduzido via uma discretização do domínio $\Omega$, para depois tomar-se o limite para o caso contínuo, ou através de uma modelagem de meio contínuo, utilizando-se os princípios de conservação. Aqui apresentaremos apenas o processo de modelagem através da discretização do domínio, por julgar que a mesma torna as idéias mais claras e acessíveis à compreensão. A modelagem via princípios de conservação será apresentada em outra oportunidade.

Dessa forma, dividimos o domínio em $N$ intervalos iguais, sendo $\Delta x$, o tamanho desses intervalos. Dessa forma, criamos $N$ classes, e definimos $U_i$, $i = 1, ...N$ como sendo o número de indivíduos no intervalo $[(i-1)\Delta x, i\Delta x]$. Além disso, consideramos um intervalo de tempo $\Delta t$, sob o qual analisaremos a variação no número de indivíduos da classe $i$ no instante $t$, que denotamos por $U_i$.

Teremos, como ingredientes do modelo, os seguintes fatores, como na figura 1:

1. Reprodução dos indivíduos da classe $U_i$, gerando indivíduos semelhantes aos mesmos, dentro da própria classe $U_i$.

2. Reprodução dos indivíduos da classe $U_i$, gerando indivíduos distintos aos mesmos, das classes $U_{i-1}$ e $U_{i+1}$. Esse ingrediente, na verdade, representa a variação genética da microevolução.

3. Existência de uma "função de adaptação", que varia de acordo com a classe do indivíduo.

4. Taxa de reprodução diferenciada entre indivíduos mais aptos e menos aptos, representando a "força" de seleção natural.

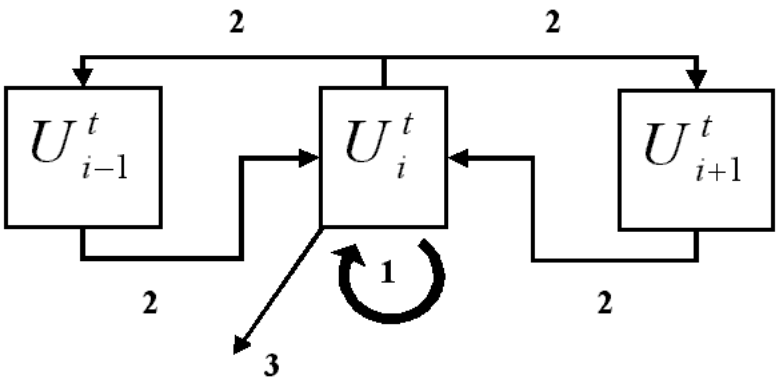


Figura 1: Esquema dos ingredientes a serem incluídos no modelo. $U^t_{i-1}$ também pode ser escrito como $U^t_{i-1} = U^t_{x-\Delta x}$, $U^t_i = U^t_x$ e $U^t_{i+1} = U^t_{x+\Delta x}$. **1**- Efeito de reprodução dentro de uma mesma classe. **2**- Efeito de variação genética. **3**- Mortalidade.

5. Mortalidade tipo Verhulst devido à saturação do meio por indivíduos.

Definindo $U^t_i$ como a quantidade de indivíduos na classe $i$ no instante $k$, buscaremos modelar a variação $\Delta U^t_i = U^{t+\Delta t}_i - U^t_i$.

Para incluir os ingredientes 1 e 2, acima, definimos $r$ como a taxa de reprodução no intervalo $\Delta t$, a unidade de $r$ é, então $1/[t]$. Além disso, definimos uma fração $\sigma$ que representa a fração de indivíduos que nascerão em classes distintas dos pais, sendo metade da classe à direita (classe $i-1$) e a outra metade à esquerda (classe $i+1$). Em analogia aos processos de microevolução, $\sigma$ tem o mesmo papel que o da taxa de mutação. Dessa forma, ficamos, por hora, com:

$$\Delta U^t_i = rU^t_i(1-\sigma) + \frac{r\sigma}{2}U^t_{i+1} + \frac{r\sigma}{2}U^t_{i-1} \tag{2.1}$$

onde o primeiro termo representa a reprodução dos indivíduos gerando descendentes dentro da própria classe, enquanto os outros dois termos representam a geração de indivíduos da classe $i$ por parte das populações das classes $i-1$ e $i+1$.

Todavia, se utilizássemos a equação 2.1, nosso modelo estaria representando uma taxa de reprodução *igual* para todas as classes. Como queremos

representar o efeito da seleção natural, devemos relacionar a taxa de reprodução dos indivíduos com uma função de adaptação. Para que essa função represente taxas de reprodução diferenciadas, definimos $f : \Omega \to [0, 1]$ com valores *adimensionais*, onde 0 representa a impossibilidade de reprodução e 1 a taxa máxima de reprodução da espécie, fazendo:

$$\Delta U_i^t = f(i\Delta x) r U_i^t (1-\sigma) + \frac{r\sigma}{2} f\left((i+1)\Delta x\right) U_{i+1}^t + \frac{r\sigma}{2} f\left((i-1)\Delta x\right) U_{i-1}^t \tag{2.2}$$

isto é, quanto maior o valor de $f$ no intervalo da classe $i$, *maior* será a taxa de reprodução dos indivíduos daquela classe. Por questão de clareza, fazemos $f(i\Delta x) = f_i$, de forma que a equação 2.2 fica:

$$\Delta U_i^t = r f_i U_i^t + \frac{r\sigma}{2}\left(f_{i+1} U_{i+1}^t - 2 f_i U_i^t + f_{i+1} U_{i+1}^t\right) \tag{2.3}$$

Finalmente, modificamos a dinâmica vital da equação 2.3 ($r f_i U_i^t$), que é malthusiana, para uma dinâmica de Verhulst, representando o efeito de saturação do meio e da competição entre os indivíduos, substituindo-a por $r U_i^t (f_i - P/K)$, onde $P = \sum_{i=1}^{N} U_i$ é a população total e $K$ é a constante de saturação do meio, tendo como unidade $[U]$. Assim, a equação para o modelo discreto fica:

$$\Delta U_i^t = r U_i^t (f_i - \sum_{i=1}^{N} U_i/K) + \frac{r\sigma}{2}\left(f_{i+1} U_{i+1}^t - 2 f_i U_i^t + f_{i+1} U_{i+1}^t\right) \tag{2.4}$$

Na figura 2 apresentamos um esquema com a formulação matemática do modelo. Se tomamos na equação 2.3 o limite $N \to \infty (\Delta x \to 0)$ e $\Delta t \to 0$, então a dinâmica contínua que representa o modelo discreto acima é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \bar{r} u (f(x) - \int_{\Omega} u/K) + \frac{\bar{r}\sigma M}{2} \frac{\partial^2 [f(x) u]}{\partial x^2} \tag{2.5}$$

onde $u(x, t)$ representa a *densidade* populacional no ponto $x$ no instante $t$, $\bar{r}$ (que denotaremos por $r$ daqui por diante) é a taxa máxima de reprodução instantânea e $M = \lim_{\Delta x \to 0 \Delta t \to 0} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$, uma condição necessária para

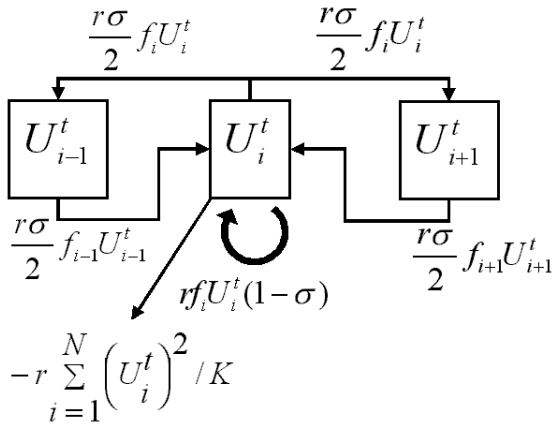


Figura 2: Esquema das equações utilizadas para representar cada um dos efeitos de variação genética, competição, mortalidade e reprodução.

a dedução da equação de difusão, que aqui se repete, devido ao operador discreto $f_{i+1}U_{i+1}^t - 2f_iU_i^t + f_{i+1}U_{i+1}^t$. É possível deduzir essa mesma equação através de princípios de conservação em meios contínuos.

Vale notar que a taxa de variação temporal de $u(x,t)$ vem decomposta como a soma de duas parcelas: $ru(f(x) - \int_\Omega u/K)$ e $\frac{r\sigma M}{2}\frac{\partial^2[f(x)u]}{\partial x^2}$, que no modelo representam as forças de seleção e variação genética, respectivamente.

# 3 Simulações do Modelo

## 3.1 Adimensionalização

Em primeiro lugar, empregamos uma adimensionalização da equação 2.4, fazendo $x^* = x/L$, $t^* = rt$ e $u^* = uL/K$. A equação resultante é, então (já retirando os asteriscos):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u\left(f(x) - \int_0^1 u(z,t)dz\right) + D\frac{\partial^2[f(x)u]}{\partial x^2} \tag{3.1}$$

onde $D = \sigma M/2L^2$.

Como buscamos modelar o processo e macroevolução, temos uma hipótese fundamental a ser incluída no modelo, que não se encontra nas próprias equações: que a *mudança* nos indivíduos, de geração para geração é pequena se comparada com o processo inteiro de *macroevolução*.

Ora, a movimentação dos agentes no espaço de aspecto, se dá devido ao termo difusivo $\frac{r\sigma M}{2}\frac{\partial^2[f(x)u]}{\partial x^2}$ na equação 2.5, e como $r$ é a taxa de reprodução instantânea, $1/r$ é a escala de tempo da reprodução. Para obter a ordem de grandeza da "distância" percorrida pelos agentes nessa escala de tempo basta tomar o coeficiente de difusão $\frac{r\sigma M}{2}$ fazer uma análise dimensional, obtendo $L_{ger} = \sigma M/2L$. Finalmente, incluímos que essa distância deve ser pequena em relação ao domínio inteiro, que tem comprimento $L$, ou seja, $L_{ger}/L = \sigma M/2L^2 = \epsilon \ll 1$.

Assim, o parâmetro adimensional $D$ é um número pequeno $\epsilon$ com relação a 1, uma hipótese fundamental para a representação do processo de macroevolução.

## 3.2 Estabelecimento dos mais aptos

De maneira a testar o comportamento do modelo e sua coerência com os objetivos buscados (isto é, simular o processo de evolução de uma espécie em um espaço de aspecto abstrato), criamos um cenário de simulação onde exista um resultado esperado do ponto de vista biológico, para então, compararmos com o comportamento da modelo matemático.

Nosso primeiro cenário de simulação tem como objetivo testar a capacidade do modelo de fazer com que a população de dirija a regiões de maior valor adaptativo. Para tanto, criamos uma função de adaptação como na figura 3 As condições de contorno adotadas para $u$ são $u(0,t) = u(1,t) = 0$, significando que qualquer indivíduo com essas características não consegue sobreviver, representando a natureza limitada da extensão do domínio. A condição inicial é uma função $u_0(x)$ que representa a distribuição inicial da população.

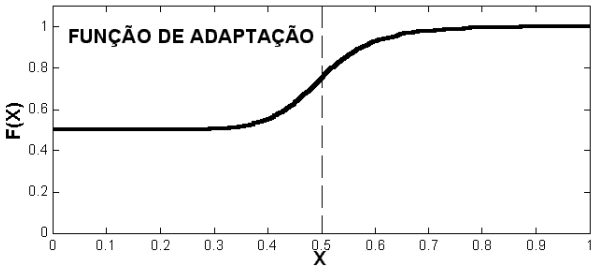


Figura 3: Função de adaptação sobre o espaço de aspecto. A função é dada por $f(x) = 1/2 + (1/2)\dfrac{(x+k)^n}{(x+k)^n + (1/2+k)^n}$, onde $k = 0.01$ e $n = 10$.

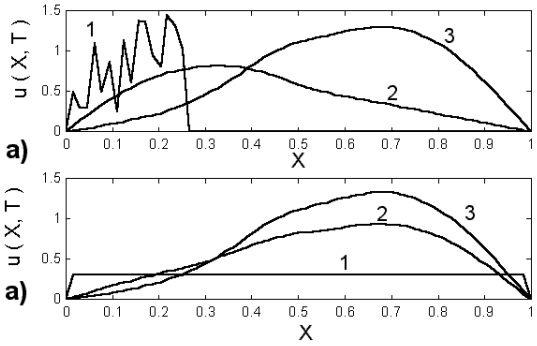


Figura 4: Simulações numéricas do modelo diferencial.$D = 0.01$. **a)** 1- condição inicial, 2- estado do sistema após um intervalo adimensional de 6.25 (100 iterações no método numérico). 3- estado do sistema a partir de 18.25(300 iterações). **b)** 1- condição inicial, 2- estado do sistema após um intervalo adimensional de 3.125 (50 iterações no método numérico). 3- estado do sistema a partir de 12.5(200 iterações).

Do ponto de vista biológico, esperamos, como resultados das simulações, que a população caminhe para regiões de maior valor adaptativo, nesse caso, que a população de concentre na região $[1/2, 1]$. De fato, simulações do modelo com o parâmetro $D < 0.01$ apresentaram o comportamento esperado, com a população rumando para uma distribuição estacionária onde pos indivíduos se concentram na região de maior valor adaptativo, *independentemente* das condições iniciais. Apresentamos, na figura 4 a evolução do sistema para diferentes condições inciciais.

### 3.3 Sobre o valor de D

Simulações para diferentes valores de $D$ apresentaram comportamentos bem distintos, sendo que esse parâmetro parece reger a dinâmica principal do sistema, tendo as condições inciais pouca importância para o estabelecimento da solução estacionária final.

Valores de $D$ não muito pequenos, significam, biologicamente, que a espécie é capaz de mudar muito na escala de tempo da reprodução. Nesse caso, não há um estabelecimento claro dos indivíduos mais aptos. De uma maneira geral, quanto *menor* o valor de $D$, maior é o estabelecimento dos indivíduos mais aptos, e quanto *maior* $D$ menor é esse estabelecimento.

## 4 Conclusões

Dentro de nossos objetivos buscamos apresentar um modelo diferencial de macroevolução que utilizasse uma abordagem diferenciada, que não a análise da freqüência de genes em uma população. Apresentamos os argumentos de modelagem bem como os primeiros resultados de análise, através de simulações numéricas.

A análise do comportamento do modelo deve ser aprofundada, principalmente porque parece haver um dependência direta do valor do parâmetro $D$, o que pode facilitar o estudo de seu comportamento. Um mapeamento

dos resultados das simulações do modelo com relação à esse parâmetro é o próximo passo a ser dado.

Uma vez clara a análise do modelo com relação à esse parâmetro, podemos realizar um reinterpretação biológica do mesmo, confrontando-a com as hipóteses e teorias encontradas no estudo biológico de macroevolução.

Enfim, permanecem amplas possibilidades para o aprofundamento do estudo do modelo, que serão abordadas em trabalhos futuros.

# Referências

Crow, J. F. e Kimura, M. (1970). *An Introduction to Population Genetics Theory.* Harper & Row.

Eldredge, N. (1992). *Macroevolutionary Dynamics: Species, Niches and Adaptive Peaks.* McGraw-Hill.

Eldredge, N. e Gould, S. J. (1972). Punctuated equilibria: an alternative to phyletic gradualism. *Models In Paleobiology*, 5:82–115.

Fisher, R. A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Ann. Eugenics*, 7:353–369.

Grant, B. S., Owen, D. F., e Clarke, C. A. (1995). Decline of melanic moths. *Nature*, 373:565.

Hartl, D. L. e Clark, A. G. (1989). *Principles of Population Genetics.* Sinauer, Sunderland, Mass, USA.

Lin, C. C. e Segel, L. A. (1988). *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences.* SIAM, USA.

Sargent, T. D., Millar, C. D., e Lambert, D. M. (1998). The classical explanation of industrial melanism. *Behavioral Ecology*, 30:299–322.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 13-28* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Inteligência Coletiva: Rotação da Direção de Busca de Presas em uma Colônia de Formigas (*Eciton burchelli*)

Raul Abreu de Assis[1],
Dep. de Matemática, UNEMAT, 78390-000 – Barra do Bugres/MT.

Wilson Castro Ferreira Jr.[2],
DMA, IMECC–UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.

**Resumo**. Neste trabalho estendemos o modelo de correição de Denebourg *et al.* para estudar a escolha da direção de busca de presas em uma colônia de formigas (*Eciton Burchelli*). Os resultados das simulações do modelo sugerem que a espécie é capaz de escolher eficientemente a direção de busca de presas, através de um processo auto-organizado. Essa eficiência é uma propriedade emergente do sistema, indicando que a espécie biológica pode estar empregando uma estratégia de "Inteligência de Bando".

***Palavras-chave***: *Forrageamento; Modelagem; Colônia de Formigas.*

## 1 Introdução

Sob diversas circunstâncias, colônias de insetos sociais, em particular, colônias de formigas, devem tomar "decisões". Um novo local para o ninho,

[1]raulassis@yahoo.com
[2]wilson@ime.unicamp.br

uma direção para a busca de presas, qual dentre várias fontes de alimento deve ser explorada, são exemplos de opções que são feitas pela colônia. Entretanto, as formigas e os insetos sociais de uma maneira geral, apresentam uma característica interessante em sua estrutura social: a ausência de um gerenciamento, de um comando central de onde partem essas "decisões" da colônia. Na verdade, em muitos casos, ficou demonstrado que essas decisões são alcançadas através da própria dinâmica de interação dos agentes entre si e com o meio, através de um processo auto-organizado (Bonabeau et al., 1999; Camazine e Sneid, 1991; Denebourg et al., 1989).

Observamos que, além de tomar uma "decisão", as colônias de insetos sociais o fazem, de modo geral, de maneira *eficiente*, pois, caso contrário, não seriam capazes de sobreviver ao processo de seleção natural. Nosso objetivo neste artigo é estudar o processo de escolha de uma direção coletiva de busca de presas na espécie *Eciton burchelli*, mostrando que um processo de tomada de decisão eficiente pode emergir da própria dinâmica do sistema.

# 2 O Fenômeno de Correição

## 2.1 Formigas-Correição

O fenômeno de correição é tido como um dos mais impressionantes do mundo dos insetos. Durante uma correição da espécie *Eciton burchelli*, cerca de 200 mil indivíduos se engajam na busca de presas, realizando verdadeiros "arrastões", capturando várias espécies de insetos (formigas, vespas, gafanhotos) e até mesmo pequenos vertebrados (Gotwald Jr., 1995). Durante a correição, os indivíduos criam uma frente de busca, que avança, capturando presas, formando atrás dela uma fila organizada, onde os indivíduos transportam presas de volta ao ninho, como na figura 1- c).

Para coordenar as ações dos indivíduos, as formigas utilizam uma substância química, denominada feromônio. Esse feromônio é a principal fonte de orientação dos indivíduos, uma vez que eles são praticamente cegos (Franks

et al., 1991). Dessa maneira, o padrão de correição é um resultado da interação dos agentes, que depositam feromônio e o utilizam para se orientar.

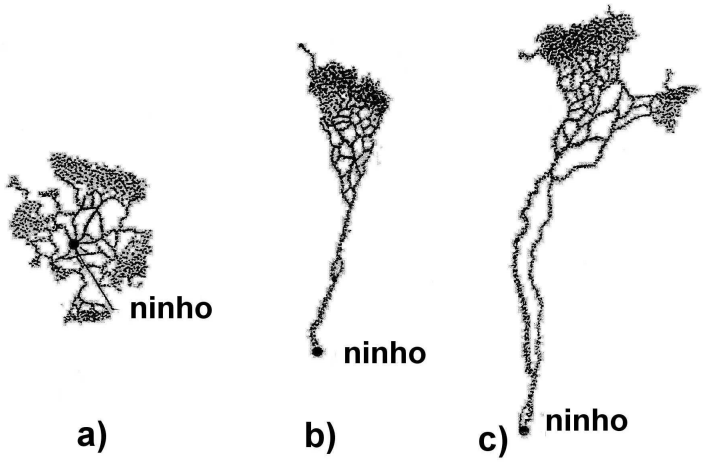


Figura 1: Formação do padrão de correição na espécie *Eciton Burchelli*, extraído de (Gotwald Jr., 1995, p. 114). **a)** Durante o início da correição ainda não há uma direção coletiva bem estabelecida. **b) e c)** Os indivíduos se concentram em apenas *uma* direção de busca, criando uma direção coletiva.

Uma característica que se observa nos padrões de correição dessa espécie é a emergência de uma direção coletiva de correição, como ilustrado na figura 1. Durante o período estacionário (que dura aproximadamente três semanas), a colônia realiza diversas correições, geralmente uma por dia, devendo, a cada nova correição "escolher" uma direção coletiva de busca de presas (Hölldobler e Wilson, 1990).

Estudos sobre a seqüência de escolha de direções da espécie *Eciton burchelli* (Franks e Fletcher, 1983), sugerem que a escolha *não* é aleatória, senão que a colônia evita repetir correições em direções já utilizadas. Dessa forma, a espécie exibe um comportamento eficiente, evitando regiões com baixa densidade de presas.

A questão que nos ocupa então, é a compreensão do processo de escolha de direção, considerando-se que os indivíduos são extremamente simples sob

o ponto de vista comportamental. Isto é, não deve ser incluída nenhuma percepção teleológica e nem capacidades modulares para resolução individual de problemas complexos constituidos de várias etapas. Enfim, as formigas são diligentes e sistemáticas , mas não criativas.

## 2.2 O Modelo

O modelo proposto é uma extensão dos trabalhos de Bonabeau et al. (1999); Denebourg et al. (1989) e Franks et al. (1991). A seguir, listamos as principais hipóteses do modelo.

1. Por simplicidade, representamos o plano bidimensional onde ocorre a correição como uma malha discreta. Utilizamos uma matriz $A(i, j)$ para representar a quantidade de feromônio em cada ponto e uma matriz $C(i, j)$ para representar a quantidade de presas em cada ponto da malha. A atualização temporal do sistema é feita de maneira discreta

2. Agentes que não estão carregando presas depositam $F_s$ unidades de feromônio ao se movimentar para qualquer ponto da malha. Agentes carregando presas depositam $F_c$ unidades de feromônio ao se movimentar, simulando o recrutamento de indivíduos para regiões com presas. Há um limite de saturação de $F_{sat}$ unidades de feromônio por ponto da malha, acima dessa quantidade não há mais o depósito de feromônio. Uma fração $\sigma$ do feromônio evapora por iteração do modelo.

3. Ao deixar o ninho, cada agente escolhe uma direção principal de busca (de 1 a 8), de acordo com a quantidade de feromônio nos pontos adjacentes à colônia, conforme figura 2. A probabilidade de escolha de cada direção é determinada pela expressão a seguir:

$$P_i = \frac{(F_i + \bar{k})^{\bar{n}}}{\sum_{j=1}^{8}(F_j + \bar{k})^{\bar{n}}} \qquad i = 1, \ldots, 8. \tag{2.1}$$

   onde $\bar{k}$ e $\bar{n}$ são parâmetros.

4. Uma vez definida a direção principal de busca, o agente passa a escolher somente entre *três* possíveis direções de movimentação, conforme figura 2- b). A probabilidade de escolha dessas direções é dada por:

$$P_i = \frac{(F_i + k)^n}{\sum_{j=-1}^{1}(F_{p+j} + k)^n} \qquad i = p-1,\ p,\ p+1. \tag{2.2}$$

   onde $p$ denota o índice da direção principal de forrageamento escolhida pelo agente, $k$ e $n$ são parâmetros do modelo. O formato específico das expressões (2.1) e (2.2) é baseado em experimentos com formigas realizados em laboratório Bonabeau et al. (1999); Denebourg et al. (1989).

5. Quando um agente encontra uma presa no ponto $(i, j)$ da malha, atualizamos $C$, fazendo $C(i, j) \leftarrow C(i, j) - 1$ e invertemos sua direção principal de movimentação, que passa a se movimentar na direção de *retorno* à colônia.

6. A cada iteração, cada agente deve decidir entre mover-se ou ficar parado, simulando a velocidade dos agentes, que depende da quantidade de feromônio percebida pelos mesmos. Um agente que percebe uma grande quantidade de feromônio se movimenta rapidamente, pois a trilha está bem marcada, todavia, se o estímulo químico é reduzido, sua velocidade diminui. A função escolhida e ajustada a dados experimentais por Franks *et al.* Franks et al. (1991) foi a seguinte:

$$P(T) = [1 + \tanh(T/100 - 1)]/2 \tag{2.3}$$

   onde $T$ é a quantidade de feromônio percebida pelo agente e $P(T)$ é a probabilidade do agente se mover. Em nosso modelo $T = F_{p-1} + F_p + F_{p+1}$, onde $p$ é o índice de sua direção principal de movimentação. No caso da figura 2- b), $T = F_2 + F_3 + F_4$.

7. Há um limite máximo de 20 agentes por ponto da malha. Caso um agente escolha se movimentar para um ponto lotado, então ele é deslo-

cado para um ponto livre adjacente ao mesmo. Se todos os pontos adjacentes estiverem lotados, o agente permanece parado.

8. A cada iteração, uma quantidade $Q$ de novos agentes deixa a colônia. Esses agentes são introduzidos no ponto da malha onde se localiza a colônia. Caso o mesmo se encontre lotado, nenhum agente é introduzido.

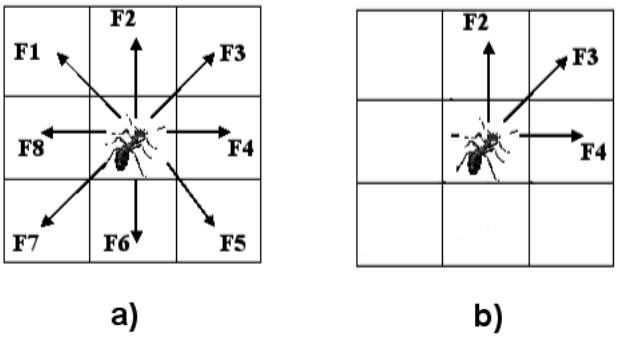


Figura 2: **a)** No espaço discretizado, o agente que deixa a colônia pode escolher entre oito direções principais de busca. A probabilidade de escolha de cada direção é dada por $P_i = (F_i + \bar{k})^{\bar{n}}/[\sum_{j=1}^{8}(F_j + \bar{k})^{\bar{n}}]$. **b)** Uma vez escolhida a direção principal de busca de presas, o agente passa a escolher entre apenas três direções possíveis de movimento. No caso acima a direção 3 foi escolhida como principal, a movimentação é regida pela expressão 2.2.

Com esses ingredientes é fácil construir um programa de maneira a simular o processo de correição, cujos resultados das simulações apresentamos a seguir. Para maiores detalhes a respeito do modelo e da implementação computacional, indicamos Assis (2003).

# 3 Simulações

## 3.1 Emergência de uma Direção Coletiva

Em primeiro lugar, antes de verificarmos se a dinâmica do sistema pode levar a uma seqüência de escolhas de busca eficiente, devemos antes mostrar que o modelo apresenta a propriedade da emergência de uma direção coletiva de correição.

A seguir, apresentamos o conjunto de parâmetros utilizado nas simulações do modelo:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $\bar{n} = 4$ | $n = 2$ | $\bar{k} = 60$ | $k = 5$ | $Q = 10$ |
| $P(T) =$ eq. (2.3) | $F_{sat} = 1000$ | $F_c = 10$ | $F_s = 1$ | $\sigma = 1/30$ |

onde $k$, $n$, $P(T)$, $\sigma$, $F_{sat}$, $F_c$, $F_s$, $Q$ são os parâmetros utilizados (alguns estimados experimentalmente) por Denebourg *et al.*, enquanto $\bar{n}$ e $\bar{k}$ foram obtidos através de repetidas simulações do modelo, de maneira a obter o comportamento desejado.

A figura 3 apresenta o fenômeno da emergência de uma direção coletiva no modelo. Convém mencionar a propriedade de auto-organização do sistema que, sem nenhuma influência externa é capaz de "escolher" uma direção coletiva de forrageamento.

## 3.2 Rotação da Direção Coletiva de Busca

Para investigar se a colônia representada pelo modelo matemático é capaz de evitar direções de busca utilizadas previamente, realizamos repetidas simulações computacionais, observando, finalmente, dois principais mecanismos através dos quais a espécie pode estar implementando a "escolha inteligente" de direção de busca:

1. "Taxia" da frente de correição para regiões de maior densidade de presas.

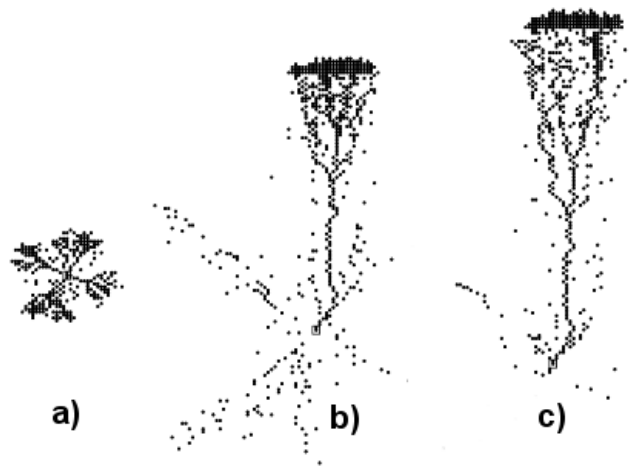


Figura 3: Emergência de uma direção coletiva de correição em simulações do modelo matemático. **a)** Assim como no fenômeno biológico, não há uma direção coletiva estabelecida durante o início do processo de correição, com 100 iterações do modelo. **b)** e **c)** Os agentes passam a se concentrar em apenas uma direção, padrões obtidos com 400 e 500 iterações do modelo, respectivamente.

2. Processo de "prospecção local" durante o início da correição, elegendo direções de maior densidade de presas como direção coletiva de busca.

Para constatar o mecanismo 1, construímos o seguinte cenário de simulação:

- Criamos uma distribuição aleatória de presas, $C(i, j)$. Cada ponto da malha com probabilidade 1/2 de conter uma presa.

- Fazemos com que a colônia de agentes realize uma correição, escolhendo uma direção coletiva e atuando sobre a distribuição de presas $C(i, j)$, removendo parte delas.

- Utilizamos a distribuição $C(i, j)$ *modificada* pela simulação anterior, obrigando a colônia a realizar uma correição na *mesma* direção que a

correição da simulação anterior. Isso é feito para observar o comportamento dos agentes ao se deparar com regiões de baixa densidade de presas.

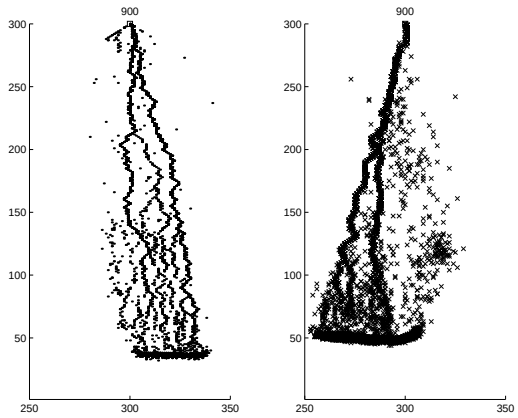


Figura 4: A colônia é "forçada" a efetuar duas correições consecutivas na mesma direção. **a)** Padrão de correição obtido na primeira simulação. **b)** Durante a segunda correição, os agentes desviam da área utilizada pela primeira, evitando regiões de baixa densidade de presas.

Na figura 4 ilustramos os dois padrões de correição obtidos através da simulação desse cenário. Observamos que na segunda correição a maioria dos agentes desvia da área que foi utilizada pela primeira, evitando regiões de baixa densidade de presas. Esse comportamento é extremamente robusto e foi observado em todas as simulações do modelo com esses parâmetros. Convém mencionar que essa robustez provém, em parte, do fato de que a colônia não depende sensivelmente do comportamento de *um* agente. Se um indivíduo falha em encontrar o caminho para uma região de maior densidade de presas, isso não afeta o comportamento *coletivo* da colônia. Ou seja, a propriedade de taxia da frente de correição é uma propriedade coletiva, emergente da dinâmica do sistema e não uma propriedade proveniente das habilidades de um indivíduo isolado, super dotado, ou líder.

Durante o início do processo de correição, existe uma fase em que a colônia ainda não estabeleceu uma direção coletiva de busca, que pode ser observada tanto no fenômeno biológico (figura 1- a)), quanto nas simulações do modelo matemático (figura 3- a)). Através do mecanismo 2 (prospecção local) a colônia utiliza essa fase inicial de "indecisão" para estabelecer uma escolha eficiente de direção coletiva de busca, conforme as seguintes propriedades do modelo:

1. Maiores concentrações de presas em uma direção acarretam uma maior probabilidade de escolha daquela direção.

2. Existe uma "região de influência", determinada por um valor $r_{max}$ (distância da colônia), onde a distribuição de presas tem relevância para a escolha da direção coletiva de correição. Presas além dessa região têm pouca ou nenhuma influência na escolha da colônia.

3. Ao realizar uma correição em uma direção específica, a colônia reduz significativamente a concentração de presas naquela direção, resultando em uma menor probabilidade de uma escolha consecutiva da mesma direção.

Para constatar o comportamento 1 acima, simulamos o seguinte cenário:

- Dividimos a distribuição de presas no plano em quatro setores: $C1$, $C2$, $C3$ e $C4$, cada uma ocupando um quadrante como na figura 5, e *sem* sobreposição.

- Associamos à distribuição da direção 2, isto é, aquela referente ao quadrante norte, uma probabilidade fixa $S = 1/2$ de cada ponto da malha conter uma presa, relacionando às demais uma probabilidade $s$, de tal forma que $S/s = \gamma > 1$. Dessa forma, criamos uma direção que é mais rica em presas em relação às outras (figura 5).

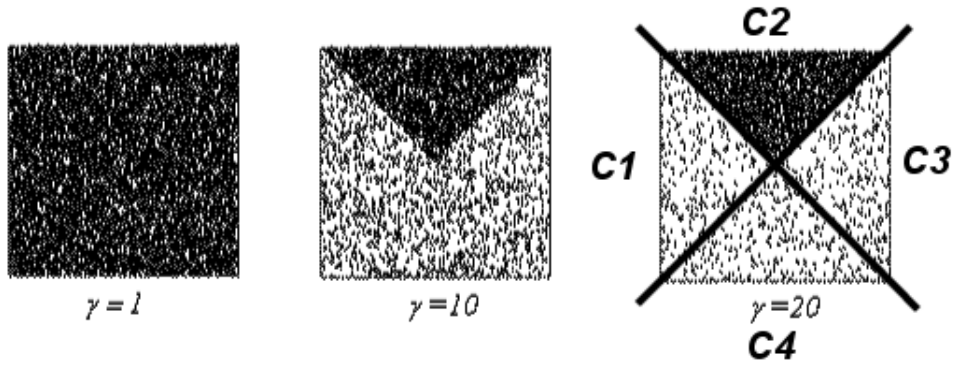


Figura 5: Cenário de simulação para correição, os pontos pretos representam a distribuição de presas. Varia-se o valor de $\gamma$, que representa o quanto o setor $C2$ é mais rico que os outros setores.

- Para cada valor de $\gamma$, realizamos um grande número de simulações, registrando as direções escolhidas em cada uma. Observa-se que, a cada nova simulação, renovam-se as distribuições $C1,\ldots,C4$.

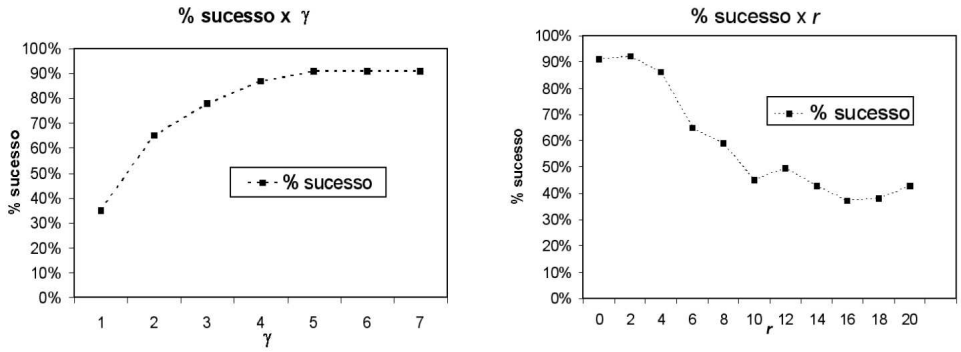


Figura 6: **a)** Índice de "sucesso" da colônia em detectar uma direção mais rica em função de $\gamma = S/s$. **b)** Índice de "sucesso" da colônia em detectar região mais rica em função da distância mínima das presas à colônia ($r$).

Dessa maneira, podemos estimar um índice de "sucesso" da colônia em detectar a presença de uma região mais rica em presas. Definimos o índice de sucesso como a percentagem das simulações em que a correição foi efetuada

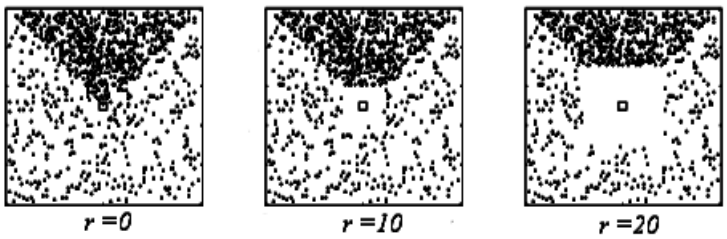


Figura 7: Cenários com $r$ variável. As presas estão presentes apenas a uma distância maior que $r$, medido em pontos da malha. Estuda-se qual é o valor máximo de $r$ em que as presas influenciam a direção de forrageamento da colônia.

nas direções 1, 2 ou 3, que são as direções que incluem o quadrante $C2$. O índice de sucesso em função de $\gamma$ aparece na figura 6- a), indicando que a colônia do modelo é capaz de detectar direções com maior densidade de presas.

Para constatar a propriedade 2, realizamos simulações da seguinte maneira:

- Da mesma maneira que no cenário anterior, divide-se a distribuição de presas no plano em quatro: $C1, C2, C3$ e $C4$. Escolhe-se então uma direção principal (direção 2) para distribuir as presas, de forma que essa região seja mais rica que as outras ($\gamma = 5$).

- As distribuições são diferentes de zero apenas a partir de um certo $r$ variável, isto é, as presas devem estar a uma distância mínima $r$ da colônia como na figura 7 ($r$ medido em pontos da malha).

- Para cada $r$, realizam-se várias simulações, verificando a direção escolhida pela colônia e a freqüência com que a colônia é capaz de detectar a abundância de presas na direção que contém maior densidade de presas (direção 2).

O índice de "sucesso" em função da distância $r$ é apresentado na figura 6- b). De onde se estima, graficamente, que a maior distância (sob esse

conjunto de parâmetros!) que a colônia modelada pode detectar a presença de uma direção mais rica é $r_{max} \approx 16$, medido em pontos da malha.

Finalmente, confirmando a propriedade 3, verifica-se que a densidade de presas em uma direção que sofreu um processo de correição, dentro do raio de influência $r_{max}$ é, em média, 2.7 vezes inferior à densidade das direções que não sofreram um processo de correição.

Dessa maneira, através das propriedades 1, 2 e 3, concluímos que a colônia do modelo exibe um mecanismo de "prospecção local" que evita repetir direções de correição, criando um comportamento coletivo eficiente. Vale notar que não assumimos nenhuma capacidade de memória por parte dos indivíduos, que obedecem apenas regras simples de movimentação, orientados pelo feromônio. Como resultado da interação dos indivíduos, temos uma propriedade emergente de "Inteligência coletiva", onde "*o todo é mais do que a soma das partes*".

# 4 Conclusão

A importância de se estudar mecanismos de auto-organização em insetos sociais não se restringe apenas à análise do fenômeno do ponto de vista biológico, na tentativa de compreender certos comportamentos das espécies. Se compreendermos as razões que levam à auto-organização dos indivíduos para desenvolverem certas tarefas coletivas, teremos condições de formular modelos matemáticos que poderão ser usados para simular situações análogas em áreas científicas diversas.

Algoritmos inspirados no comportamento de recrutamento das formigas foram implementados com sucesso para fazer o roteamento de dados em uma rede telefônica Bonabeau et al. (1999) e também aplicados a diversos problemas de otimização Dorigo e Di Caro (1999). Também a robótica está encontrando nos mecanismos de auto-organização e de "Inteligência Coletiva" uma alternativa para implementar conjuntos de robôs inteligentes Bonabeau et al. (1999). Agrupamento de objetos e transporte coletivo de um item são

exemplos de tarefas implementadas a partir de modelos do comportamento de insetos sociais.

Dessa forma, o modelo proposto além de contribuir com uma possível explicação para o comportamento para o comportamento da espécie *Eciton burchelli*, apresenta um método eficiente de procura pelo qual agentes de comportamento relativamente simples podem explorar recursos em uma vizinhança.

# 5 Agradecimentos

Agradecemos a Luiz Alberto Diaz Rodrigues, Diomar Cristina Mistro e Rodney Carlos Bassanezi pelas excelentes sugestões. Raul Assis agradece o apoio financeiro da CAPES que tornou possível a realização dessa pesquisa.

# Referências

Assis, R. A. (2003). Modelos em estratégias de forrageamento de formigas. Dissertação de Mestrado, IMECC – Unicamp.

Bonabeau, E., Dorigo, M., e Theraulaz, G. (1999). *Swarm Intelligence: From Natural to Artificial Systems.* Oxford University Press, Oxford, UK.

Camazine, S. e Sneid, J. (1991). A model of collective nectar source selection by honey bees: self-organisation through simple rules. *J. Theor. Biol.*, 149:547–571.

Denebourg, J. L., Goss, S., Franks, N., e Pasteels, J. M. (1989). The blind leading the blind: modeling chemically mediated army ant raid patterns. *J. of Insect Behavior*, 2:719–725.

Dorigo, M. e Di Caro, G. (1999). Ant algorithms for discrete optimization. *Artificial Life*, 5:137–172.

Franks, N. R. e Fletcher, C. R. (1983). Spatial patterns in army ant foraging and migration: *Eciton burchelli* on Barro Colorado Island Panama. *Behavioral Ecol. Sociobiology*, 12:261–270.

Franks, N. R., Gomez, N., Goss, S., e Denebourg, J. L. (1991). The blind leading the blind in army ant raid patterns: testing a model of self-organization. *J. of Insect Behavior*, 4:583–607.

Gotwald Jr., W. H. (1995). *Army Ants: The Biology of Social Predation.* Cornell University Press, N. York, USA.

Hölldobler, B. e Wilson, E. O. (1990). *The Ants.* Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, USA.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 29-40* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Using Fuzzy sets theory to analyze environmental condition in order to improve animal productivity

Mariângela Amendola[1],
Depto de Planejamento e Desenvolvimento Rural Sustentável,
FEAGRI–UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.

Mário Mollo Neto[2],
Depto de Construções Rurais e Ambiência, FEAGRI–UNICAMP,
13.083-970 – Campinas/SP.

Vasco Fitas Cruz[3],
Depto de Engenharia Rural, Instituto de Ciências Agrárias Mediterrânicas,
Universidade de Évora - Portugal

**Abstract**. Considering the comfort conditions in animal breeding results carried out by a specialist, we carry out another analyze of the same conditions but using the fuzzy sets theory as a mathematical tool. The independent variables considered to analyze the dependent variable, which must reveal the comfort condition, are the air temperature and the relative humidity, both reorganized according to intervals for which there were associated to a kind of classification meaning linguistic terms. After that, a system of rules must be established, which is constructed considering the influence

[1]amendola@agr.unicamp.br
[2]mariomollo@gmail.com
[3]vfc@uevora.pt

of both these variables independent on the variable dependent. As a consequence it is possible to consider distinct scenarios to be mathematically analyzed through of the fuzzy sets theory available at MATLAB 6.5. The comparison between the results obtained previously and the results obtained using this methodology shows approximately the same kind of strategy to the management of the environmental conditions to reach comfort conditions and so reveals the fuzzy sets theory as an alternative to continue researches that are looking for animal productivity improvement.

***Key words***: *Climatological analyze, comfort conditions, animal productivity, Fuzzy sets theory.*

# 1 Introduction

An alternative strategy to improve animal productivity, as can be found in the specialized literature, is by the management and/or through by the control of the heat stress, which is a function of the environmental conditions.

Following this strategy, Nienaber et al. (2004) presents a table shown in Figure 1, where it can be identified four categories of the Livestock Weather Safety Index associated with the $THI$ values as a function of the values obtained by the climatological analysis. According to this author, this table was assembled considering the air dry bulb temperature $[^0C]$, $Tdb$, and the air relative humidity [%] to obtain the dew point temperature $[^0C]$, $Tdp$, using the following equation:

$$THI = Tdb + 0.36Tdp + 41.2$$

According to the grey color nuance shown in Figure 1, it can be observed the referred four categories: Normal, Alert, Danger and Emergency. These categories reveal another kind of variable, which can be recognized as a linguistic variable once it is natural and not as accurate as those, used from

Relative Humidity, %

| Temperature, °C | 5 | 10 | 15 | 20 | 25 | 30 | 35 | 40 | 45 | 50 | 55 | 60 | 65 | 70 | 75 | 80 | 85 | 90 | 95 | 100 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 20 | 63 | 63 | 63 | 64 | 64 | 64 | 64 | 65 | 65 | 65 | 66 | 66 | 66 | 66 | 67 | 67 | 67 | 67 | 68 | 68 |
| 22 | 64 | 65 | 65 | 66 | 66 | 66 | 67 | 67 | 67 | 68 | 68 | 69 | 69 | 69 | 70 | 70 | 70 | 71 | 71 | 72 |
| 24 | 66 | 67 | 67 | 68 | 68 | 69 | 69 | 70 | 70 | 70 | 71 | 71 | 72 | 72 | 73 | 73 | 74 | 74 | 75 | 75 |
| 26 | 68 | 69 | 69 | 70 | 70 | 71 | 71 | 72 | 73 | 73 | 74 | 74 | 75 | 75 | 76 | 77 | 77 | 78 | 78 | 79 |
| 28 | 70 | 70 | 71 | 72 | 72 | 73 | 74 | 74 | 75 | 76 | 76 | 77 | 78 | 78 | 79 | 80 | 80 | 81 | 82 | 82 |
| 30 | 71 | 72 | 73 | 74 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 78 | 79 | 80 | 81 | 81 | 82 | 83 | 84 | 84 | 85 | 86 |
| 32 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 | 82 | 83 | 84 | 84 | 85 | 86 | 87 | 88 | 89 | 90 |
| 34 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 | 82 | 83 | 84 | 84 | 85 | 86 | 87 | 88 | 89 | 90 | 91 | 92 | 93 |
| 36 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 | 87 | 88 | 89 | 90 | 91 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 |
| 38 | 78 | 79 | 81 | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 | 88 | 89 | 90 | 91 | 92 | 93 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 |
| 40 | 80 | 81 | 82 | 84 | 85 | 86 | 88 | 89 | 90 | 91 | 93 | 94 | 95 | 96 | 98 | 99 | 100 | 101 | 103 | 104 |

Categories of the Livestock Weather Safety Index associated with THI values:
Normal: ≤ 74 Alert: 75-78 Danger: 79-83 Emergency: ≥ 84

Figure 1: Temperature-Humidity Index Values

human bean. So, according to Amendola et al. (2004b), this is the kind of conditions and variable adequate to be analyzed through the fuzzy sets theory. The fuzzy sets theory has been reached several application areas. One of these areas is associated to the fuzzy control, used to the automation of process, since domestic tasks till to complex industrial process (Klir e Yuan, 1995). According the literature, the pioneer fuzzy control application is due to **?**, whose theoretical support can be found in some papers of Zadeh (1965). At the "Faculdade de Engenharia Agrícola - FEAGRI-UNICAMP", the use of fuzzy sets theory could be recognized as an adequate mathematical tool to be used in researches involving animal breeding, just after several events scientific (Amendola, 2004). A resulting pioneer paper of Amendola et al. (2004a) shows the use of this methodology to simulate comfort conditions in broilers production. The suitable results of this work were taken as an incentive to the development of similar projects, as those found in Moura et al. (2004), performed also to broilers; and in Queiroz et al. (2004) to swine; as well to several projects that are still in development. These considerations justify the objective of this paper.

# 2 Objectives

The aim of this research is to show how the use of the fuzzy sets theory is adequate as an alternative mathematical tool to analyze environmental conditions as able as to suggest comfort conditions in animal breeding process.

# 3 Material and methods

First of all, according to Amendola et al. (2004a), it is necessary to define a subdivision of the information shown in Figure 1, which must be performed through linguistic terms to construct an inference fuzzy system. This requires a rule system establishment, which must be able to describe the relations between the independent variables and the dependent variables. In this work the inference method used is according to the Mamdani method and the change from fuzzy results to numerical values is obtained by the gravity center method; membership functions must also be selected. All these concepts theoretical can be found in Pedricz e Gomide (1998). The fuzzy analyze is carried out using the scientific computational environment MATLAB 6.5. (Amendola et al., 2004b).

# 4 Results

The referred subdivision of Figure 1, performed to the temperature variable T belonging to the interval $[20, 40]$, is shown in Table 1, and to the relative humidity, $RH$ belonging to the interval $[0, 100]$, is shown Table 1. By the other hand, in Table 3 it is shown the division to the $THI$ variable exactly as it appears in Nienaber et al. (2004).

The membership functions considered as convenient to represent the independent variables T and RH, as shown in Tables 1 and 2 respectively,

Table 1: Subdivision to the T variable and the associated linguistics terms

| **INTERVAL** | **TERM** |
|---|---|
| $[20, 23]$ | $T_1$ |
| $[22, 25]$ | $T_2$ |
| $[24, 27]$ | $T_3$ |
| $[26, 29]$ | $T_4$ |
| $[28, 31]$ | $T_5$ |
| $[30, 33]$ | $T_6$ |
| $[32, 35]$ | $T_7$ |
| $[34, 37]$ | $T_8$ |
| $[36, 39]$ | $T_9$ |
| $[38, 40]$ | $T_{10}$ |

Table 2: Subdivision to the RH variable and the associated linguistics terms

| **INTERVAL** | **TERM** |
|---|---|
| $[0, 6]$ | $U_1$ |
| $[5, 11]$ | $U_2$ |
| $[10, 16]$ | $U_3$ |
| $[15, 21]$ | $U_4$ |
| $[20, 26]$ | $U_5$ |
| $[25, 36]$ | $U_6$ |
| $[35, 51]$ | $U_7$ |
| $[50, 56]$ | $U_8$ |
| $[55, 66]$ | $U_9$ |
| $[65, 71]$ | $U_{10}$ |
| $[70, 86]$ | $U_{11}$ |
| $[85, 100]$ | $U_{12}$ |

Table 3: Subdivision to the THI variable and the associated linguistics terms

| **INTERVAL** | **TERM** |
|---|---|
| $[0, 74]$ | N (Normal) |
| $[75, 78]$ | A (Alert) |
| $[79, 83]$ | P (Danger) |
| $[84, 104]$ | E (Emergency) |

are triangular, which were subject to some kind of fit to avoid superposition. These functions are shown in Figures 2 and 3 respectively.

By the other hand the membership functions considered convenient as to represent the dependent variable THI, as shown in Table 3, are trapezoidal. These functions are shown in Figure 4.

In Table 4 it is shown the rules system obtained from the all 120 composition of the variables. The elements of this Table, $THI_{i,j}$, must be inter-

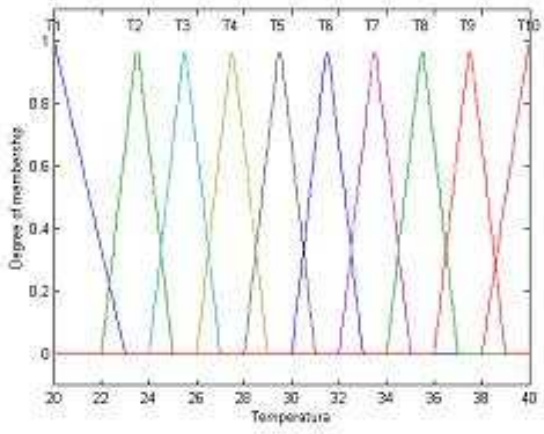


Figure 2: Membership functions to $T$ variable according to Table 1

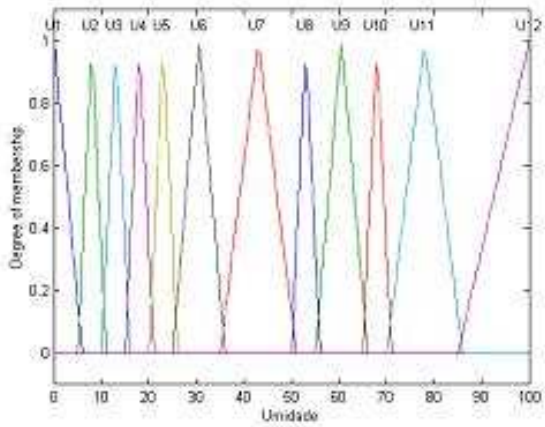


Figure 3: Membership functions to $RU$ variable according to Table 2

preted as $THI(T_i, RH_j)$. For example, $THI_{6,5} = THI(T_6, RH_5)$, represents the Alert condition by the rule:

"**If** $T$ is $T_6$ **and** $RH$ is $RH_5$ **then** $THI$ is Alert".

Figure 5 shows the 3D surface generated as a function of the fuzzy sets theory, which summarizes the rules system according to Table 4. Finally, in Figure 6 it is shown the results obtained from the fuzzy methodology.

Table 4: Subdivision to the THI variable and the associated linguistics terms

| | $RH_1$ | $RH_2$ | $RH_3$ | $RH_4$ | $RH_5$ | $RH_6$ | $RH_7$ | $RH_8$ | $RH_9$ | $RH_{10}$ | $RH_{11}$ | $RH_{12}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $T_1$ | N | N | N | N | N | N | N | N | N | N | N | N |
| $T_2$ | N | N | N | N | N | N | N | N | N | N | N | A |
| $T_3$ | N | N | N | N | N | N | N | N | A | A | A | A |
| $T_4$ | N | N | N | N | N | N | A | A | A | P | P | P |
| $T_5$ | N | N | N | N | A | A | A | P | P | P | P | E |
| $T_6$ | N | N | A | A | A | A | P | P | P | E | E | E |
| $T_7$ | A | A | A | A | A | P | P | E | E | E | E | E |
| $T_8$ | A | A | A | P | P | P | E | E | E | E | E | E |
| $T_9$ | A | P | P | P | P | E | E | E | E | E | E | E |
| $T_{10}$ | P | P | P | P | E | E | E | E | E | E | E | E |

In this figure the following colors are in correspondence with the categories established previously: green - Normal, yellow - Alert, blue - Danger and red -Emergency.

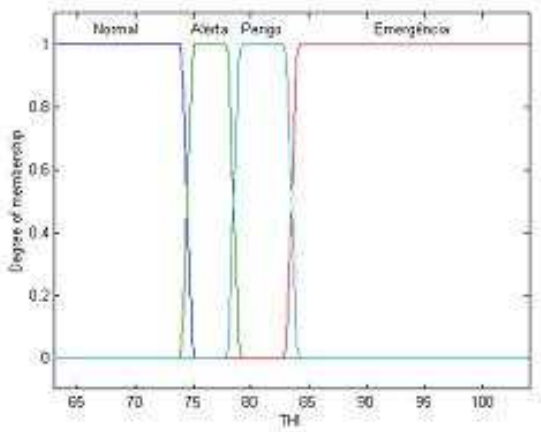


Figure 4: Membership functions to $T$ variable according to Table 1

The associated colors shown in Figure 6 obtained as a function of the fuzzy sets theory and the categories original shown in Figure 1 are in agree-

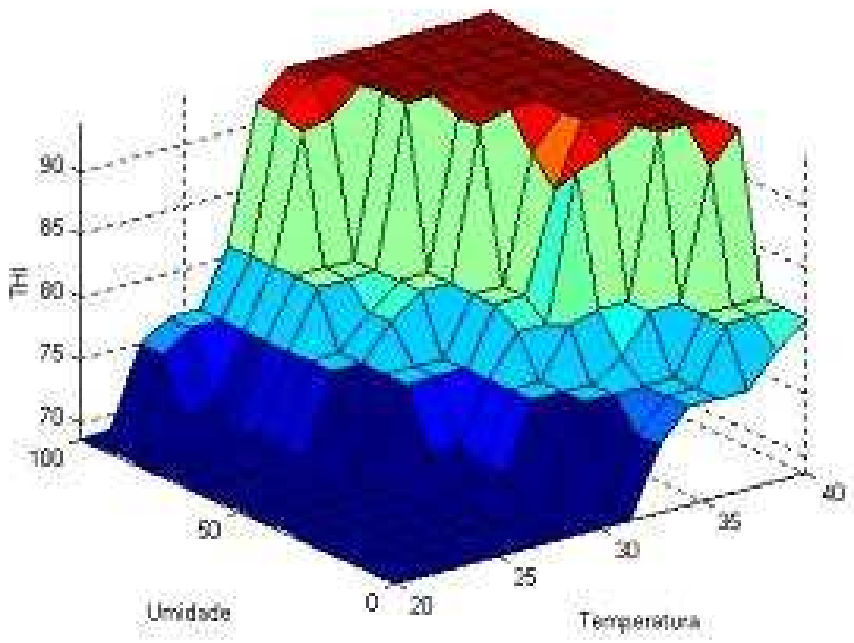


Figure 5: Membership functions to *RU* variable according to Table 2

| | 5 | 10 | 15 | 20 | 25 | 30 | 35 | 40 | 45 | 50 | 55 | 60 | 65 | 70 | 75 | 80 | 85 | 90 | 95 | 100 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 20 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.7 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.7 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.7 | 68.6 |
| 22 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 |
| 24 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.7 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 68.7 | 68.7 | 68.9 | 76.5 | 76.5 | 76.5 |
| 26 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 68.7 | 68.7 | 68.9 | 68.8 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 |
| 28 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 68.7 | 68.9 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 |
| 30 | 68.9 | 68.8 | 68.8 | 68.8 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |
| 32 | 68.9 | 68.8 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.7 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |
| 34 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |
| 36 | 76.5 | 76.5 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |
| 38 | 76.5 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |
| 40 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 81.0 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.7 | 93.8 | 93.6 | 93.7 | 93.8 | 93.8 |

Figure 6: Membership functions to *RU* variable according to Table 2

ment but from the exact values. Using this mathematical tool it is possible to obtain results to the dependent variable values as a function of several compositions of the independent variables values in an easy way (it is enough to move and push the cursor in the selected values) to give some kind of decision support to the animal producer as there are shown in the following

examples. Selecting specific values of $T = 30^0C$ and $RH = 75\%$ the resulting $THI$ value as it is shown in Figure 7, is $THI = 81$, meaning the Danger condition. This result suggests that one of these selected values must be changed to reach better condition. So, for the same $RH$ value and another selection of $T$ value, $T = 22^0C$, for example, the resulting $THI$ value is $THI = 68.8$, which reveals a Normal and so better category, while if $T = 26^0C$ the $THI$ value is $THI = 76.5$, which reveals the Alert category. Furthermore, for a fixed $RH$ value $RH = 75\%$, it can be concluded that the best $THI$ value occurs for $T = 20^0C$, which is $THI = 68.7$.

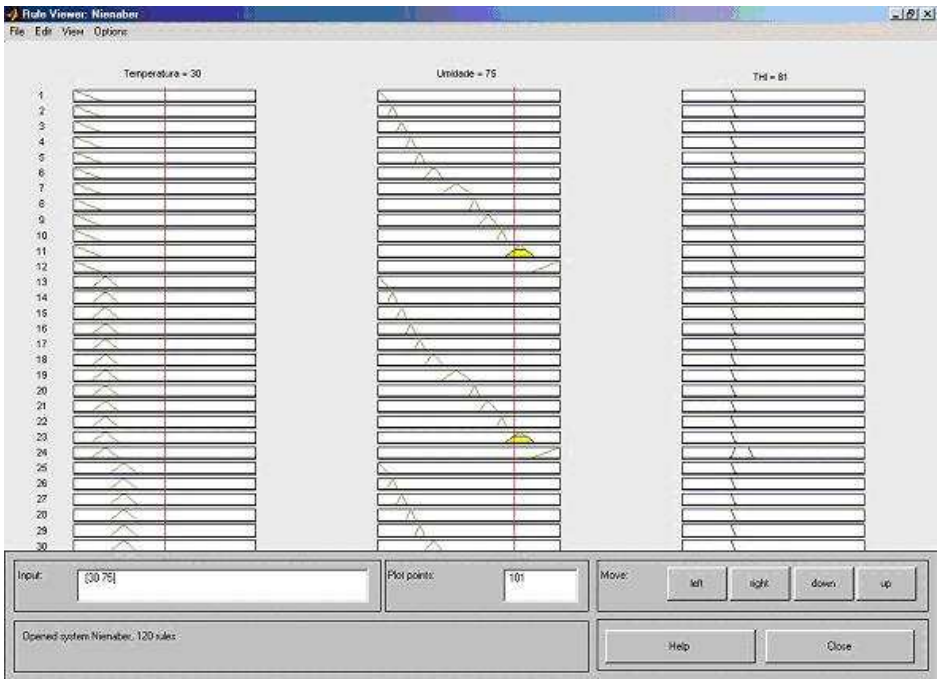


Figure 7: Membership functions to $RU$ variable according to Table 2

# 5 Conclusions

The result presented in this research shows a good agreement with the original research, and for that confirm the fuzzy sets theory, carried out at the MATLAB 6.5 toolbox, as an adequate tool to continue researches that are looking for animal productivity improvement. As an example we could conclude that for a fixed value of $HR$, $HR = 75\%$, the best condition of $THI = 68.7$ is reached to the temperature $T = 20^0C$.

# Acknowledges

The authors would like to thank to the scientific committee of the EFITA/WCCA 2005 where this paper was presented.

# References

Amendola, M. (2004). Ciclo de palestras 2002-04. Faculdade de Engenharia Agrícola – realizado na FEAGRI/UNICAMP. Disponível em: http://www.ime.unicamp.br/ biomat/revistas.htm.

Amendola, M., Castanho, M. J., Näs, I. A., e Souza, A. L. (2004a). Análise matemática de condições de conforto térmico para avicultura usando a teoria dos conjuntos fuzzy. *Biomatemática*, 14:87–92.

Amendola, M., Souza, A. L., e Barros, L. C. (2004b). Manual do uso da teoria dos conjuntos fuzzy no MATLAB® 6.5. FEAGRI, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Campinas. (http://www.agr.unicamp.br).

Klir, G. J. e Yuan, B. (1995). *Fuzzy Sets and Fuzzy Logic: Theory and Applications.* Prentice Hall, New Jersey.

Moura, D. J., Näas, I. A., Queiroz, M. P. G., e Amendola, M. (2004). Estimating thermal comfort and solar orientation in broiler housing using

fuzzy logic. Proceedings of VI Congreso LatinoAmericano y del Caribe de Ingeniería Agrícola, San José, CD 1–7.

Nienaber, J. A., Hahn, G. L., e Eingenberg, R. A. (2004). Engineering and management practices to ameliorate livestock heat stress. Proceedings of International Symposium of the CIGR Section II – New Trends in Farm Buildings, CD, Évora.

Pedricz, W. e Gomide, F. (1998). *Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design*. Bradford, Imprenta Cambridge.

Queiroz, M. P. G., Näas, I. A., Amendola, M., e Sampaio, M. (2004). Estimating tolerance limit to aggressive environment in swine production. Proceedings of XV CIGR International Conference. Beijing, CD.

Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Information and control*, 8:338–353.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 41-52* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Modelo Matemático Fuzzy para Descrever o Crescimento do Câncer de Próstata

Maria José P. Castanho[1],
DEMAT–UNICENTRO, 85010-990, Guarapuava/PR.

Laécio Carvalho de Barros[2], L. L. Vendite[3],
DMA–IMECC, UNICAMP, 13083-970, Campinas/SP.
Akebo Yamakami[4],
DT–FEEC, UNICAMP, 13081-970, Campinas/SP.

**Resumo**. A partir de um modelo matemático clássico para a evolução de um tumor, consideramos a taxa de crescimento como um parâmetro fuzzy em função do nível de PSA que o indivíduo apresenta e do grau de Gleason da biópsia. Tendo em vista que o nível de PSA varia entre os indivíduos e aumenta na presença do tumor, fizemos simulações numéricas para obtermos a solução do modelo a partir do princípio de extensão, considerando o PSA inicial como um número fuzzy.

***Palavras-chave***: *Crescimento do tumor, câncer de próstata, sistema baseado em regras fuzzy, princípio de extensão.*

[1]zeza@unicentro.br
[2]laeciocb@ime.unicamp.br
[3]vendite@ime.unicamp.br
[4]akebo@dt.fee.unicamp.br

# 1 Introdução

O câncer de próstata é, atualmente, o segundo tipo de câncer com maior incidência entre a população masculina, no Brasil. É único entre os tumores sólidos porque existe em duas formas: uma forma histológica ou latente e uma forma clinicamente evidente (Pienta, 1997). Assim, a evolução de um câncer de próstata pode ser rápida (rápida disseminação da neoplasia, antes mesmo de surgirem os sintomas locais) ou lenta e indolente (com lesões que permanecem estacionárias) (Srougi, 1999).

Com essa característica, um modelo de crescimento do câncer de próstata deve incluir variáveis que permitam identificar em qual caso o paciente se enquadra. Os parâmetros mais utilizados para prognosticar o câncer são: níveis de antígeno prostático específico-PSA no sangue, grau de diferenciação das células do tumor dado pelo escore de Gleason e volume do tumor, avaliado por métodos de imagem.

Vários autores estudaram a relação entre o tamanho do tumor, o grau de diferenciação das células e o nível de PSA no sangue (INCA, 2002; Blackwell et al., 1994; Partin et al., 1990; Stamey et al., 1987; Swanson et al., 2001). Como essas condições clínicas variam entre os indivíduos, nesse artigo, consideramos a taxa de crescimento do tumor como um parâmetro com incertezas. Essa taxa é obtida por meio de um sistema baseado em regras fuzzy, em função do escore de Gleason e do nível de PSA de cada indivíduo. Também, o nível de PSA produzido pelas células normais é descrito por um conjunto fuzzy.

# 2 Modelo Matemático

Modelos matemáticos que descrevem o crescimento de tumores sólidos exibem três fases distintas (Jiang et al., 2004):

- uma fase inicial, durante a qual as células crescem quasi-exponencialmente;

- uma fase em que ocorre a formação de um núcleo necrótico, acumulação de células latentes ao redor e separação de células multiplicativas na periferia;
- uma fase na qual a taxa de crescimento começa a diminuir e o tumor tende a um diâmetro máximo.

A caracterização desse crescimento é feita, na maioria dos casos, por meio de modelos matemáticos clássicos, como o modelo de Gompertz.

Fister e Panetta (2003) usam uma extensão do modelo de Gompertz para descrever o crescimento do tumor e o efeito do tratamento:

$$\frac{dT}{dt} = \lambda T ln \frac{\theta}{T} - G(T, u(t)), \tag{2.1}$$

onde $T$ é o volume do tumor, $\lambda$ é a taxa de crescimento, $\theta$ representa o tamanho máximo do tumor e $G(T, u(t))$ descreve a interação entre o tratamento descrito pelo médico e o volume do tumor.

Consideremos esse modelo sem o tratamento, ou seja

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{dt} = \lambda T ln \dfrac{\theta}{T} \\ T(0) = T_0 \end{cases} \tag{2.2}$$

A solução determinística de (2.2) é dada por

$$T(t) = \theta(\frac{T_0}{\theta})^{e^{-\lambda t}}. \tag{2.3}$$

Tendo em vista que há relação entre o nível de PSA $p$, o escore de Gleason $g$ e o tamanho do tumor $T$, a taxa de crescimento $\lambda$ é modelada como função dessas variáveis (Castanho, 2005).

$$\lambda = \lambda(Gleason, PSA) = \lambda(g, p).$$

Para tal, construímos um sistema baseado em regras fuzzy, estruturado conforme Figura 1, pois essas variáveis são incertas e descritas em termos lingüísticos na literatura médica.

Temos, então, como variáveis de entrada do sistema:

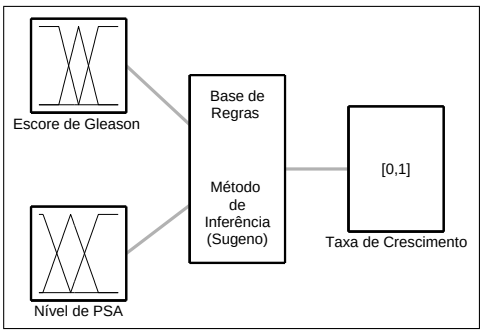


Figura 1: Estrutura do sistema baseado em regras *fuzzy* construído para estimar a taxa de crescimento do tumor.

- Escore de Gleason: classificado de acordo com o grau de diferenciação das células em *Bem Diferenciado* (menos agressivo), *Moderadamente Diferenciado* e *Indiferenciado* (mais agressivo);
- Nível de PSA: classificado em *Baixo*, *Médio* e *Elevado*.

Uma hipótese simplificadora nesse modelo é de que o tumor cresce confinado na próstata até um valor máximo que o organismo pode suportar. Os casos em que há extensão extraprostática e metástase não serão considerados. Assim, os níveis de PSA são limitados por aquele valor que indica extensão extraprostática.

A base de regras, descrita na Tabela 1, foi construída com a informação dos especialistas, constantes na literatura (INCA, 2002; Aihara et al., 1994; Swanson et al., 2001).

Utilizamos o método de inferência de Sugeno de ordem zero, ou seja, o conseqüente das regras é constante, para encontrarmos a taxa de crescimento do tumor como função do grau de diferenciação das células (escore de Gleason) e do nível de PSA.

Sendo o grau de diferenciação celular igual a 3 o padrão predominante em câncer de próstata clinicamente localizado (Aihara et al., 1994), a fim de encontrarmos uma expressão analítica para a taxa de crescimento, conside-

Tabela 1: Base de regras do sistema baseado em regras fuzzy.

| Regra | Gleason | PSA | Taxa de crescimento |
|---|---|---|---|
| 1 | Bem Diferenciado | Qualquer | Baixa |
| 2 | Moderadamente Diferenciado | Baixo | Alta |
| 3 | Moderadamente Diferenciado | Médio | Média |
| 4 | Moderadamente Diferenciado | Elevado | Baixa |
| 5 | Indiferenciado | Qualquer | Alta |

ramos o escore de Gleason igual a 6 = (3+3). Assim, essa taxa é função apenas do PSA, $\lambda = \lambda(p)$, está representada na Figura 2 e é aproximada pela expressão analítica (2.4):

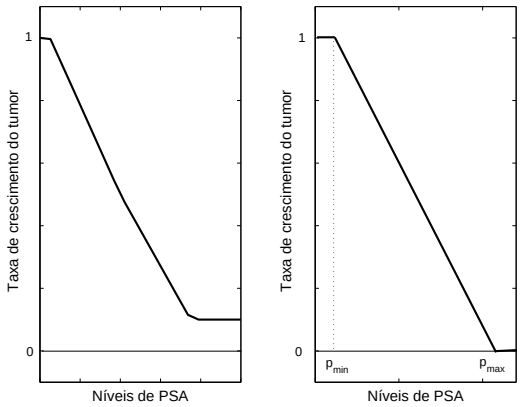


Figura 2: Taxa de crescimento do tumor como função dos níveis de PSA no sangue para escore de Gleason igual a 6. À esquerda, a saída do sistema baseado em regras fuzzy considerando uma população com 80 indivíduos e, à direita, a aproximação considerada.

$$\lambda(p) = \begin{cases} 1 & \text{se } p \leq p_{min} \\ \frac{p - p_{max}}{p_{min} - p_{max}} & \text{se } p_{min} < p < p_{max} \\ 0 & \text{se } p \geq p_{max}. \end{cases} \tag{2.4}$$

Segundo Stenman et al. (1999), devemos supor que o câncer de próstata desenvolve mais rapidamente até alcançar um tamanho que exija a vascularização. Somente após esse estágio, pode-se esperar que o crescimento do tumor seja refletido num aumento dos níveis de PSA no sangue. Com base nessa hipótese, podemos interpretar $p_{min}$ como o nível de PSA a partir do qual as células do interior do tumor param de se multiplicar e, conseqüentemente, a taxa de crescimento do tumor começa a diminuir. Esse modelo considera um tamanho máximo que o tumor localizado pode alcançar. Então, $p_{max}$ pode ser interpretado como o ponto a partir do qual há estabilização do volume localmente, embora os níveis de PSA possam continuar aumentando devido à metástases.

Da solução do modelo determinístico (2.2), considerando a taxa de crescimento como função do PSA, $\lambda = \lambda(p)$, e o tamanho máximo do tumor $\theta$ igual a 1, temos

$$T(p,t) = \begin{cases} (T_0)^{e^{-\lambda(p)t}} & \text{se } 0 \leq p < p_{max} \\ 1 & \text{se } p \geq p_{max}, \end{cases} \tag{2.5}$$

onde $T$ é o tamanho do tumor, no instante $t$, para os indivíduos com níveis de PSA no diagnóstico iguais a $p$.

Carter e Partin (1997) verificaram que os níveis de PSA no sangue crescem de forma exponencial na presença do tumor. Essa variação é expressa por:

$$\begin{cases} \dfrac{dp}{dt} = \alpha p \\ p(0) = p_0 \end{cases} \tag{2.6}$$

onde $p$ é o nível de PSA e $\alpha$ é sua taxa de crescimento. A solução de (2.6) é $p(t) = p_0 e^{\alpha t}$.

O PSA produzido pelas células normais varia entre os indivíduos. O ponto de corte entre níveis normais e anormais é 4 ng/ml, embora muitos pacientes com câncer tenham nível de PSA menor que 4 ng/ml. Assim, o

valor do PSA, quando um tumor se inicia, é considerado como um número *fuzzy* caracterizado por uma função de pertinência triangular $\mu_{P_0}$, a saber

$$\mu_{P_0}(p) = \begin{cases} 0 & \text{se } p < \overline{p_0} - \delta \\ \frac{1}{\delta}(p - \overline{p_0} + \delta) & \text{se } \overline{p_0} - \delta < p \leq \overline{p_0} \\ -\frac{1}{\delta}(p - \overline{p_0} - \delta) & \text{se } \overline{p_0} < p \leq \overline{p_0} + \delta \\ 0 & \text{se } p > \overline{p_0} + \delta, \end{cases} \tag{2.7}$$

onde $\overline{p_0}$ é o valor médio de PSA e $\delta$ é a dispersão do conjunto *fuzzy* $P_0$. Esse conjunto contém os níveis de PSA produzidos pelas células normais da próstata dos indivíduos estudados.

Com o objetivo de descrever o crescimento do tumor no tempo, com a taxa de crescimento em função dos níveis de PSA que também variam no tempo, utilizamos a metodologia elaborada por Jafelice (2003). Essa metodologia foi desenvolvida para encontrar a solução de uma equação diferencial *fuzzy* não-autônoma a partir de uma equação autônoma.

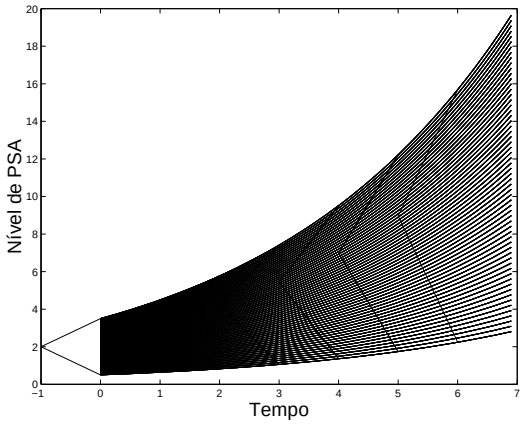


Figura 3: Solução *fuzzy* da equação diferencial (2.6), $P_t$, para $t = 1, 2, ..., 6$, considerando $\alpha = 0,25$ e o nível PSA inicial, $P_0$, dado por um número *fuzzy* em torno de 2.

Para resolver a equação diferencial (2.6), considerando o valor inicial dado por um conjunto *fuzzy* (2.7), devemos encontrar a solução para cada

valor $p_0$ no suporte de $P_0$ considerando que cada solução $p_t$ mantém o grau de pertinência do respectivo $p_0$. Portanto, a solução de (2.6), dado o valor inicial *fuzzy* $P_0$, é um conjunto *fuzzy* $P_t$, cuja função de pertinência é $\mu_{P_t}$. Na Figura 3, está representada a solução obtida com $P_0$ dado pela função de pertinência (2.7).

O princípio de extensão de Zadeh é utilizado para se obter a imagem de um conjunto *fuzzy* através de uma função clássica. Então, para obtermos a imagem do conjunto *fuzzy* $P_t$, que contém os níveis de PSA dos indivíduos no instante $t$, através da função (2.5) que expressa o tamanho do tumor, utilizando o princípio de extensão temos para cada instante $t$,

$$\mu_{T_t}(T(p)) = \sup_p \mu_{P_t}(p),$$

onde $T_t$ é o conjunto *fuzzy* do tamanho do tumor nos indivíduos, no instante $t$. A Figura 4 ilustra o procedimento para $t = 4$.

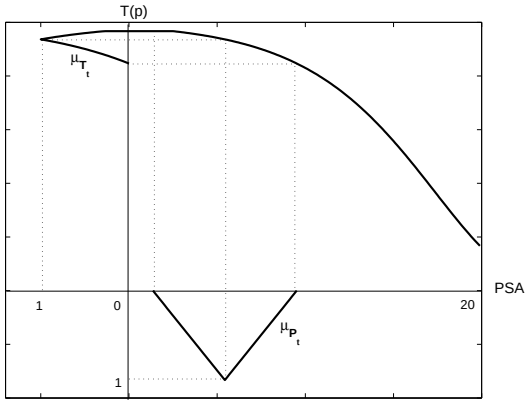


Figura 4: Princípio de extensão utilizado para obter a imagem do conjunto *fuzzy* $P_4$ através da função (2.5).

A Figura 5 mostra a solução *fuzzy* $T_t(P_t)$ obtida por meio do princípio de extensão, sendo $P_t$ um conjunto *fuzzy* que varia no tempo, como na Figura 3. Para encontrarmos uma curva representativa dessa família de soluções, utilizamos o método de defuzzificação do centro de gravidade.

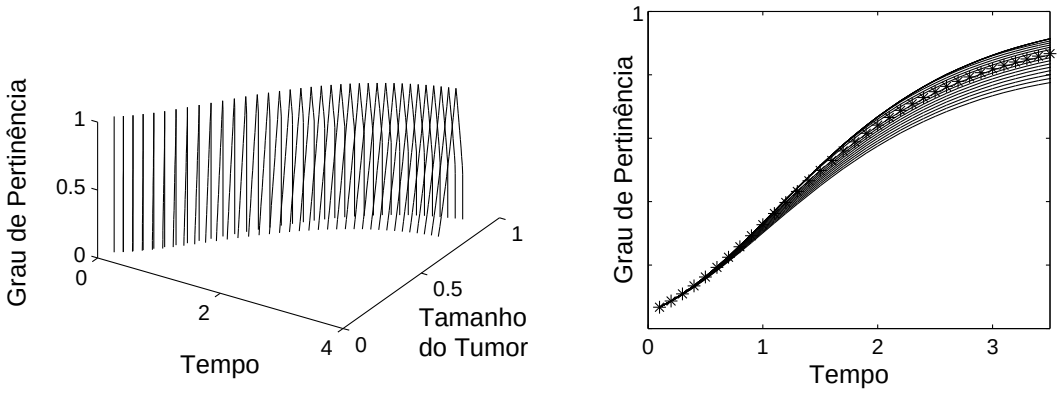


Figura 5: Solução *fuzzy* da equação diferencial (2.2) com valor inicial *fuzzy*, dada pelo princípio de extensão. Destacada está a solução defuzzificada.

Tal solução só é válida até o valor de $t$ para o qual $\dfrac{dT}{dt} = 0$ , ou seja, onde o tumor pára de crescer. Esse valor de $t$ é dado por

$$e^{\alpha t}(1 + \alpha t) = \frac{p_{max}}{p_0}. \tag{2.8}$$

Devemos observar que a solução defuzzificada não é solução da equação diferencial (2.2) considerada inicialmente.

# 3 Conclusões

A partir de um modelo determinístico, com o objetivo de incluir as diferenças individuais no crescimento do tumor, consideramos a taxa de crescimento como função do nível de PSA e escore de Gleason. Para tal utilizamos a teoria dos conjuntos fuzzy que é apropriada para lidar com informações subjetivas como as encontradas na literatura médica.

Para encontrarmos a solução do modelo, fizemos simulações utilizando dados fictícios tendo em vista a ausência de dados reais. Portanto, para validação do modelo e adaptação dos parâmetros, inclusive a escala de tempo,

será necessário elaborar experimentos para obtenção de dados reais.

## Referências

Aihara, M., Lebovitz, R., Wheeler, T., Kinner, B., Ohori, M., e Scardino, P. (1994). Prostate specific antigen and gleason grade: an immunohistochemical study of prostate cancer. *J Urol*, 151:1558–1564.

Blackwell, K., Bostwick, D., Myers, R., Zincke, H., e Oesterling, J. (1994). Combining prostate specific antigen with cancer and gland volume to predict more reliably pathological stage: the influence of prostate specific antigen cancer density. *J Urol*, 151:1565–1570.

Carter, H. e Partin, A. (1997). *Campbell's Urology*, chapter 83 Diagnosis and Staging of Prostate Cancer, páginas 2519–2537. W.B. Saunders Company.

Castanho, M. J. P. (2005). *Construção e Avaliação de um Modelo Matemático para Predizer a Evolução do Câncer de Próstata e Descrever seu Crescimento Utilizando a Teoria dos Conjuntos Fuzzy.* Tese de doutorado, FEEC - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Fister, K. e Panetta, J. (2003). Optimal control applied to competing chemotherapeutic cell-kill strategies. *SIAM J. Appl. Math.*, 63(6):1954–1971.

INCA (2002). *Programa Nacional de Controle do Câncer da Próstata: Documento de Consenso.* Ministério da Saúde. Secretaria de Assistência à Saúde. Instituto Nacional de Câncer., Rio de Janeiro.

Jafelice, R. S. M. (2003). *Modelagem Fuzzy para Dinâmica de Transferência de Soropositivos para HIV em Doença Plenamente Manifesta.* Tese de doutorado, FEEC - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Jiang, Y., Pjesivac, J., e Freyer, J. (último acesso em setembro de 2004). A cellular model for avascular tumor growth. *http://www.ki.se/icsb2002/pdf.*

Partin, A., Carter, H., Chan, D., Epstein, J., Oesterling, J., Rock, R., Weber, J., e Walsh, P. (1990). Prostate specific antigen in the staging of localized prostate cancer: influence of tumor differentiation, tumor volume and benign hyperplasia. *J Urol*, 143:747.

Pienta, K. J. (1997). *Campbell's Urology*, chapter 80 Etiology, Epidemiology, and Prevention of carcinoma of the prostate, páginas 2489–2496. W.B. Saunders Company.

Srougi, M. (1999). *Adenocarcinoma da próstata*, chapter 34, páginas 356–372. Barata and Carvalhal.

Stamey, T., Yang, N., Hay, A., McNeal, J., Freiha, F., e Redwine, E. (1987). Prostate-specific antigen as a serum marker for adenocarcinoma of the prostate. *N Engl J Med*, 317(15):909–916.

Stenman, U., Leinonen, J., Zhang, W., e Finne, P. (1999). Prostate-specific antigen. *Semin Cancer Biol*, 9:83–93.

Swanson, K., True, L., Lin, D., Buhler, K., Vessella, R., e Murray, J. (2001). A quantitative model for the dynamics of serum prostate-specific antigen as a marker for cancerous growth. *Amer J Pathol*, 158(6):2195–2199.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 53-66* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Um Modelo Presa-Predador e a Morte Súbita dos Citros

Magda S. Peixoto[1], Laécio C. Barros[2], Rodney C. Bassanezi[3]
Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - UNICAMP,
13083-859, Campinas/SP.

**Resumo**. Nesse artigo estudamos a interação entre pulgões (supostos insetos transmissores do vírus da Morte Súbita dos Citros) e joaninhas (insetos predadores de pulgões) por meio de um sistema do tipo presa-predador, baseado em regras fuzzy. A partir do retrato de fase obtido, um modelo clássico do tipo Holling-Tanner é ajustado com o objetivo de encontrar seus paramêtros, os quais têm importantes interpretações biológicas.

***Palavras-chave***: *conjuntos fuzzy, base de regras fuzzy, pulgões, joaninhas.*

## 1. Introdução

A Morte Súbita dos Citros (MSC) é uma doença que vem causando sérios prejuízos aos citricultores, chegando ao extremo de provocar a morte de grandes plantações no Estado de São Paulo.

A subenxertia, técnica de substituição do porta-enxerto de espécie intolerante por outro tolerante, tem sido a solução para o controle da MSC.

[1]magdapeixoto@yahoo.com.br
[2]laeciocb@ime.unicamp.br
[3]rodney@ime.unicamp.br

Para as árvores contaminadas, pesquisas mostram que os vasos do floema do porta-enxerto, que levam os produtos gerados na fotossíntese para as raízes, ficam bloqueados e degenerados. Sem alimento, as raízes apodrecem, a árvore definha e morre (Bassanezi et al., 2004).

Pesquisadores acreditam que tal doença seja causada por um vírus transmitido por insetos conhecidos como pulgões (FAPESP, 2004). Dentre os predadores mais conhecidos em citros, as joaninhas, pertencentes à Ordem *Coleoptera* e Família *Coccinelidae*, são importantes agentes de controle biológico, pois se alimentam de pulgões. Consideraremos heterogeneidade na classe dos predadores, já que temos informações que, dependendo do estágio, cada indivíduo tem potencial de predação bastante diferenciado. Na verdade, sabe-se que cada larva desses predadores pode consumir até 200 pulgões/dia e os adultos predam uma média de 20 pulgões/dia (Gravena, 2003).

# 2 Preliminares

Para um melhor entendimento do artigo faremos um pequeno resumo sobre o que será aqui utilizado da lógica fuzzy (Barros e Bassanezi, 2005; Peixoto, 2005; Pedrycz e Gomide, 1998).

Um subconjunto (clássico) $A$ do universo $U$ pode ser representado por sua função característica dada por

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1, & se\ x \in A \\ 0, & se\ x \notin A. \end{cases}$$

Assim, a função característica descreve completamente o conjunto $A$, uma vez que indica quais elementos do conjunto $U$ são elementos de $A$.

Permitindo uma espécie de "relaxamento" no conjunto imagem da função característica de um conjunto foi que Zadeh formulou matematicamente um subconjunto fuzzy (Zadeh, 1965).

Definimos um subconjunto fuzzy $A$ de $U$, ou simplesmente conjunto fuzzy, por meio da função de pertinência $\mu_A : U \to [0, 1]$, em que o número

$\mu_A(x)$ representa o grau de pertinência do elemento $x$ ao subconjunto fuzzy $A$.

Um sistema baseado em regras fuzzy possui, basicamente, quatro componentes: um processador de entrada (ou fuzzificador), um conjunto de regras linguísticas, um método de inferência fuzzy e um processador de saída (ou defuzzificador), gerando um número real como saída. A Figura 1 ilustra um sistema fuzzy.

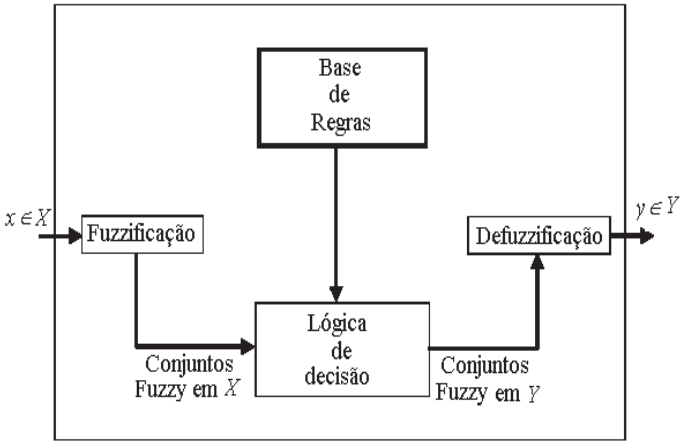


Figura 1: Arquitetura de sistemas baseados em regras fuzzy.

A fuzzificação é o processo pelo qual os valores de entrada do sistema são convertidos para conjuntos fuzzy, com as respectivas faixas de valores onde estão definidos. É um mapeamento do domínio de números reais para o domínio fuzzy.

A base de regras caracteriza os objetivos e a estratégia utilizados por especialistas na área, por meio de um conjunto de regras lingüísticas. Um especialista humano, entrevistado para ajudar a formular o conjunto de regras fuzzy, pode articular *associações de entradas/saídas lingüísticas*. Assim, sistemas fuzzy podem produzir estimativas de um sistema não linear complexo sem recorrer a modelos matemáticos. Nesse escopo, a metodologia fuzzy é um método de estimativa de entrada e saída livre de modelos matemáticos

(Shaw e Simões, 1999). E é justamente esse nosso objetivo, modelar a interação presa-predador sem uso de equações, apenas com regras construídas com o auxílio de especialistas. Por exemplo, considere um controlador fuzzy simples de 2 entradas e 1 saída, consistindo de apenas duas regras:

$R_1$: *SE* $x$ *é* $A_1$ *E* $y$ *é* $B_1$ *ENTÃO* $z$ *é* $C_1$

$R_2$: *SE* $x$ *é* $A_2$ *E* $y$ *é* $B_2$ *ENTÃO* $z$ *é* $C_2$

onde $A_i$, $B_i$, $C_i$ são conjuntos fuzzy.

A lógica de tomada de decisões, incorporada na estrutura de inferência da base de regras, usa implicações fuzzy para simular tomadas de decisão humanas. Ela gera ações - conseqüentes - inferidas a partir de um conjunto de condições de entrada - antecedentes.

O método de inferência que utilizaremos em nosso trabalho é o de Mamdani Pedrycz e Gomide (1998), que agrega as regras por meio do operador lógico OU, modelado pelo operador máximo $\vee$ e, em cada regra, os operadores lógicos E e ENTÃO são modelados pelo operador mínimo $\wedge$. Para ilustrar o método vamos usar apenas duas regras genéricas, do tipo daquelas que aparecem na base de regras do exemplo acima, cada uma com duas entradas e uma saída (Figura 2).

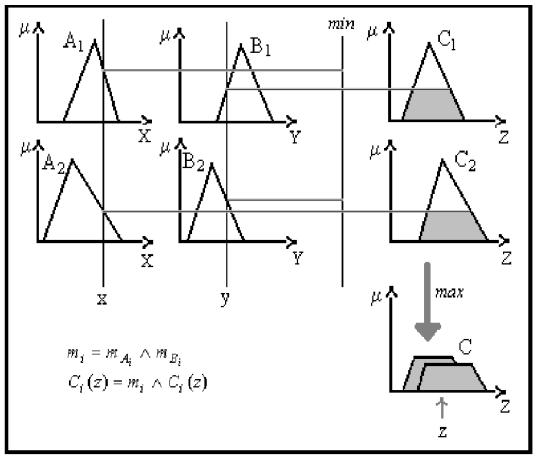


Figura 2: Método de Inferência de Mamdani.

Por fim, na defuzzificação, o valor da variável lingüística de saída, inferida pelas regras fuzzy, é traduzida num valor real. O objetivo é obter-se um único número real que melhor represente os valores fuzzy inferidos da variável lingüística de saída. Para selecionar o método apropriado pode-se utilizar um enfoque baseado no centróide ou nos valores máximos que ocorrem na função de pertinência resultante.

O método do Centro de Gravidade ou Centróide é a técnica de defuzzificação mais comumente usada. Pode ser compreendido como uma média ponderada, onde $\mu_A(x)$ funciona como o peso do valor $x$.

Se $x$ é discreto, então a defuzzificação do conjunto fuzzy $A$ é dada por:

$$\bar{z} = \frac{\sum_x \mu_A(x)x}{\sum_x \mu_A(x)}.$$

Da mesma forma, se $x$ é contínuo, então,

$$\bar{z} = \frac{\int \mu_A(x)xdx}{\int \mu_A(x)dx}.$$

# 3 O Modelo

Nesse trabalho propomos um modelo do tipo presa-predador, baseado em regras fuzzy, que represente a interação entre pulgões (presa) e joaninhas (predador) na citricultura. Levando em conta que cada larva desses predadores pode consumir até 200 pulgões/dia e os adultos predam uma média de 20 pulgões/dia, consideramos que os predadores são diferenciados de acordo com sua força de predação, segundo uma função de pertinência à classe dos predadores como,

$$P_{y_i} = \begin{cases} 1, & se\ larva; \\ 0.1, & se\ adulto \end{cases}$$

e o **potencial de predação** de uma população de predadores como sendo $P_y = p_1 + 0.1 * p_2$, onde $p_1$ é a quantidade de larvas desta população, $p_2$ é a população de adultos.

As variáveis de estado, entradas do sistema, são quantidade de presas e a potencialidade dos predadores. As saídas são as variações das entradas. Porém, um conhecimento preciso envolvendo as variáveis de entradas e suas taxas de variação não está disponível. O que se tem sobre o fenômeno não é suficiente para expressar as taxas de variações como funções dos estados. Isso implica a impossibilidade de modelar a dinâmica do sistema por meio de um sistema de equações diferenciais como é feito de costume. Por outro lado, a partir de informações qualitativas, dadas por especialistas, em particular entomologistas, é possível propor regras que relacione ainda que parcialmente, as variáveis de estado, com suas variações. Nesse sentido, o que se propõe aqui é a substituição das clásicas equações diferenciais por uma base de regras fuzzy para se estudar a evolução do fenômeno. As regras são do tipo: "*Se a quantidade de presa é alta e o potencial de predação é muito baixo, então a variação de presas aumenta pouco e a variação do potencial de predação aumenta muito*".

Utilizamos o Método de Inferência de Mamdani e o método de defuzzificação do Centro de Gravidade para obter as taxas de variação de presas e do potencial de predação.

Em cada instante $t$, o número de presas e o potencial de predação são dados pelas fórmulas:

$$\begin{cases} x(t) = x(t_0) + \displaystyle\int_{t_0}^{t} x'(s)ds \\ P_y(t) = P_y(t_0) + \displaystyle\int_{t_0}^{t} P_y'(s)ds \end{cases} \tag{3.1}$$

Nas simulações numéricas realizadas procuramos observar a variação da quantidade de presas e do potencial de predação. Para isso consideramos um número inicial $x_0$ de presas e um número inicial $P_{y0}$ de potencial de predação. A partir das condições iniciais o sistema fuzzy produz as saídas $x'$ e $P_y'$. Com esses últimos valores, atualizamos $x$ e $P_y$ em cada iteração fazendo:

$$\begin{cases} x(t_{i+1}) = x(t_i) + \displaystyle\int_{t_i}^{t_{i+1}} x'(s)ds \\ P_y(t_{i+1}) = P_y(t_i) + \displaystyle\int_{t_i}^{t_{i+1}} P_y'(s)ds \end{cases} \tag{3.2}$$

Finalmente, para resolver as integrais acima utilizamos a Regra dos Trapézios, já que o sistema fuzzy fornece $x'$ e $P_y'$ em cada iteração $t_i$. Assim o sistema (3.2) passa a ser:

$$\begin{cases} x(t_{i+1}) = x(t_i) + \frac{1}{2}[x'(t_{i+1}) + x'(t_i)] \\ P_y(t_{i+1}) = P_y(t_i) + \frac{1}{2}[P_y'(t_{i+1}) + P_y'(t_i)] \end{cases} \tag{3.3}$$

Agora, utilizando (3.3) e sendo $t_i = t_0 + i$ e $t_0 = 0$, obtemos os valores de $x$ e $P_y$, e assim sucessivamente.

A evolução dos contingentes populacionais de presas e potencial de predação ao longo do tempo para o modelo fuzzy, juntamente com o respectivo plano de fase, estão representados nas Figuras 3 e 4, para diferentes condições iniciais.

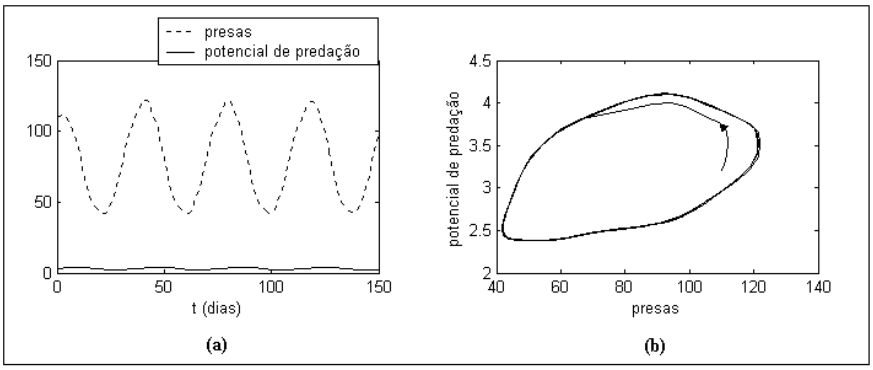


Figura 3: (a) Evolução dos contingentes populacionais ao longo do tempo e (b) Plano de fase do modelo fuzzy, para $x_0 = 110$ e $P_{y0} = 3,2$.

Queremos ressaltar que mesmo sem equações, o modelo produz um plano de fase onde as trajetórias que parecem convergir para um ciclo limite e mantém uma periodicidade.

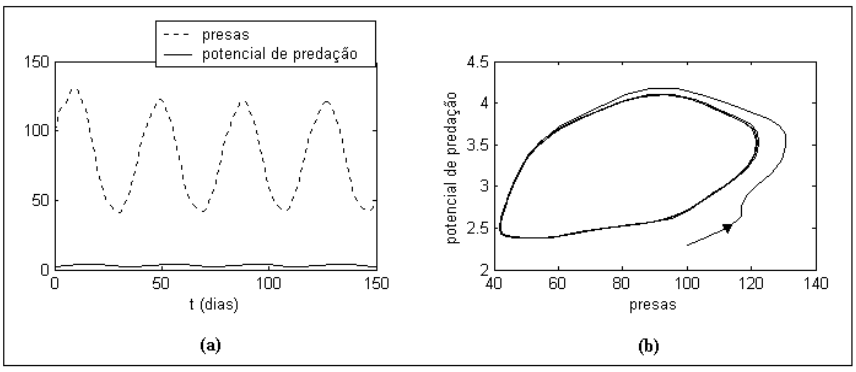


Figura 4: (a) Evolução dos contingentes populacionais ao longo do tempo e (b) Plano de fase do modelo fuzzy, para $x_0 = 100$ e $P_{y0} = 2,3$.

# 4 Modelo Holling-Tanner

A seguir vamos propor um modelo clássico, dado por um sistema de equações diferenciais ordinárias, supondo agora que não há heterogeneidade na classe dos predadores. Com isso é possível encontrar os parâmetros desse novo modelo, utilizando o plano de fase do modelo fuzzy ilustrado nas Figuras 3 e 4. Gostaríamos de comparar o Modelo Presa-predador Fuzzy com o Modelo de Holling-Tanner. Para isso, procuramos ajustar os parâmetros do sistema dado por equações diferenciais a partir do modelo fuzzy obtido. Esta escolha se justifica, pois:

- A população de pulgões cresce logisticamente e um ramo de árvore possui capacidade suporte na ausência de predação.

- Para a população de joaninhas o ramo possui capacidade suporte proporcional ao tamanho da população de presas.

- De acordo com Morales e Buranr Jr. (1985), o número de pulgões predados por dia para a *Cycloneda sanguinea* (adultos, machos e fêmeas), corresponde à resposta funcional do Tipo II de Holling (Figura 5).

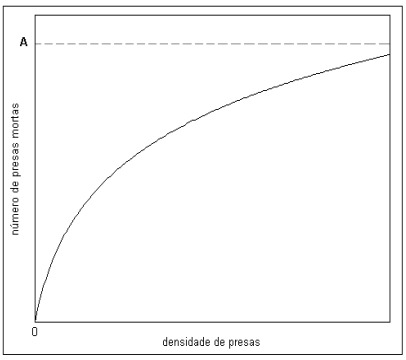


Figura 5: Função que representa um tipo peculiar de resposta funcional em invertebrados (Svirezhev e Logofet, 1983).

Consideremos um sistema presa-predador de Holling-Tanner:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = rx(1 - \dfrac{x}{K}) - \dfrac{mxy}{D+x} \\ \dfrac{dy}{dt} = sy(1 - h\dfrac{y}{x}) \\ x(0) > 0, y(0) > 0 \end{cases} \tag{4.4}$$

onde $r, m, s, h, D, K > 0$, sendo

- a taxa de crescimento interespecífica (função densidade-dependência) é a mesma taxa do modelo logístico para uma espécie isolada. Desta forma, o crescimento das presas é inibido, tendo uma capacidade suporte igual a $K$ na ausência de predadores;
- a taxa de ataque (efeito dos predadores) é crescente em relação à quantidade de presas, aproximando-se de um valor limiar estacionário;
- a capacidade suporte da população de predadores é $\dfrac{x}{h}$, isto é, $y$ deve ser menor que $\dfrac{x}{h}$ para que a população de predadores cresça;
- m é o número máximo de presas que podem ser capturadas por um predador em cada unidade de tempo (taxa máxima de predação per

capita);

- D é o número de presas necessárias para se atingir metade da taxa máxima $m$;
- h é uma medida da qualidade alimentícia proporcionada pela presa para conversão em nascimento de predadores.

Alguns parâmetros conseguimos estimar:

- Como a joaninha adulta consome em média 20 pulgões por dia, então $D = 10$;
- A população com mais de 200 pulgões por ramo já é considerada alta, por isso adotamos a capacidade suporte da população de presas como sendo $K = 200$;
- Considerando que o pulgão gera até 5 novas ninfas por dia enquanto adulto, então adotamos $r = 2$;
- Se a população de joaninhas dobra em 1,03 semana e apenas as fêmeas reproduzem, supomos $s = 0,3$.

Os demais parâmetros foram ajustados de acordo com dados $(x, y)$ gerados pelo modelo fuzzy, substituindo estes dados nas equações (4.4).

Desta forma, chegamos ao seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = 2x\left(1 - \dfrac{x}{200}\right) - \dfrac{30,625xy}{10 + x} \\ \dfrac{dy}{dt} = 0,3y\left(1 - 22,142857\dfrac{y}{x}\right) \\ x(0) > 0, y(0) > 0 \end{cases} \tag{4.5}$$

onde $x$ é a quantidade de presas e $y$ é a quantidade de predadores.

Nas figuras a seguir fazemos dois exemplos de ajuste para os dois modelos.

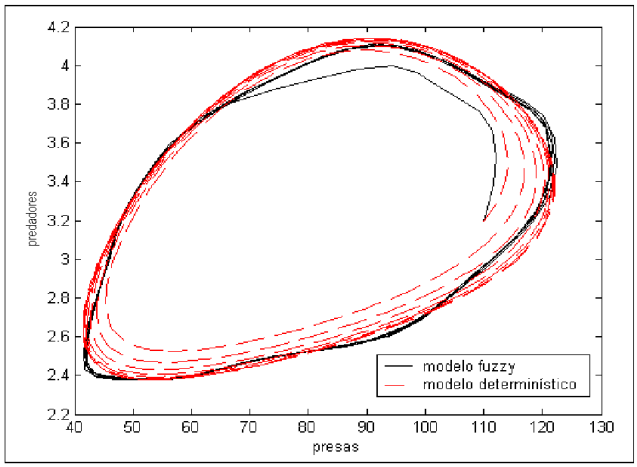


Figura 6: Plano de fase para $x_0 = 110$ e $y_0 = 3,2$

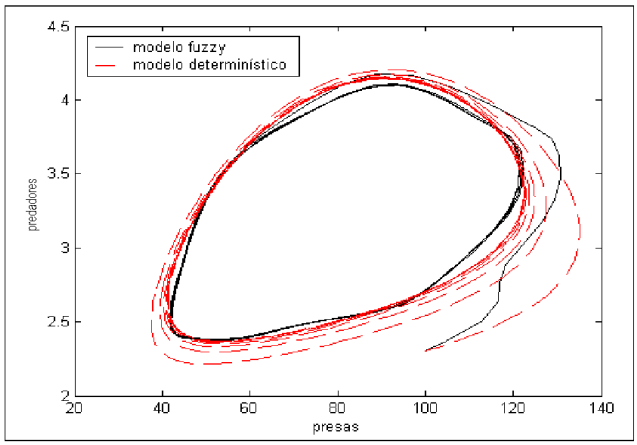


Figura 7: Plano de fase para $x_0 = 100$ e $y_0 = 2,3$

Notemos que a partir da curva no plano de fase obtida através do modelo fuzzy foi possível ajustar a curva de forma a encontrar os parâmetros adequados para o modelo determinístico.

A grande vantagem de se obter os parâmetros de equações diferenciais dadas por (4.4) é o fato de que podemos fazer a análise da estabilidade do sistema.

Ao analisarmos o sistema (4.5) buscamos inicialmente os pontos críticos do mesmo, ou seja, os pares de valores de $x$ e $y$ que tornam as derivadas nulas e mantêm o sistema em equilíbrio constante, sem alteração nos valores de $x$ e $y$. Verificamos que o sistema acima temos um par possível: $(77,5; 3,5)$, que corresponde a populações constantes e não-nulas de presas e de predadores, respectivamente, que podem coexistir em equilíbrio.

É interessante que façamos a análise do que ocorre quando as populações iniciais $x_0$ e $y_0$ estão muito próximas destas populações críticas, ou seja $(x, y)$ é próximo de $(77,5; 3,5)$. Com esta análise verificamos a estabilidade do ponto crítico não nulo.

Vamos fazer a análise de estabilidade do ponto crítico $(77,5; 3,5)$ precisamos das equações das isóclinas que são dadas por:

$$\begin{cases} y = \dfrac{2}{30,625}(10+x)\left(1-\dfrac{x}{200}\right) \\ y = \dfrac{x}{22,142857} \end{cases} \tag{4.6}$$

isóclinas da população de presas e da população de predadores, respectivamente, referente ao sistema de equações (4.5), dadas pela Figura 8.

O máximo da isóclina de presas está em

$$\frac{K-D}{2} = 95 > x^* = 77,5, \tag{4.7}$$

e portanto, o ponto crítico está à direita do máximo. Ainda,

$$\frac{rh}{m} = 1,446 > \frac{s}{r} = 0,15 \tag{4.8}$$

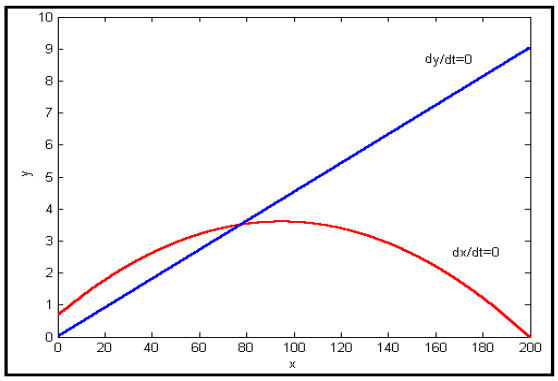


Figura 8: Isóclinas.

Por (4.7) e (4.8), o ponto crítico $(77,5; 3,5)$ é foco de um ciclo limite (ver: Peixoto, 2005).

# 5 Conclusões.

Para finalizar, concluímos que, através de uma base de regras fuzzy, conseguimos modelar a dinâmica *pulgões-joaninhas* sem o uso de equações diferenciais explícitas, apenas utilizando hipóteses naturais da interação presa-predador e o auxílio de especialistas.

Consideramos a utilização da teoria dos conjunto fuzzy uma grande contribuição na construção de modelos matemáticos, principalmente nesses casos onde alguns dos parâmetros das equações diferenciais não são disponíveis.

A grande vantagem de se obter os parâmetros de equações diferenciais está no fato de que podemos fazer a análise da estabilidade do sistema.

# Agradecimentos

Ao Renato Beozzo Bassanezi (Fundecitrus-Araraqura/SP), e aos professores Arício Xavier Linhares (IB/UNICAMP) e Carlos Roberto Sousa e

Silva (UFSCar) pela cooperação para o desenvolvimento deste trabalho.
Ao CNPq, órgão financiador desse projeto de pesquisa.

# Referências

Barros, L. C. e Bassanezi, R. C. (2005). *A vantagem de ser fuzzy: Tópicos em Lógica Fuzzzy com aplicações em Biomatemática.* - No prelo.

Bassanezi, R. B., Gimenes-Fernandes, N., Yamamoto, P. T., e Jesus Jr., W. C. (2004). *Manual da Morte Súbita dos Citros.* Fundecitrus.

FAPESP (2004). As pernas do vírus. *Revista Fapesp*, 99:59.

Gravena, S. (2003). O controle biológico na cultura algodoeira. *Informe Agropecuário*, 9:3–15.

Morales, J. e Buranr Jr., C. L. (1985). Interactions between *cycloneda sanhuine* and the brown citrus aphid: Adult feeding and larval mortality. *Environmental Entomology*, 14(4):520–522.

Pedrycz, W. e Gomide, F. (1998). *An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design.* Massachusetts Institute of Technology.

Peixoto, M. S. (2005). *Sistemas Dinâmicos e Controladores Fuzzy: um Estudo da Dispersão da Morte Súbita dos Citros em São Paulo.* PhD thesis, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP.

Shaw, I. S. e Simões, M. G. (1999). *Controle e Modelagem Fuzzy.* Editora Edgard Blücher ltda., São Paulo.

Svirezhev, Y. M. e Logofet, D. O. (1983). *Stability of Biological Communities.* Mir publishers Moscow.

Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Informat. Control*, 8:338–353.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 67-76* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Controle Fuzzy de Biocida na Morte Súbita dos Citros

Magda S. Peixoto[1], Laécio C. Barros[2], Rodney C. Bassanezi[3],
Departamento de Matemática Aplicada, IMECC - UNICAMP,
13083-859, Campinas/SP.

**Resumo**. Nesse trabalho, usamos um sistema baseado em regras fuzzy para simular a aplicação de biocidas para combater pulgões, insetos transmissores do vírus responsável pela Morte Súbita dos Citros. Verificamos que a estabilidade das populações de praga e de seus predadores é alterada ao se aplicar biocidas. Com a aplicação de veneno o sistema deixa de ter um ciclo limite e passa a ter um equilíbrio assintoticamente estável. Também verificamos um favorecimento da população de praga no equilíbrio.

***Palavras-chave***: *conjuntos fuzzy, base de regras fuzzy, pulgões, joaninhas.*

## 1. Introdução

A Morte Súbita dos Citros(MSC) é uma doença que vem causando sérios prejuízos aos citricultores no Estado de São Paulo. Pesquisadores acreditam que tal doença seja causada por um vírus transmitido por insetos conhecidos como pulgões (FAPESP, 2004). No intuito de preservarem seus

[1]magdapeixoto@yahoo.com.br
[2]laeciocb@ime.unicamp.br
[3]rodney@ime.unicamp.br

pomares, os produtores utilizam indiscriminadamente agrotóxicos, que, como se sabe, possuem efeitos adversos sobre a fauna benéfica - como por exemplo, as joaninhas, predadores naturais de pulgões. É natural que se decida a quantidade de biocida a ser aplicada em função da quantidade de pulgões presente nas árvores, ou seja, quanto maior a densidade populacional de afídeos, maior a quantidade de biocida necessária.

# 2 Preliminares

Para um melhor entendimento do artigo faremos um pequeno resumo sobre o que será aqui utilizado da lógica fuzzy (Barros e Bassanezi, 2005; Peixoto, 2005; Pedrycz e Gomide, 1998).

Um subconjunto (clássico) $A$ do universo $U$ pode ser representado por sua função característica dada por

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1, & se\ x \in A \\ 0, & se\ x \notin A. \end{cases}$$

Assim, a função característica descreve completamente o conjunto $A$, uma vez que indica quais elementos do conjunto $U$ são elementos de $A$.

Permitindo uma espécie de "relaxamento" no conjunto imagem da função característica de um conjunto foi que Zadeh formulou matematicamente um subconjunto fuzzy (Zadeh, 1965).

Definimos um subconjunto fuzzy $A$ de $U$, ou simplesmente conjunto fuzzy, por meio da função de pertinência $\mu_A : U \to [0, 1]$, em que o número $\mu_A(x)$ representa o grau de pertinência do elemento $x$ ao subconjunto fuzzy $A$.

Um sistema baseado em regras fuzzy possui, basicamente, quatro componentes: um processador de entrada (ou fuzzificador), um conjunto de regras linguísticas, um método de inferência fuzzy e um processador de saída (ou defuzzificador), gerando um número real como saída. A Figura 1 ilustra um sistema fuzzy.

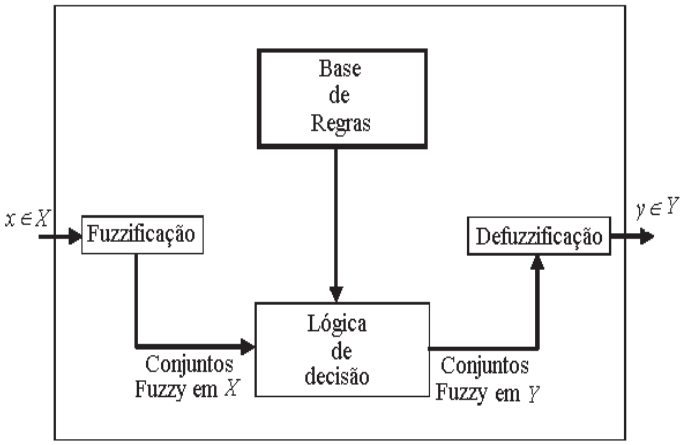


Figura 1: Arquitetura de sistemas baseados em regras fuzzy.

A fuzzificação é o processo pelo qual os valores de entrada do sistema são convertidos para conjuntos fuzzy, com as respectivas faixas de valores onde estão definidos. É um mapeamento do domínio de números reais para o domínio fuzzy.

A base de regras caracteriza os objetivos e a estratégia utilizados por especialistas na área, por meio de um conjunto de regras lingüísticas. Um especialista humano, entrevistado para ajudar a formular o conjunto de regras fuzzy, pode articular *associações de entradas/saídas lingüísticas*. Assim, sistemas fuzzy podem produzir estimativas de um sistema não linear complexo sem recorrer a modelos matemáticos. Nesse escopo, a metodologia fuzzy é um método de estimativa de entrada e saída livre de modelos matemáticos (Shaw e Simões, 1999). E é justamente esse nosso objetivo, modelar a interação presa-predador sem uso de equações, apenas com regras construídas com o auxílio de especialistas. Por exemplo, considere um controlador fuzzy simples de 2 entradas e 1 saída, consistindo de apenas duas regras:

$R_1$: *SE* $x$ *é* $A_1$ *E* $y$ *é* $B_1$ *ENTÃO* $z$ *é* $C_1$

$R_2$: *SE* $x$ *é* $A_2$ *E* $y$ *é* $B_2$ *ENTÃO* $z$ *é* $C_2$

onde $A_i$, $B_i$, $C_i$ são conjuntos fuzzy.

A lógica de tomada de decisões, incorporada na estrutura de inferência da base de regras, usa implicações fuzzy para simular tomadas de decisão humanas. Ela gera ações - conseqüentes - inferidas a partir de um conjunto de condições de entrada - antecedentes.

O método de inferência que utilizaremos em nosso trabalho é o de Mamdani Pedrycz e Gomide (1998), que agrega as regras por meio do operador lógico OU, modelado pelo operador máximo $\vee$ e, em cada regra, os operadores lógicos E e ENTÃO são modelados pelo operador mínimo $\wedge$. Para ilustrar o método vamos usar apenas duas regras genéricas, do tipo daquelas que aparecem na base de regras do exemplo acima, cada uma com duas entradas e uma saída (Figura 2).

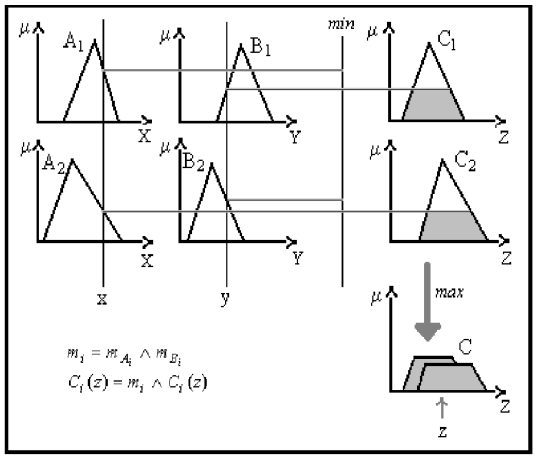


Figura 2: Método de Inferência de Mamdani.

Por fim, na defuzzificação, o valor da variável lingüística de saída, inferida pelas regras fuzzy, é traduzida num valor real. O objetivo é obter-se um único número real que melhor represente os valores fuzzy inferidos da variável lingüística de saída. Para selecionar o método apropriado pode-se utilizar um enfoque baseado no centróide ou nos valores máximos que ocorrem na função de pertinência resultante.

O método do Centro de Gravidade ou Centróide é a técnica de defuzzi-

ficação mais comumente usada. Pode ser compreendido como uma média ponderada, onde $\mu_A(x)$ funciona como o peso do valor $x$.

Se $x$ é discreto, então a defuzzificação do conjunto fuzzy $A$ é dada por:

$$\bar{z} = \frac{\sum_x \mu_A(x)x}{\sum_x \mu_A(x)}.$$

Da mesma forma, se $x$ é contínuo, então,

$$\bar{z} = \frac{\int \mu_A(x)xdx}{\int \mu_A(x)dx}.$$

Essa metodologia nos permitiu realizar um estudo (Peixoto, 2005) a respeito da interação entre pulgões (presas) e joaninhas (predadores) em plantações de citros. A evolução dos contigentes populaçionais ao longo do tempo bem como o plano de fase estão presentes na Figura 3.

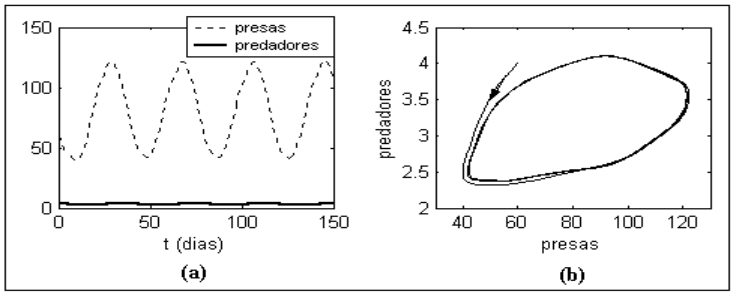


Figura 3: (a) Evolução dos contingentes populacionais de presas e (b) Plano de fase do Modelo Presa-predador Fuzzy estudado em Peixoto (2005) para $x_0 = 60$ e $y_0 = 4$

Nosso interesse a seguir, que é o principal objetivo desse trabalho, é estudar a interferência do uso de biocidas na evolução de cada uma das populações de pulgões e joaninhas, tomando como referência os resultados ilustrados na Figura 3.

# 3 O Modelo

O objetivo quando se aplica um biocida em uma plantação é eliminar a praga. É natural que se decida a quantidade de inseticida a ser aplicada um função da quantidade de pulgões presente nas árvores, ou seja, quanto maior a densidade populacional de afídeos, maior a quantidade de biocida necessária. Assim, optamos por modelar a variável quantidade de biocida - *veneno* - por meio de um sistema baseado em regras fuzzy, dependendo da quantidade de pulgões - $x$. No caso, temos uma variável de entrada, $x$, e uma variável de saída, *veneno*.

Dessa forma, obtem-se a seguinte base de regras:

1. *SE (x é muito baixa) ENTÃO (veneno é pouco)*
2. *SE (x é baixa) ENTÃO (veneno é pouco)*
3. *SE (x é media baixa) ENTÃO (veneno é pouco)*
4. *SE (x é media) ENTÃO (veneno é medio)*
5. *SE (x é alta) ENTÃO (veneno é medio)*
6. *SE (x é muito alta) ENTÃO (veneno é muito)*

A partir do Método de Inferência de Mamdani, combinado com a defuzzificação pelo Centro de Gravidade, obtemos a curva $veneno = veneno(x)$ e representada na Figura 4, saída do sistema fuzzy.

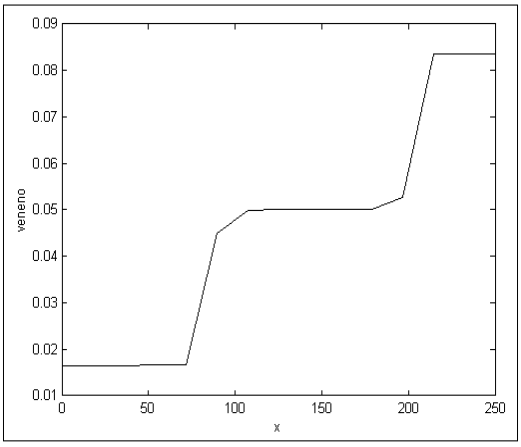


Figura 4: Solução dada pelo controlador fuzzy: $veneno = veneno(x)$.

O gráfico da Figura 4 ilustra a quantidade de biocida que deve ser aplicada em função da quantidade de pulgões presentes na árvore, ou seja, a partir da densidade populacional de afídeos obtemos, através do controlador fuzzy, a porcentagem das populações de insetos na árvore que será retirada.

Supondo que a aplicação de veneno seja contínua e que uma fração, proporcional ao tamanho de cada uma delas, seja retirada, propomos uma alteração no modelo de interação presa-predador comentado acima. A Figura 5 ilustra o nosso procedimento.

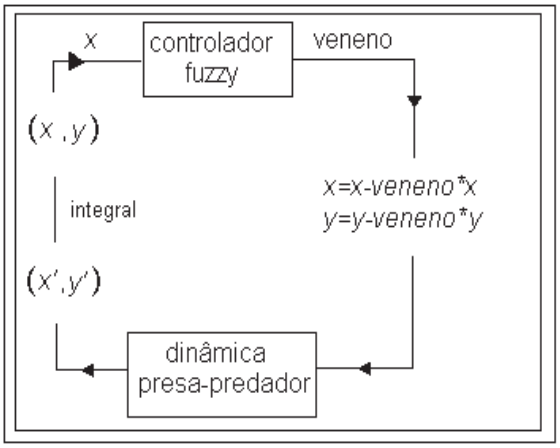


Figura 5: Sistema fuzzy composto pelos dois controladores fuzzy: *veneno* e sistema dinâmico.

# 4 Simulações

Nas simulações numéricas procuramos observar as variações das quantidades de presas e de predadores com aplicações contínuas de biocidas. Para isso consideramos a quantidade média de pulgões e joaninhas num ramo de laranjeira. Iniciamos as simulações com um número inicial $x_0$ de pulgões e um número inicial $y_0$ de predadores num ramo da árvore, escolhidos aleatoriamente.

A partir de $x_0$, obtemos pelo controlador fuzzy acima o valor da variável *veneno*. Daí, é feita a retirada nas populações de presas e de predadores, ou seja, vamos admitir que

$$\begin{cases} \tilde{x}_0 = x_0 - veneno * x_0, \\ \tilde{y}_0 = y_0 - veneno * y_0. \end{cases} \tag{4.1}$$

Agora $\tilde{x}_0$ e $\tilde{y}_0$ são as variáveis de entrada do Modelo Presa-Predador Fuzzy estudado em Peixoto (2005), ou seja, um modelo do tipo presa-predador, baseado em regras fuzzy, que representa a interação entre pulgões (presa) e joaninhas (predador) no qual as trajetórias parecem convergir para um ciclo limite. Em tal modelo, as variáveis de estado, entradas do sistema, são as quantidades de presas e de predadores. As saídas são as variações das entradas e assim, obtemos os valores de $x_1'$ e $y_1'$, onde em cada instante $t$, o número de presas e de predadores é dado pelas fórmulas:

$$\begin{cases} x(t) = x(t_0) + \displaystyle\int_{t_0}^{t} x'(s)ds \\ y(t) = y(t_0) + \displaystyle\int_{t_0}^{t} y'(s)ds \end{cases} \tag{4.2}$$

Assim, em cada iteração por (4.2) fazemos:

$$\begin{cases} x(t_{i+1}) = x(t_i) + \displaystyle\int_{t_i}^{t_{i+1}} x'(s)ds \\ y(t_{i+1}) = y(t_i) + \displaystyle\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'(s)ds \end{cases} \tag{4.3}$$

Para resolver as integrais acima utilizamos a Regra dos Trapézios, já que o sistema fuzzy fornece $x'$ e $y'$ em cada iteração $t_i$. Assim o sistema (4.3) passa a ser:

$$\begin{cases} x(t_{i+1}) = x(t_i) + \frac{1}{2}[x'(t_{i+1}) + x'(t_i)] \\ y(t_{i+1}) = y(t_i) + \frac{1}{2}[y'(t_{i+1}) + y'(t_i)] \end{cases} \tag{4.4}$$

Agora, utilizando (4.4) e sendo $t_i = t_0 + i$ e $t_0 = 0$, obtemos os valores de $x$ e $y$.

A partir do novo valor $x_1$, temos através do controlador fuzzy, a nova quantidade de biocida a ser aplicada e assim sucessivamente, como esquematizado na Figura 5.

A a evolução dos contingentes populacionais de presas e de predadores obtida ao longo do tempo para o modelo presa0predador fuzzy com uso de biocidas, juntamente com o respectivo plano de fase, estão representados na Figura 6.

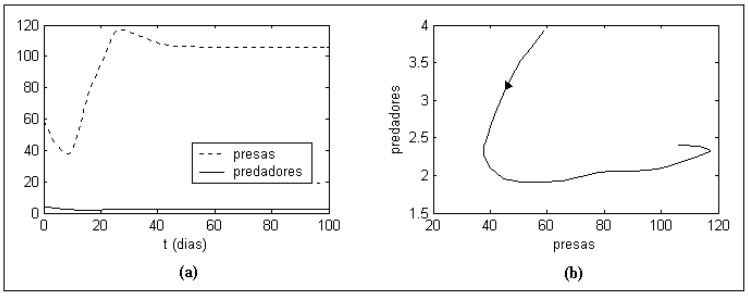


Figura 6: (a) Evolução dos contingentes populacionais de presas e (b) Plano de fase do modelo fuzzy com uso de biocidas para $x_0 = 60$ e $y_0 = 4$

# 5 Conclusões.

Comparando o modelo presa-predador fuzzy para pulgões e joaninhas dado por Peixoto (2005) com o sistema pulgão-joaninha fuzzy com aplicação de veneno dado acima, observações importantes podem ser feitas:

- Houve um deslocamento do ponto de equilíbrio de $(77,5; 3,5)$ para $(105,76; 3,18)$. Isto implica que uma aplicação moderada e constante de veneno faz crescer a população de pulgões e decrescer a de joaninhas no estado de equilíbrio.

- A estabilidade do ponto de equilíbrio foi alterada. Enquanto o modelo presa-predador fuzzy sem aplicação de veneno possui um ciclo limite, o

ponto de equilíbrio $(105,76;3,18)$ do modelo presa-predador fuzzy com aplicação de biocidas é assintoticamente estável.

- As observações acima sugerem que o uso de biocidas em plantações favorece a população de pragas.

## Agradecimentos

Ao Renato Beozzo Bassanezi (Fundecitrus-Araraqura/SP), e aos professores Arício Xavier Linhares (IB/UNICAMP) e Carlos Roberto Sousa e Silva (UFSCar) pela cooperação para o desenvolvimento deste trabalho.

Ao CNPq, órgão financiador desse projeto de pesquisa.

## Referências

Barros, L. C. e Bassanezi, R. C. (2005). *A vantagem de ser fuzzy: Tópicos em Lógica Fuzzzy com aplicações em Biomatemática.* - No prelo.

FAPESP (2004). As pernas do vírus. *Revista Fapesp*, 99:59.

Pedrycz, W. e Gomide, F. (1998). *An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design.* Massachusetts Institute of Technology.

Peixoto, M. S. (2005). *Sistemas Dinâmicos e Controladores Fuzzy: um Estudo da Dispersão da Morte Súbita dos Citros em São Paulo.* PhD thesis, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP.

Shaw, I. S. e Simões, M. G. (1999). *Controle e Modelagem Fuzzy.* Editora Edgard Blücher ltda., São Paulo.

Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Informat. Control*, 8:338–353.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 77-96* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Modelagem Fuzzy de Diagnóstico Médico e Monitoramento do Tratamento da Pneumonia

Wanda Aparecida Lopes[1],
Rosana Sueli da Motta Jafelice [2],
FAMAT – UFU, 38408-100, Uberlândia/MG.

Laécio Carvalho de Barros[3],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

**Resumo**. Neste artigo, propomos um sistema fuzzy que simula a atuação de um médico no diagnóstico de pacientes que apresentam sinais e sintomas de doenças das vias aéreas superiores e inferiores, apartir de informações dadas por especialista da área. Consideramos um paciente com uma pneumonia grave que necessitou de um aparelho de respiração mecânica, onde relacionamos parâmetros do indivíduo; fração inspirada de oxigênio do respirador e a saturação parcial de oxigênio do paciente como variavéis lingüísticas que influenciam a compensação das trocas gasosas, através de um sistema baseado em regras fuzzy. A partir, da compensação das trocas gasosas como antecedente de um outro sistema baseado em regras fuzzy, determinamos se a respiração mecânica é fraca ou forte. Desta forma, podemos dar um indicativo para o especialista, se o indivíduo tem condições de respirar espontaneamente.

***Palavras-chave***: *Conjuntos Fuzzy; Diagnóstico Médico; Pneumonia.*

[1]wandaprof@yahoo.com.br
[2]rmotta@ufu.br
[3]laeciocb@ime.unicamp.br

# 1. Introdução

O ser humano, há séculos, sofre e sente dores. O diagnóstico médico pode ser uma tarefa complicada, de certa forma, é um exercício de comparação: o médico precisa confrontar os dados que reuniu (através da anamnese, do exame físico e dos exames complementares) com as informações disponíveis a respeito das diversas doenças existentes.

Diagnóstico Médico Fuzzy é uma aplicação da teoria dos conjuntos fuzzy que é feita com a ajuda de um especialista médico. O objetivo desta aplicação é propor um sistema fuzzy para ajudar o médico a tomar decisões e optar por exames laboratorias mais detalhados (Barros e Bassanezi, 2001).

Neste artigo optamos por diagnosticar doenças das vias aéreas superiores e inferiores. Com as informações da especialista, foi possível relacionar sinais e sintomas de alguns indivíduos com as doenças em questão.

Consideramos um indivíduo que foi diagnosticado com uma pneumonia bacteriana grave e que necessitou de um tratamento em uma UTI (Unidade de Tratamento Intensiva) tendo a necessidade do uso de um aparelho de respiração mecânica, onde a compensação das trocas gasosas do indivíduo foi considerada como uma variável lingüística fuzzy que depende da fração inspirada de oxigênio do respirador e da saturação parcial de oxigênio do indivíduo. Inclusive, através do sistema baseado em regras fuzzy, podemos ter um indicativo quanto a possibilidade de retirar o indivíduo da respiração mecânica.

Na próxima seção, apresentamos alguns conceitos importantes da teoria dos conjuntos fuzzy.

# 2. Preliminares

Um *subconjunto fuzzy* $F$ do conjunto universo $\mathcal{U}$ é definido em termos de uma função de *pertinência* $u$ que cada elemento $x$ de $\mathcal{U}$ associa um número $u(x)$, entre *zero e um* chamado de grau de pertinência de $x$ a $F$. Assim, o

conjunto fuzzy $F$ é simbolicamente indicado por sua função de pertinência

$$u : \mathcal{U} \rightarrow [0, 1]$$

Os valores $u(x) = 1$ e $u(x) = 0$ indicam, respectivamente, a pertinência plena e a não pretinência do elemento $x$ a $F$.

É interessante notar que um subconjunto clássico $A$ de $\mathcal{U}$ é um particular conjunto fuzzy para o qual a função de pertinência é a função característica de $A$, isto é,

$$u_A : \mathcal{U} \rightarrow [0, 1].$$

Uma relação fuzzy R, sobre $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2 \times ... \times \mathcal{U}_n$, é qualquer subconjunto fuzzy do produto cartesiano $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2 \times ... \times \mathcal{U}_n$,. Se o produto cartesiano for formado por apenas dois conjuntos, $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2$, a relação é chamada de fuzzy binária sobre $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2$. Uma noção que será muito importante para o nosso trabalho, é o produto cartesiano entre conjuntos.

O produto cartesiano $R(x_1, x_2, ..., x_n)$ dos subconjuntos fuzzy $A_1, A_2, ...A_n$ de $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, ... \mathcal{U}_3$, é a relação fuzzy

$$R(x_1, x_2, ..., x_n) = u_{A_1}(x_1) \wedge u_{A_2}(x_2) \wedge ... \wedge u_{A_n}(x_n) \tag{2.1}$$

onde $\wedge$ é a t-norma min.

A noção e utilização de produto cartesiano fuzzy ficará mais clara quando introduzirmos o conceito de sistemas baseados em regras fuzzy, que são sistemas compostos de regras da forma 'Se...então', pois estas regras podem ser interpretadas como produtos cartesianos de conjuntos fuzzy.

Os sistemas baseados em regras fuzzy (SBRF) contêm quatro componentes: um processador de entrada que realiza a fuzzificação dos dados de entrada, uma coleção de regras nebulosas chamada base de regras, uma máquina de inferência fuzzy (Método de Mamdani) e um processador de saída que fornece um número real como saída (Jafelice, 2003). Estes componentes estão conectados conforme indicado na Figura 1.

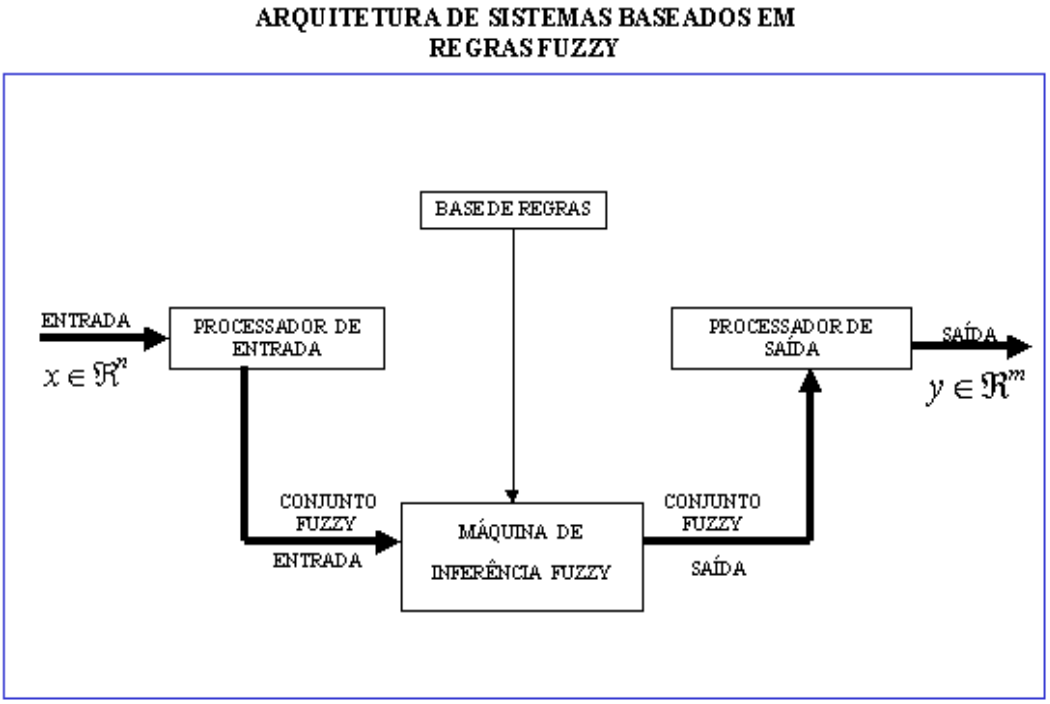


Figura 1: Sistemas baseados em regras fuzzy (Jafelice, 2003).

- **Processador de Entrada (Fuzzificação)**
  Neste componente as entradas do sistema são traduzidas em conjuntos fuzzy em seus respectivos domínios. A atuação de um especialista na área do fenômeno a ser modelado é de fundamental importância para colaborar na construção das funções de pertinências para a descrição das entradas.

- **Base de Regras**
  Este componente, juntamente com a máquina de inferência, pode ser considerado o núcleo dos sistemas baseados em regras fuzzy. Ele é composto por uma coleção de proposições fuzzy na forma Se...então....

Cada uma destas proposições pode, por exemplo, ser descrita lingüísticamente de acordo com o conhecimento de um especialista. A base de regras descreve relações entre as variáveis lingüísticas, para serem utilizadas na máquina de inferência fuzzy que descreveremos no próximo item.

- **Máquina de Inferência Fuzzy**
  É neste componente que cada proposição fuzzy é traduzida matematicamente por meio das técnicas de raciocínio aproximado. Os operadores matemáticos serão selecionados para definir a relação fuzzy que modela a base de regras. Desta forma, a máquina de inferência fuzzy é de fundamental importância para o sucesso do sistema fuzzy, já que fornece a saída a partir de cada entrada fuzzy e da relação definida pela base de regras. Apresentaremos aqui um dos métodos particulares de Inferência Fuzzy: o Método de Mamdani.

  **Método de Mamdani**
  Uma regra Se (antecedente) então (conseqüente) é definida pelo produto cartesiano fuzzy dos conjuntos fuzzy que compõem o antecedente e o conseqüente da regra. O método de Mamdani agrega as regras através do operador lógico OU, que é modelado pelo operador máximo e, em cada regra, o operador lógico E é modelado pelo operador mínimo. Veja as regras a seguir:

  **Regra 1: Se ($x$ é $A_1$ e $y$ é $B_1$) então ($z$ é $C_1$).**
  **Regra 2: Se ($x$ é $A_2$ e $y$ é $B_2$) então ($z$ é $C_2$).**

  A Figura 2 ilustra como uma saída real $z$ de um sistema de inferência do tipo Mamdani é gerada a partir das entradas $x$ e $y$ reais e a regra de composição *max-min*.
  A saída $z \in \mathbb{R}$ é obtida pela defuzzificação do conjunto fuzzy de saída $C = C_1' \cup C_2'$ da Figura 2.

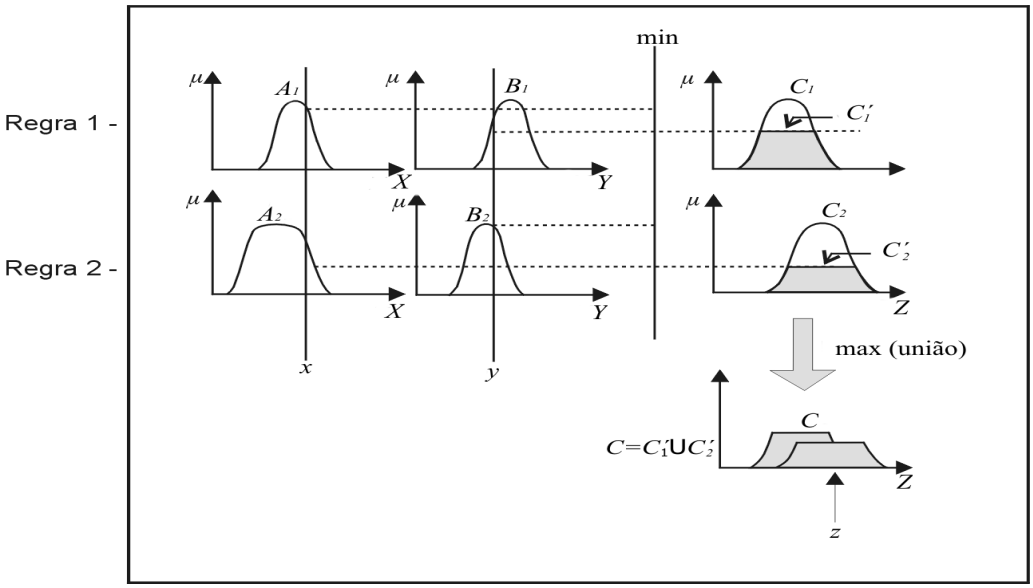


Figura 2: Método de Mamdani com composição *max-min*.

Uma definição importante em diagnóstico médico é composição de relações fuzzy binárias, que definimos a seguir:

Considere $R$ e $S$ duas relações fuzzy binárias em $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2$ e $\mathcal{U}_2 \times \mathcal{U}_3$, respectivamente.

A composição RoS é uma relação fuzzy binária em $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_3$ por

$$u_{RoS}(x_1, x_3) = \max_{x_2 \in \mathcal{U}_2}[min(u_R(x_1, x_2), u_S(x_2, x_3))]. \tag{2.2}$$

Quando os conjuntos $\mathcal{U}_1$, $\mathcal{U}_2$ e $\mathcal{U}_3$ são finitos, então a forma matricial da relação $RoS$, dada pela composição max-min, é obtida como uma multiplicação de matrizes substituindo-se o produto pelo mínimo e a soma pelo máximo.

Definiremos um caso especial da composição max-min, que será utilizada no diagnóstico médico.

Sejam $\mathcal{U}_1$ e $\mathcal{U}_2$ dois conjuntos, $\mathcal{F}(\mathcal{U}_1)$ e $\mathcal{F}(\mathcal{U}_2)$, as classes dos conjuntos fuzzy de $\mathcal{U}_1$ e $\mathcal{U}_2$, respectivamente, e $R$ uma relação binária sobre $\mathcal{U}_1 \times \mathcal{U}_2$.

Então a relação $R$ define um funcional de $\mathcal{F}(\mathcal{U}_1)$ em $\mathcal{F}(\mathcal{U}_2)$ que a cada elemento $A_1 \in \mathcal{F}(\mathcal{U}_1)$, faz corresponder o elemento $A_2 \in \mathcal{F}(\mathcal{U}_2)$, a função de pertinência é dada por:

$$u_{A_2}(x_2) = u_{R(A_1)}(x_2) = \max_{x_1 \in \mathcal{U}_1}[min(u_{A_1}(x_1), u_R(x_1, x_2))] \tag{2.3}$$

# 3. Diagnóstico Médico Fuzzy

A idéia básica é relacionar os sinais e sintomas dos pacientes com as possíveis doenças das vias aéreas superiores e inferiores, de acordo com os conhecimentos médicos da especialista.

Considere os seguintes conjuntos universais:

- $U$= conjunto dos pacientes;
- $V$= conjunto de sinais e sintomas;
- $W$= conjunto de doenças.

Neste caso, trata-se de doenças das vias aéreas superiores e inferiores das quais tem-se conhecimento de sete pacientes $P_1$, $P_2$, $P_3$, $P_4$, $P_5$, $P_6$, $P_7$, com os sinais e sintomas $s_1$, $s_2$, $s_3$ , $s_4$, $s_5$, $s_6$, $s_7$, $s_8$, $s_9$, $s_{10}$, $s_{11}$, $s_{12}$, $s_{13}$, $s_{14}$, que apresentaram os diagnósticos $d_1$, $d_2$, $d_3$, $d_4$, $d_5$, $d_6$, $d_7$ onde:

- $s_1$ = febre
- $s_2$ = tosse produtiva
- $s_3$ = tosse seca
- $s_4$ = cefaléia
- $s_5$ = dor torácica
- $s_6$ = dores musculares
- $s_7$ = mal-estar geral
- $s_8$ = irritação de garganta
- $s_9$ = rouquidão
- $s_{10}$ = coriza
- $s_{11}$ = espirros
- $s_{12}$ = dispnéia
- $s_{13}$ = sudorese
- $s_{14}$ = calafrios

- $d_1$ = pneumonia
- $d_2$ = bronquite
- $d_3$ = rinite
- $d_4$ = sinusite
- $d_5$ = gripe
- $d_6$ = laringite
- $d_7$ = amigdalite

Esses dados irão compor a base de conhecimentos que serão expressos por meio de relações fuzzy. Solicitamos a especialista que estabelecesse o grau da relação fuzzy $R$, Tabela 1, onde as colunas são as doenças consideradas, as linhas são os sinais e sintomas, e os valores da matriz são o grau com que os sinais e sintomas se relacionam com as doenças. Na Tabela 2 apresentamos o grau em que os sinais e sintomas aparecem nos pacientes, estes graus foram solicitados a especialista.

| s \ d | $d_1$ | $d_2$ | $d_3$ | $d_4$ | $d_5$ | $d_6$ | $d_7$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $s_1$ | 1.0 | 0.1 | 0.0 | 0.6 | 0.5 | 0.2 | 0.9 |
| $s_2$ | 0.8 | 0.3 | 0.2 | 0.7 | 0.5 | 0.4 | 0.1 |
| $s_3$ | 0.8 | 0.9 | 0.8 | 0.5 | 0.5 | 0.4 | 0.2 |
| $s_4$ | 0.3 | 0.2 | 0.2 | 0.9 | 0.8 | 0.1 | 0.3 |
| $s_5$ | 0.8 | 0.4 | 0.1 | 0.1 | 0.2 | 0.1 | 0.0 |
| $s_6$ | 0.4 | 0.0 | 0.4 | 0.2 | 0.9 | 0.3 | 0.6 |
| $s_7$ | 0.9 | 0.3 | 0.2 | 0.7 | 0.8 | 0.3 | 0.9 |
| $s_8$ | 0.1 | 0.1 | 0.3 | 0.4 | 0.8 | 0.5 | 1.0 |
| $s_9$ | 0.0 | 0.3 | 0.2 | 0.1 | 0.3 | 1.0 | 0.4 |
| $s_{10}$ | 0.2 | 0.2 | 0.9 | 0.8 | 0.5 | 0.2 | 0.1 |
| $s_{11}$ | 0.2 | 0.2 | 1.0 | 0.2 | 0.6 | 0.1 | 0.0 |
| $s_{12}$ | 0.8 | 1.0 | 0.3 | 0.2 | 0.5 | 0.3 | 0.2 |
| $s_{13}$ | 0.7 | 0.6 | 0.0 | 0.1 | 0.4 | 0.0 | 0.1 |
| $s_{14}$ | 0.8 | 0.0 | 0.1 | 0.4 | 0.6 | 0.2 | 0.5 |

Tabela 1: Relação fuzzy sintomas x doenças.

| P \ s | $s_1$ | $s_2$ | $s_3$ | $s_4$ | $s_5$ | $s_6$ | $s_7$ | $s_8$ | $s_9$ | $s_{10}$ | $s_{11}$ | $s_{12}$ | $s_{13}$ | $s_{14}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $P_1$ | 0.0 | 0.0 | 0.9 | 0.3 | 0.0 | 0.0 | 0.1 | 0.6 | 1.0 | 0.2 | 0.0 | 0.1 | 0.0 | 0.0 |
| $P_2$ | 0.8 | 0.0 | 0.1 | 0.2 | 0.0 | 0.0 | 0.6 | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.5 | 0.2 |
| $P_3$ | 0.0 | 0.0 | 1.0 | 0.3 | 0.4 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.3 | 1.0 | 0.8 | 0.0 |
| $P_4$ | 1.0 | 0.7 | 0.4 | 0.5 | 0.6 | 0.6 | 0.8 | 0.1 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.5 | 0.3 | 0.3 |
| $P_5$ | 0.0 | 0.0 | 0.4 | 0.3 | 0.0 | 0.0 | 0.2 | 0.2 | 0.0 | 0.8 | 0.9 | 0.0 | 0.1 | 0.1 |
| $P_6$ | 0.3 | 0.5 | 0.0 | 1.0 | 0.0 | 0.0 | 0.3 | 0.1 | 0.0 | 0.4 | 0.3 | 0.2 | 0.0 | 0.0 |
| $P_7$ | 0.8 | 1.0 | 0.0 | 0.5 | 0.2 | 0.9 | 0.6 | 0.2 | 0.0 | 0.3 | 0.5 | 0.1 | 0.8 | 0.5 |

Tabela 2: Relação fuzzy pacientes x sintomas.

Por exemplo, o diagnóstico médico do paciente $P_1$, via relação fuzzy $R$, é facilmente obtido através da equação (2.3). Assim, de acordo com os sianis e sintomas apresentados, o paciente $P_1$ pode ter uma das doenças $d_i$, $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$, com os respectivos graus de possibilidades:

$$u_{R(P_1)}(d_1) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_1, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.8$$

$$u_{R(P_1)}(d_2) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_2, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.9$$

$$u_{R(P_1)}(d_3) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_3, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.8$$

$$u_{R(P_1)}(d_4) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_4, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.5$$

$$u_{R(P_1)}(d_5) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_5, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.6$$

$$u_{R(P_1)}(d_6) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_6, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 1.0$$

$$u_{R(P_1)}(d_7) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_7, s_i), u_{P_1}(s_i)]] = 0.6$$

Assim, de acordo com os sintomas apresentados, o paciente $P_4$ pode ter também uma das doenças $d_i$, $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$, com os respectivos graus de possibilidades:

$$u_{R(P_4)}(d_1) = \max_{1 \leq i \leq 14} [min[u_R(d_1, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 1.0$$

$$u_{R(P_4)}(d_2) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_2, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.5$$

$$u_{R(P_4)}(d_3) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_3, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.4$$

$$u_{R(P_4)}(d_4) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_4, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.7$$

$$u_{R(P_4)}(d_5) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_5, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.8$$

$$u_{R(P_4)}(d_6) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_6, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.4$$

$$u_{R(P_4)}(d_7) = \max_{1 \leq i \leq 14}[min[u_R(d_7, s_i), u_{P_4}(s_i)]] = 0.9$$

Desta forma, obtém-se os diagnósticos para todos os pacientes:

- $u_{R(P_1)} = (0.8; 0.9; 0.8; 0.5; 0.6; 1.0; 0.6)$
- $u_{R(P_2)} = (0.8; 0.5; 0.3; 0.6; 0.8; 0.5; 1.0)$
- $u_{R(P_3)} = (0.8; 1.0; 0.8; 0.5; 0.5; 0.4; 0.3)$
- $u_{R(P_4)} = (1.0; 0.5; 0.4; 0.7; 0.8; 0.4; 0.9)$
- $u_{R(P_5)} = (0.4; 0.4; 0.9; 0.8; 0.6; 0.4; 0.3)$
- $u_{R(P_6)} = (0.5; 0.3; 0.4; 0.9; 0.8; 0.4; 0.3)$
- $u_{R(P_7)} = (0.8; 1.0; 0.8; 0.5; 0.5; 0.4; 0.3)$

A possibilidade do paciente $P_1$ ter pneumonia, bronquite, rinite, sinusite, gripe, laringite, amigdalite é 0.8, 0.9, 0.8, 0.5, 0.6, 1.0 e 0.6. E a possibilidade do paciente $P_4$ ter pneumonia, bronquite, rinite, sinusite, gripe, laringite, amigdalite é 1.0, 0.5, 0.4, 0.7, 0.8, 0.4 e 0.9, respectivamente. Portanto, nota-se que o paciente $P_1$, pela teoria aplicada, tem maior possibilidade de estar com laringite; e o paciente $P_4$ de estar com pneumonia. Segundo a especialista os pacientes $P_1$ e $P_4$ foram diagnosticados com laringite e pneumonia, respectivamente.

Note que a resposta da composição é também um conjunto fuzzy, ou seja, a composição nem sempre responde qual doença o paciente possui.

A composição fuzzy fornece a distribuição de possibilidades do paciente no conjunto de doenças dado que ele apresenta uma certa distribuição de possibilidades no conjunto de sintomas (Massad et al., 2004).

Outra propriedade importante da relação fuzzy é que após ter diagnósticos de novos pacientes, estes podem ser incluídos na base de conhecimentos e assim aumentar a capacidade de se obter mais diagnósticos por meio da relação fuzzy $R$, tal como faz o médico.

Na próxima seção, consideramos que o paciente $P_4$ está com uma pneumonia grave e necessita do uso de aparelho de respiração mecânica.

# 4. Indivíduos com Pneumonia que fez uso de UTI

Consideramos o paciente $P_4$ com uma pneumonia grave, que não é possível ser tratada a nível ambulatórial, sendo necessário internação e além disso devido complicação pulmonar e respiratória fez uso de uma UTI, necessitando do uso de aparelho de respiração mecânica, ou seja, o paciente passou um tempo respirando com ajuda de um aparelho até que seu estado clínico melhorasse. Este paciente foi submetido a um tratamento com várias medicações, inclusive fortes antibióticos. Após alguns dias de tratamento este paciente, está com uma gasometria arterial dentro da normalidade, sem nenhuma complicação e praticamente curado da pneumonia.

Indivíduos em uso de aparelho de respiração mecânica são avaliados com freqüência, de uma em uma hora, pela equipe médica, onde são considerados vários parâmetros, entre eles a compensação das trocas gasosas do indivíduo ($CGT$), que depende da, fração inspirada de oxigênio do respirador ($FiO_2$) e da saturação parcial de oxigênio do indivíduo ($SpO_2$). Estamos relacionando apenas $FiO_2$ do aparelho de respiração mecânica e $SpO_2$ do indivíduo.

Os indivíduos em uso de aparelho de respiração mecânica começam com uma $FiO_2$ de 100%, sendo reduzida gradativamente, observando alguns

parâmetros entre eles, a $SpO_2$ do indivíduo. Diminui-se a $FiO_2$ do aparelho se o indivíduo satura bem ou seja se $SpO_2$ é alta. Desta maneira, temos a seguinte proposição: Se $FiO_2$ é baixa e $SpO_2$ é alta então a $CGT$ é boa.

Assim, vamos considerar as variáveis $FiO_2$ e $SpO_2$, como variáveis lingüísticas que influenciam na $CGT$ do indivíduo e temos um sistema baseado em regras fuzzy, Figura 3, em seguida, como a compensação das trocas gasosas infuencia na retirada do indivíduo do aparelho de respiração mecânica através de outro sistema baseado em regras fuzzy, conforme Figura 4.

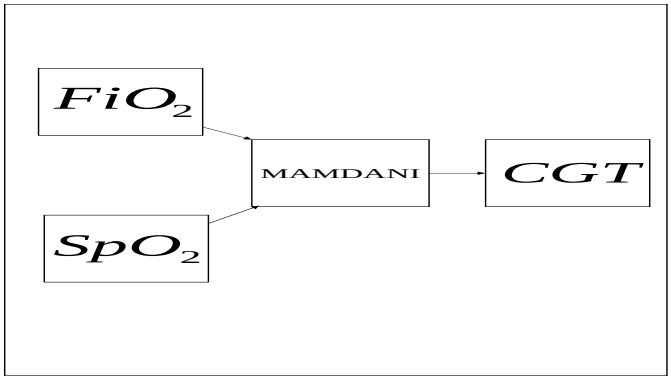


Figura 3: Primeiro esquema do Sistema Baseado em Regras Fuzzy.

Adotamos a base de regras fuzzy assumindo como antecedentes a fração inspirada de oxigênio ($FiO_2$), considerando um domínio de [21, 100], representando as faixas $< 40$, 40 - 80, $> 80$ pelos termos lingüísticos {*baixa*, *média*, *alta*}; e a saturação parcial de oxigênio ($SpO_2$), considerando um domínio de [60, 100], representando as faixas $< 80$, 80 - 91, $> 91$ pelos termos lingüísticos {*ruim*, *média*, *boa*}. Como consequente adotamos a compensação das trocas gasosas ($CGT$), considerando domínio [0, 10], representando as faixas $< 5$, 5 - 7.5, $> 7.5$ pelos termos lingüísticos {*ruim*, *média*, *boa*}, respectivamente.

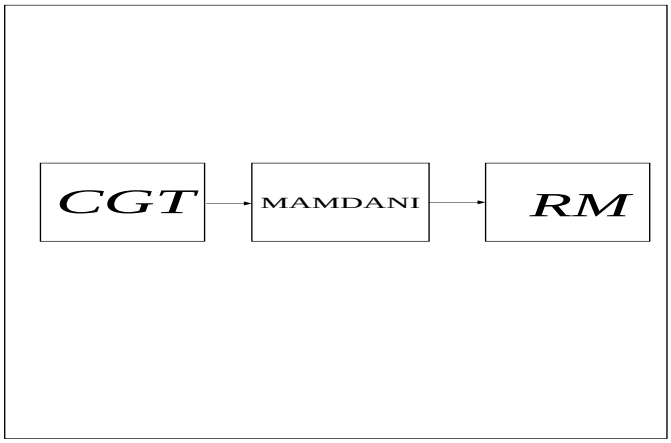


Figura 4: Segundo esquema do Sistema Baseado em Regras Fuzzy.

O modelo foi desenvolvido via SBRF (Sistema Baseado em Regras Fuzzy) utilizamos o Método de Mandani para obter o comportamento de $CGT$, ou seja, determinamos os valores de $CGT$, onde os valores assumidos estão traduzidos pelas funções de pertinência como mostram as Figuras 5, 6, 7. A base de regras obtida está na Tabela 3.

| $(SpO_2)$ / $(FiO_2)$ | *boa* | *média* | *ruim* |
|---|---|---|---|
| *alta* | *média* | *ruim* | *ruim* |
| *média* | *média* | *ruim* | *ruim* |
| *baixa* | *boa* | *média* | *ruim* |

Tabela 3: Regras fuzzy para $FiO_2$ e $SpO_2$.

Para os valores do domínio de $FiO_2$ e $SpO_2$, de um indivíduo em uso de aparelho de respiração mecânica, determinamos os valores de $CGT$, utilizando o SBRF e obtemos a superfície mostrada na Figura 8.

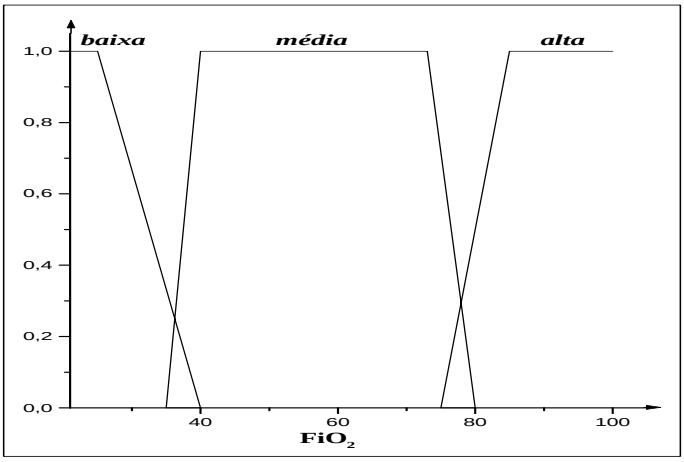


Figura 5: Funções de pertinência de $FiO_2$.

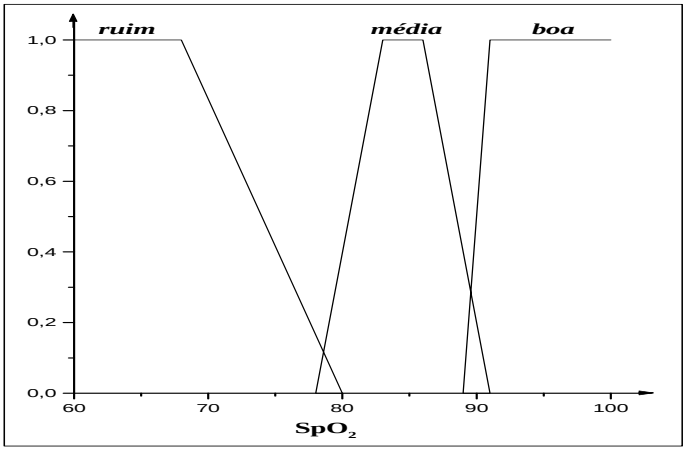


Figura 6: Funções de pertinência de $SpO_2$.

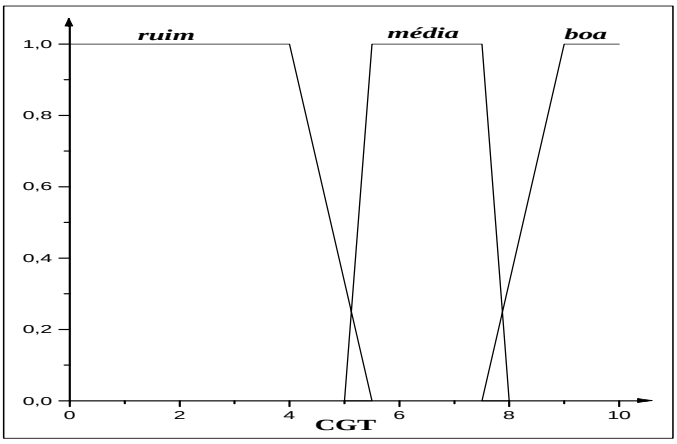


Figura 7: Funções de pertinência de $CGT$.

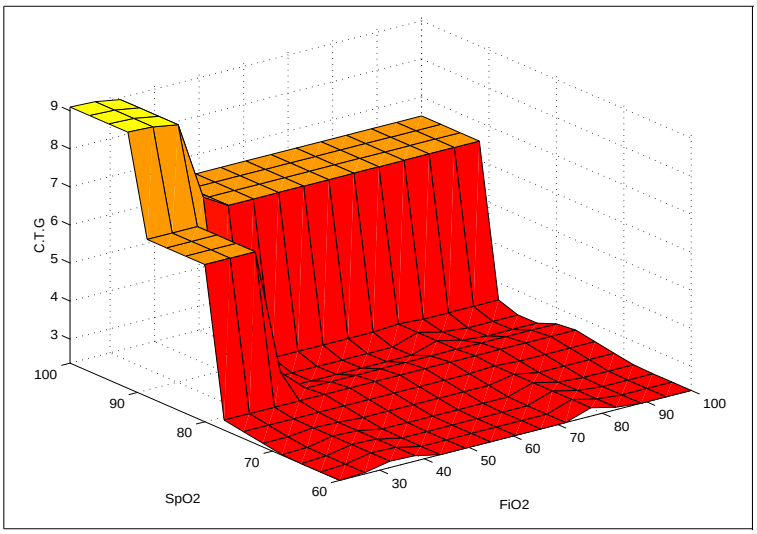


Figura 8: Valores de $CGT$ defuzzificados.

A partir dos valores da compensação das trocas gasosas, obtemos os valores para respiração mecânica, onde podemos concluir se o indivíduo pode ou não sair do aparelho.

Consideramos assim, a compensação das trocas gasosas ($CGT$) como antencedente, e a respiração mecânica ($RM$) como consequente no segundo SBRF. Os termos lingüísticos para $CTG$ permanecem os mesmos {*ruim*, *média*, *boa*}. Para $RM$, consideramos um domínio de [0, 1] pelos termos lingüísticos {*fraca*, *forte*}, com as funções de pertinência ilustradas na Figura 9. A base de regras é dada por:

- Se $CTG$ é *ruim* então $RM$ é *forte*.
- Se $CTG$ é *média* então $RM$ é *forte*.
- Se $CTG$ é *boa* então $RM$ é *fraca*.

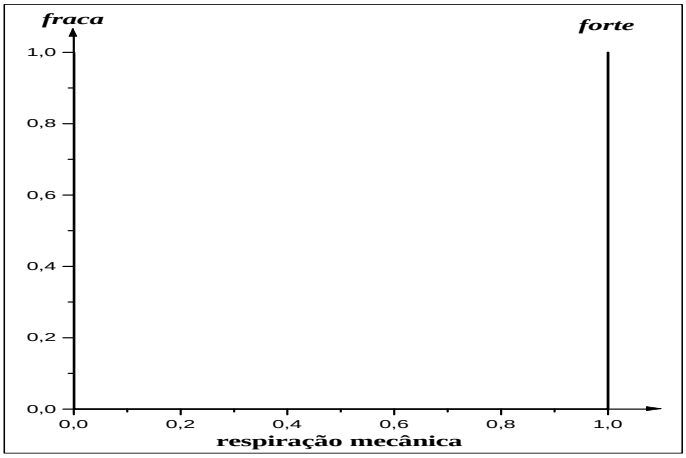


Figura 9: Funções de pertinência de $RM$.

Assim, se a $RM$ é forte o indivíduo permanece no aparelho e se a $RM$ é fraca então o indivíduo sai do aparelho e está em condições de respirar espontaneamente.

A Tabela 4 mostra os parâmetros do paciente 4, fornecidos pelo Hospital de Clínicas da Universidade Federal de Uberlândia, e as Figuras 10 e 11 mostram os valores da $CGT$ e da $RM$ em função do tempo, respectivamente. Assim, determinamos quando o paciente 4 pode ser retirado do aparelho de respiração mecânica, que está compatível com o seu quadro clínico.

| Tempo | $Fi0_2$ | $Sp0_2$ | $CGT$ | $RM$ |
|---|---|---|---|---|
| Primeiras 12 horas | 100 % | 97 % | 6.5 | 1 |
| 3 horas seguintes | 60 % | 98 % | 6.5 | 1 |
| 96 horas seguintes | 40 % | 98 % | 6.5 | 1 |
| 12 horas seguintes | 21 % | 98 % | 9.1 | 0 |

Tabela 4: Parâmetros do paciente 4.

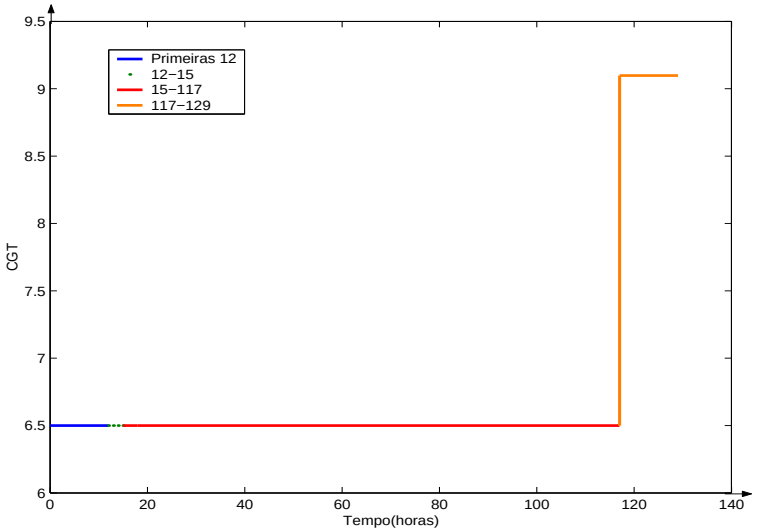


Figura 10: Comportamento da $CGT$ em função do tempo.

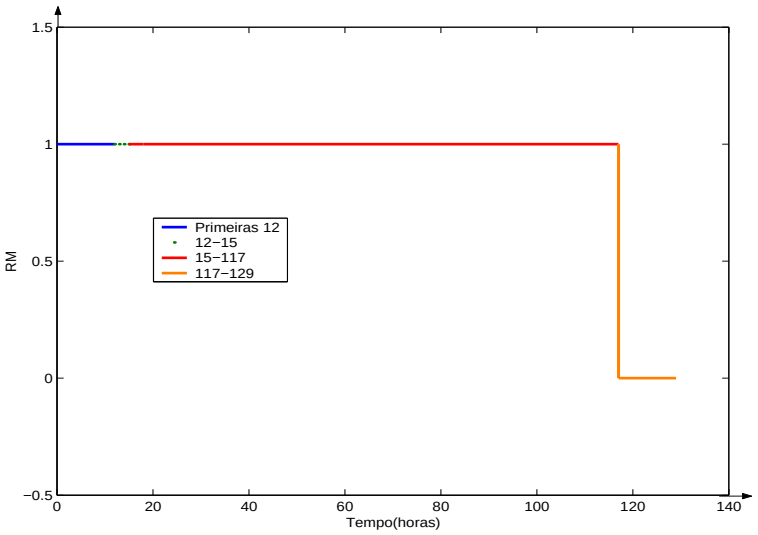


Figura 11: Comportamento da $RM$ em função do tempo.

Desta forma, podemos realizar um possível monitoramento do tratamento da pneumonia de indivíduos que estejam na UTI e necessitem de respiração mecânica, através da teoria dos conjuntos fuzzy.

# 5. Conclusões

Neste trabalho apresentamos diagnóstico médico fuzzy de doenças das vias aéreas superiores e inferiores, esta ferramenta matemática não responde qual doença o indivíduo possui, apenas fornece as possibilidades com maior ou menor grau do indivíduo estar com uma ou outra doença. Consideramos um indivíduo com uma pneumonia grave que fez uso de UTI, sendo necessário o uso de aparelho de respiração mecânica, onde relacionamos parâmetros observados do indivíduo com a teoria dos conjuntos fuzzy, sendo possível indicar quando o indivíduo pode ser retirado do aparelho de respiração mecânica, passando a respirar espontaneamente.

## Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer a Dra. Alda Valéria Toffoli Rodrigues, médica pediatra da Secretaria Municipal de Saúde de Uberlândia, e Michelle Egle Torres, enfermeira do Hospital de Clínicas da Universidade Federal de Uberlândia que colaboraram com a realização deste trabalho.

## Referências

Barros, L. e Bassanezi, R. (2001). Introdução à teoria fuzzy aplicações em biomatemática. In *Minicurso*, páginas 1–46, Campinas, Brasil. Congresso Latino Americano de Biomatemática.

Jafelice, R. (2003). *Modelagem Fuzzy para Dinâmica de Transferência de Soropositivo para HIV em Doença Plenamente Manifesta.* PhD thesis, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil.

Massad, E., Menezes, R., Silveira, P., e Ortega, N. (2004). *Métodos Quantitativos em Medicina.* Manole.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 97-118* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Um estudo de modelagens alternativas: Podridão da Maçã

Rodney Carlos Bassanezi[1],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

Geraldo Pompeu Junior[2],
Matemática, FEG – UNESP, 12500-000 - Guaratinguetá/SP.

**Resumo**. Neste trabalho é analisada a dinâmica de uma doença comum que afeta os frutos após a colheita, utilizando modelagem matemática. Neste caso específico, abordaremos o problema com modelos alternativos: modelos determinísticos contínuo e discreto, modelo geométrico discreto e modelo fuzzy.

***Palavras-chave***: *Modelagem; modelos alternativos; contaminação de maçãs.*

## 1 Introdução

A cultura da macieira (*Malus domestica*) é uma atividade econômica muito importantes em alguns estados do Brasil, sobretudo em Santa Catarina e Paraná. Perdas substanciais da produção de maçãs resultam de doenças que afetam os frutos após a colheita. As principais doenças são

[1]rodney@ime.unicamp.br
[2]gpompeu@unesp.br

do tipo podridão, causadas pelos patógenos *Botryosphaeria dothidea* (podridão branca), *Glomerella cingulata* (podridão amarga), *Penicillium expansum* (mofo azul) e *Pezicula malicorticis* (olho-de-boi) .Tais patógenos podem causar perdas muito expressivas, podendo chegar à totalidade dos frutos armazenados (Lunardi et al., 2003).

A armazenagem das maçãs é feita em câmaras frigoríficas onde são depositadas em caixas de madeira (bins) sobrepostas que comportam, aproximadamente, 3000 frutas. Quando alguma maçã está contaminada com *podridão,* a doença se propaga rapidamente contaminando as outras frutas ao seu redor - estima-se que em 12 dias, 80% das maçãs da caixa são contaminadas, comprometendo posteriormente todo o estoque (Blum et al., 2005).

O objetivo deste trabalho é analisar a dinâmica da doença utilizando modelagem matemática. Neste caso específico abordaremos o problema com modelos alternativos: modelos determinísticos contínuo e discreto, modelo geométrico discreto e modelo fuzzy.

# 2 $M_1$- Modelo Contínuo

**Dados e Hipóteses**

▷ $M = M(t)$ é a quantidade de maçãs contaminadas no instante $t$;

▷ $t =$ tempo de propagação (dias);

▷ $T =$ população total em um bin $\cong 3000$ frutas;

▷ Se $M_0 = M(0) = 1$ então $M(12) = 0,8T$

*Hipótese: "A velocidade de propagação da doença é proporcional à proximidade (encontro) entre maçãs sadias e contaminadas".*

A velocidade de propagação pode ser entendida como a variação (aumento), em relação ao tempo, da quantidade de maçãs podres.

Se usarmos um modelo contínuo para a variação populacional, devemos traduzir tal variação por derivada, isto é,

$$\frac{dM}{dt} \text{ representa a velocidade de propagação}$$

Como a população total é constante $T$ então a população de frutas sadias $S(t)$ é dada por $S(t) = T - M(t)$.O encontro entre frutas contaminadas e sadias pode ser modelado tendo-se em consideração a *lei de ação de massas, ou seja,* $E = MS = M(T - M)$.

Da hipótese formulada para a epidemia, podemos escrever o seguinte modelo:

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\beta SM \\ \frac{dM}{dt} = \beta SM \end{cases}$$

onde, $\beta$ é a taxa de contaminação, própria de cada doença.

O sistema pode ser reduzido a apenas uma equação diferencial:

$$\begin{cases} \frac{dM}{dt} = \beta M(T - M) \\ M_0 = 1 \end{cases}$$

cuja solução analítica é obtida pelo método da separação de variáveis. Assim, separando as variáveis e integrando membro a membro, obtemos:

$$\int \frac{dM}{M(T - M)} = \int \beta dt$$

A primeira integral pode ser resolvida com o método das frações parciais:

$$\begin{aligned} \int \frac{dM}{M(T - M)} &= \int \frac{\frac{1}{T}}{M} dM + \int \frac{\frac{1}{T}}{T - M} dM \\ &= \frac{1}{T} \ln M - \frac{1}{T} \ln(T - M) + k_1 \\ &= \frac{1}{T} \ln \left( \frac{M}{T - M} \right) + k_1 \end{aligned}$$

Como

$$\int \beta dt = \beta t + k_2$$

Temos

$$\frac{M}{T - M} = Ke^{\beta Tt}$$

Explicitando a variável $M$ em função de $t$, temos a solução geral

$$M(t) = \frac{KTe^{\beta Tt}}{1 + Ke^{\beta Tt}}$$

Considerando agora a condição inicial $M_0 = M(0) = 1$ , podemos obter o valor da constante arbitrária $K$ :

$$M(0) = 1 \Longrightarrow 1 + K = KT \Longrightarrow K = \frac{1}{T-1} \simeq \frac{1}{T} \simeq 0,00033$$

A solução particular pode, então ser dada por:

$$M(t) = \frac{e^{\beta Tt}}{1 + \frac{1}{T}e^{\beta Tt}} = \frac{Te^{\beta Tt}}{T + \ e^{\beta Tt}} = \frac{T}{T\ e^{-\beta Tt} + 1}$$

Considerando que $M(12) = 0,8T$, determinamos a taxa de contaminação $\beta$ :

$$\begin{aligned} 0,8T &= \frac{T}{T\ e^{-12\beta T} \ + 1} \Longrightarrow 0,8Te^{-12\beta T} \ = 0,2 \\ -12\beta T &= \ln\frac{1}{4T} \Longrightarrow \beta = -\frac{1}{12T}\ln\frac{1}{4T} \approx 0,000261 \end{aligned}$$

Portanto a equação determinística que permite fazer previsões de maçãs contaminadas em cada instante é

$$M(t) = \frac{3000}{3000\ e^{-0,783t} + 1}$$

Por outro lado, se quisermos fazer previsões do tempo necessário para cada porcentagem de frutas contaminadas, devemos ter $t$ em função de $M = pT$. Assim, substituindo este valor na equação de $M(t)$, obtemos

$$\begin{aligned} pT &= \frac{T}{T\ e^{-\beta Tt} + 1} \Longrightarrow pTe^{-\beta Tt} + p = 1 \Longrightarrow e^{-\beta Tt} = \frac{1-p}{pT} \\ &\Longrightarrow -\beta Tt = \ln\left(\frac{1-p}{pT}\right) \Longrightarrow t = -\frac{1}{\beta T}\ln\left(\frac{1-p}{pT}\right) \end{aligned}$$

Considerando o valor $\beta = -\dfrac{1}{12T}\ln\dfrac{1}{4T}$ obtemos

$$t = \frac{12}{\ln\frac{1}{4T}}\ln\left(\frac{1-p}{pT}\right) \quad \text{com} \quad 0 < p < 1$$

Por exemplo, se quisermos o tempo transcorrido para que metade das maçãs estejam contaminadas, basta tomar $p = 0,5$. Assim, em um bin de 3000 maçãs teremos metade contaminada quando $t = \frac{12}{\ln \frac{1}{4T}} \ln\left(\frac{1}{T}\right) = (-1,277) \times (-8,006) = 10,224\ dias$.

Para saber quando toda caixa de maçã estará estragada dever-se-ia tomar a equação do tempo com o valor $p = 1$ o que não é possível uma vez que tal equação não está definida para este ponto. O que podemos fazer é tomar um valor de $p$ bastante aproximado de 1, por exemplo $p = 0,99$ e obter

$$t = (-1,277) \ln \frac{0,01}{0,99T} \approx 16,092\ dias$$

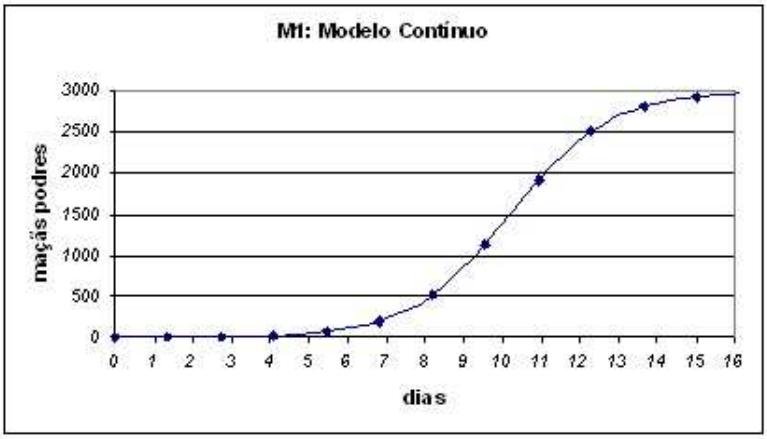


Figura 1: Propagação da podridão em um bin de maçãs

*Crítica: Na equação contínua de propagação consideramos que a "proximidade" ou encontro entre as frutas sadias e doentes é modelado como sendo proporcional ao produto delas (E=SM). Isto é uma aproximação um tanto grosseira da realidade, uma vez que cada fruta pode encostar em um número reduzido de outras frutas. Neste caso, um modelo discreto poderia ser mais interessante e realístico!*

# 3 Modelo discreto $D_1$ - Equação de diferenças

A vantagem da modelagem é que podemos, para um mesmo fenômeno, considerar modelos diversos e depois optar por aquele que parece mais coerente. Vamos considerar agora um modelo discreto supondo a mesma lei de formação usada no modelo contínuo.

$$\begin{cases} P_{n+1} = kP_n(T - P_{n)} + P_n \\ P_0 = 1 \end{cases}$$

onde, $P_n$ é o total de frutas infectadas e $T$ é o total de frutas no bin.

Neste caso é essencial determinarmos o coeficiente de contaminação $k$ da fórmula de recorrência que deve ser distinto do valor $\beta$ do modelo contínuo.

Para o cálculo de tais coeficientes necessitamos entender melhor o processo de contaminação de maçãs acondicionadas em caixas, isto é, devemos estar atentos à disposição ou geometria das maçãs contaminadas em cada passo da interação dada pela fórmula de recorrência.

# 4 Enfoque geométrico na contaminação

Para formular um modelo de propagação discreto devemos pensar na unidade de tempo como sendo cada interação efetuada. Também um bin será considerado uma caixa cúbica cuja unidade de medida é $\mu = 1 maçã$. Assim, como uma caixa contém, aproximadamente, 3000 maçãs então seus lados valem $\sqrt[3]{3000}\mu \simeq 14,5\mu$.Podemos pensar que as maçãs estejam distribuidas em 14 ou 15 camadas planas dentro da caixa. Inicialmente consideraremos um modelo de propagação em uma camada central, ou seja, no plano e tomamos a maçã contaminada colocada no centro desta camada (Fig. 2).

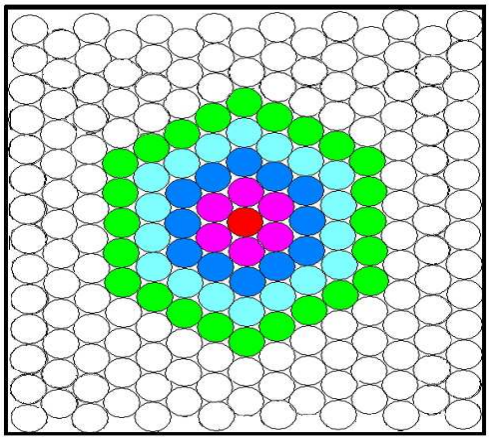

Figura 2: Propagação no plano (camada central)

## 4.1 Modelo da camada central

Estamos imaginando cada maçã como sendo esférica e, portanto, se começarmos com uma maçã podre, em torno dela terá exatamente 6 frutas sadias (considerando que os espaços sejam preenchidos de maneira otimizada). Este fato se dá porque um círculo pode ser tangenciado por, no máximo, 6 círculos iguais a ele, uma vez que os centros de tais círculos formam um hexágono de lado igual ao diâmetro do círculo (Fig. 3a).

Observamos que o número mínimo de círculos iguais que se tangenciam é 4. De fato, na Fig. 3b o segmento $\overline{BC}$ é tal que $\overline{BC}^2 = \overline{BA}^2 + \overline{AC}^2 = 2\overline{AB}^2 \Longrightarrow \overline{BC} = \sqrt{2}\ \overline{AB}$.Por outro lado, $\overline{BC} = \overline{AB} + K$, logo $\overline{AB} + K = \sqrt{2}\ \overline{AB}$. Segue que $K = (\sqrt{2} - 1)\overline{AB} < \overline{AB}$ , onde $\overline{AB}$ é o diâmetro do círculo. Isto implica que , entre os círculos de centros $C$ e $B$ não cabe outro círculo de mesmo diâmetro $\overline{AB}$.

Assim, a propagação da doença, no plano, obedece à formação de hexágonos encaixantes (Fig. 2), isto é, em cada estágio (interação) o número de maçãs que apodrecem é sempre múltiplo de 6 (no caso de tangenciamento máximo). No caso de tangenciamento mínimo o número será múltiplo de 4.

Seja $M_0$ =1 a quantidade inicial de maçã podre e colocada no centro da

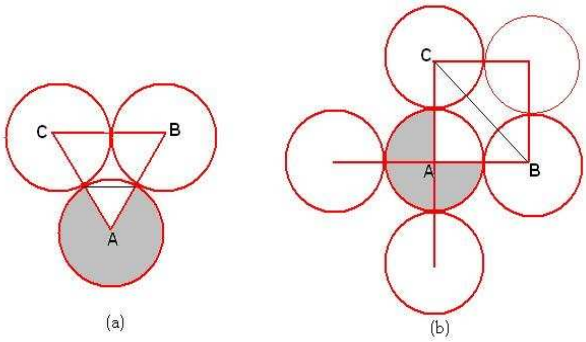


Figura 3: (a) tangenciamento máximo – (b) tangenciamento mínimo

região plana então, as quantidades de novas maçãs podres em cada estágio são: $M_1 = 6$; $M_2 = 12$; $M_3 = 18; ...;$ $M_n = 6n$. No caso específico do nosso problema temos $1 \leq n \leq 7$ pois com 7 interações as primeiras maçãs podres atingem a parede da caixa que tem lado igual a $14\mu$. Depois da $7^a$ interação a taxa de propagação da doença é modificada pois as podres são barradas pelas paredes da caixa.

Podemos agora calcular a soma de maçãs contaminadas para $n \leq 7$ :

Seja $A_n$ o total de frutas contaminadas até o estágio $n$, então temos para $1 \leq n \leq 7$:

$$\begin{cases} A_0 = M_0 = 1 \\ A_1 = 1 + 6 = A_0 + 6 \times 1 \\ A_2 = 7 + 12 = A_1 + 6 \times 2 = A_0 + 6 \times 1 + 6 \times 2 \\ ---------- \\ A_n = A_{n-1} + M_n = A_0 + 6 \times 1 + 6 \times 2 + ... + 6n \\ = A_0 + 6(1 + 2 + 3 + \cdots + n) \end{cases}$$

$$\Longrightarrow A_n = A_{n-1} + 6n = A_0 + 3n(n+1)$$

ou seja,

$$A_n = 1 + 3n(n+1) \; para 1 \leq n \leq 7$$

Este é um modelo de previsão de transmissão da doença quando as maçãs estão situadas no plano. No caso das frutas estarem limitadas num quadrado de lado $14\mu$ este modelo vale para $1 \leq n \leq 7$.

## 4.2 Modelo das camadas adjacentes

Se tivermos uma camada de maçãs distribuidas conforme a Fig.2 então uma camada sobreposta e uma inferior deverão ter as frutas encaixadas nos espaços compreendidos entre cada 3 maçãs da camada inicial (Fig. 4):

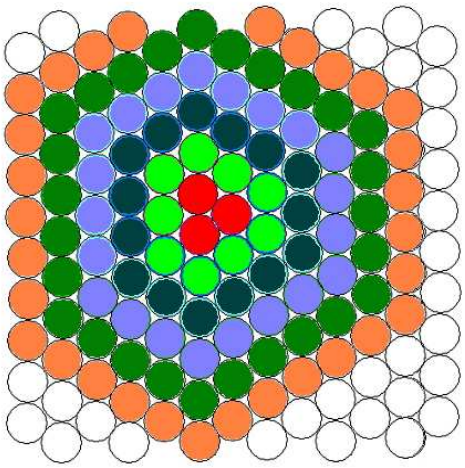

Figura 4: Camada sobreposta ou camada ímpar

Esta camada começa a se formar no estágio 1 pois temos 3 maçãs que estão em contato com a maçã podre inicial da camada central.

A sequência de frutas podres nesta camada sobreposta é: $P_1 = 3; P_2 = 9; P_3 = 15; P_4 = 21; ....$ A fórmula de recorrência de tal sequência é dada por:

$$\begin{cases} P_n = P_{n-1} + 6 \\ P_1 = 3 \end{cases} \quad \text{para } 2 \leq n \leq 7$$

cuja solução é dada por

$$P_n = 3(2n - 1) \quad \text{para } 1 \leq n \leq 7$$

A camada a baixo da camada central tem a mesma disposição de frutas que a camada sobreposta. Se considerarmos a totalidade de maçãs podres em cada estágio, em cada uma destas camadas, devemos ter:

$$Q_n = \sum_{j=1}^{n} P_j = \sum_{j=1}^{n} 3(2n-1) = 3n^2$$

# 5 Modelo Parcial Espacial Discreto

Como condição inicial supomos que exista uma fruta podre situada no centro de uma caixa.Vamos considerar as frutas dispostas neste bin como se estivessem em camadas sobrepostas e cujas configuções são dadas pelas formações das camadas estudadas anteriormente (Fig. 2 e Fig. 4). Devemos procurar uma fórmula que dê a soma das frutas podres para um estágio $n$ tal que $0 \leq n \leq 7$.

Seja $S_n$a soma de todas as frutas podres para um estágio $n$.Devemos pensar que em cada estágio $n$ apodrecem frutas que estão situadas em camadas adjacentes àquelas onde já existem frutas podres

| **n** | | $\mathbf{S}_n$ |
|---|---|---|
| 0 | $S_0$ | $M_0$ |
| 1 | $S_1$ | $S_0 + 2P_1 + M_1$ |
| 2 | $S_2$ | $S_1 + 2A_1 + 2P_2 + M_2$ |
| 3 | $S_3$ | $S_2 + 2Q_2 + 2M_2 + 2P_3 + M_3$ |
| 4 | $S_4$ | $S_3 + 2A_2 + 2P_3 + 2M_3 + 2P_4 + M_4$ |
| 5 | $S_5$ | $S_4 + 2Q_3 + 2M_3 + 2P_4 + 2M_4 + 2P_5 + M_5$ |
| 6 | $S_6$ | exercício |

$\Longrightarrow$

| | | |
|---|---|---|
| $S_0$ | = | $A_0$ |
| $S_1$ | = | $A_1 + 2Q_1$ |
| $S_2$ | = | $A_2 + 2Q_2 + 2A_1$ |
| $S_3$ | = | $A_3 + 2Q_3 + 2A_2 + 2Q_2$ |
| $S_4$ | = | $A_4 + 2Q_4 + 2A_3 + 2Q_3 + 2A_2$ |
| $S_5$ | = | $A_5 + 2Q_5 + 2A_4 + 2Q_4 + 2A_3 + 2Q_3$ |
| $S_6$ | = | exercício |

A soma das frutas contaminadas $S_n$,em cada estágio $n$, depende da estrutura da camada sobreposta à última camada que contém fruta podre. A dinâmica de propagação se repete a cada 2 estágios e por este motivo vamos considerar separadamente os estágios pares e ímpares:

$$\begin{aligned} S_{2n+1} &= A_{2n+1} + 2\sum_{j=n+1}^{2n} A_j + 2\sum_{j=n+1}^{2n+1} Q_j \\ S_{2n} &= A_{2n} + 2\sum_{j=n}^{2n-1} A_j + 2\sum_{j=n+1}^{2n} Q_j \end{aligned}$$

Usando este modelo podemos calcular quantas maçãs apodreceram em cada estágio:

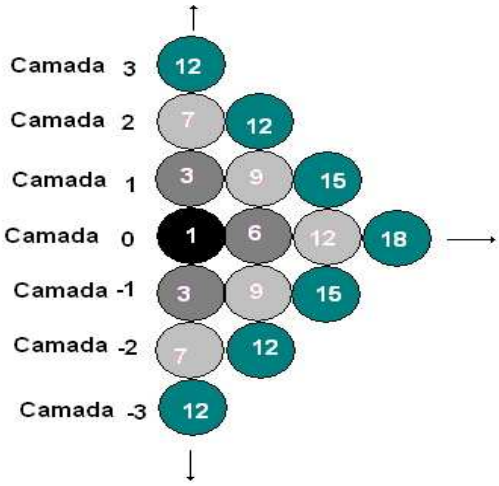


Figura 5: Propagação por camada

Observamos que esta dinâmica vale para até 7 estágios quando as primeiras frutas contaminadas atingem as paredes da caixa. Assim, teremos um total de $S_7$ frutas podres no $7^0$*estágio*

$$S_7 = A_7 + 2(A_6 + A_5 + A_4) + 2(Q_7 + Q_6 + Q_5 + Q_4)$$

Considerando que

$$\begin{aligned} A_n &= 1 + 3n(n+1) \\ Q_n &= 3n^2 \Longrightarrow Q_{n+1} = A_n + 3n + 2 \end{aligned}$$

$\Longrightarrow S_7 = 1483.$

**Observação**: Se tivermos uma esfera inscrita em um cubo, isto é, tangenciando todas as paredes do cubo então, a relação entre seus volumes é dada por:

Volume da esfera $V_e = \frac{4}{3}\pi r^3$;

Volume do cubo $V_c = (2r)^3 = 8r^3 \quad \Longrightarrow \quad \frac{V_e}{V_c} = \frac{\pi}{6} \approx 0,5236.$

Como veremos na próxima seção, considerando 7 estágios para as frutas contaminadas atingirem as paredes ( pressupõe-se que se tenha 2996 na caixa). Agora, pensando na propagação de maçãs podres como uma "esfera que se expande" com centro fixo, deveríamos ter para $S_7$ um valor da ordem de $0{,}5236 \times 2996 = 1568$, que não difere muito do valor encontrado pelo modelo.

**Dinâmica da propagação nos "cantos" da caixa**

Se a propagação fosse contínua este problema poderia ser resolvido geometricamente e teríamos várias situações interessantes para modelagem. Quando o primeiro círculo de expansão atinge as paredes o seu raio é $7\mu$. O círculo de raio $8\mu$ deve ser considerado somente uma parte, a que está interna às paredes da caixa (Fig. 6);

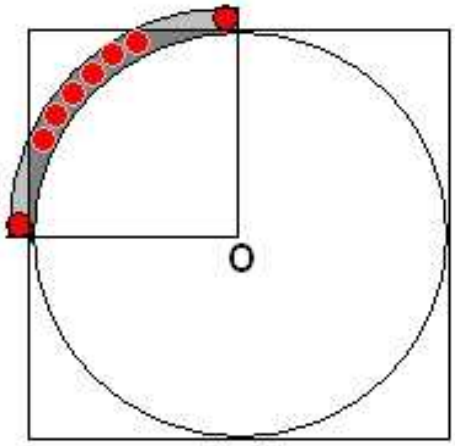


Figura 6: Expansão dos círculos de maçãs em cada camada

Uma tentativa de resolver este problema é simplesmente contar em cada estágio $n \geq 8$ quantas maçãs são contaminadas, usando as figuras iniciais (Fig. 2 e Fig. 4). A seguinte matriz mostra estes valores

Tabela 1: Modelo geométrico

| | $\mathbf{E}_0$ | $\mathbf{E}_1$ | $\mathbf{E}_2$ | $\mathbf{E}_3$ | $\mathbf{E}_4$ | $\mathbf{E}_5$ | $\mathbf{E}_6$ | $\mathbf{E}_7$ | $\mathbf{E}_8$ | $\mathbf{E}_9$ | $\mathbf{E}_{10}$ | $\mathbf{E}_{11}$ | $\mathbf{E}_{12}$ | $\mathbf{E}_{13}$ | **Total** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\mathbf{C}_7$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 48 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_6$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 37 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 204 |
| $\mathbf{C}_5$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 27 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_4$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 19 | 18 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 0 | 204 |
| $\mathbf{C}_3$ | 0 | 0 | 0 | 12 | 15 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_2$ | 0 | 0 | 7 | 12 | 18 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 0 | 0 | 204 |
| $\mathbf{C}_1$ | 0 | 3 | 9 | 15 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_0$ | 1 | 6 | 12 | 18 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 0 | 0 | 0 | 204 |
| $\mathbf{C}_{-1}$ | 0 | 3 | 9 | 15 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_{-2}$ | 0 | 0 | 7 | 12 | 18 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 0 | 0 | 204 |
| $\mathbf{C}_{-3}$ | 0 | 0 | 0 | 12 | 15 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_{-4}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 19 | 18 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 0 | 204 |
| $\mathbf{C}_{-5}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 27 | 21 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 0 | 196 |
| $\mathbf{C}_{-6}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 37 | 24 | 30 | 36 | 42 | 20 | 12 | 3 | 204 |
| $\mathbf{C}_{-7}$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 48 | 27 | 33 | 39 | 45 | 4 | 0 | 196 |
| **Total** | 1 | 12 | 44 | 96 | 170 | 264 | 380 | 516 | 524 | 450 | 327 | 168 | 38 | 6 | **2996** |

Nas linhas são as Camadas $\mathrm{C}_j$ e nas colunas as incidências nos estágios $\mathrm{E}_n$, isto é, o número de novas frutas contaminadas em cada estágio..

OBS. Consideramos na matriz 15 linhas ou camadas simplesmente para ter uma matriz simétrica, daí a soma ter dado 2996$\approx$ 3000 maçãs no total.

A quantidade total de maçãs podres em cada estágio, obtida com cálculos parciais anteriores, será denominado **modelo discreto-geométrico $\mathbf{D_2}$** e aqui dado pelos valores:

$$\begin{aligned} S_n &= \textstyle\sum_{j=0}^{n} E_j \\ &= \{1, 13, 57, 153, 323, 587, 967, 1483, 2007, 2457, 2784, 2952, 2990, 2996\} \end{aligned}$$

A Figura 7 a seguir, mostra a propagação da doença em relação ao estágio e a Figura 8 é o gráfico do total de frutas podres.

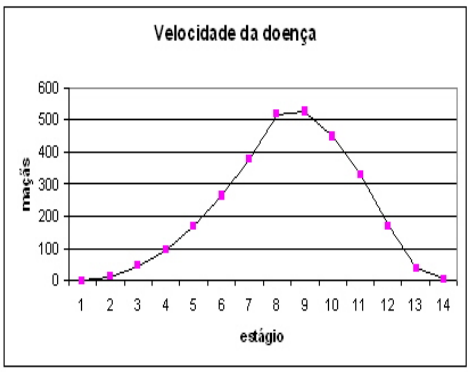


Figura 7: Evolução da doença por estágio (casos novos)

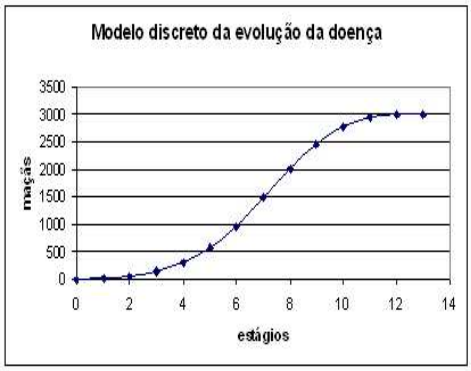


Figura 8: Modelo geométrico da propagação

A transformação de estágio em tempo é obtida considerando o dado: "em 12 dias 80% das frutas estão podres". Assim, 80% de 1996 é 2397 maçãs e este valor é atingido entre os estágios 8 e 9 com $S_8 = 2007$ e $S_9 = 2457$. Neste caso, cada estágio corresponde a 1,364 dias e $n = 8,8$ equivale a 12 dias.

## 5.1 Cálculo dos coeficientes de contaminação dos modelos contínuo e discreto

Tomando os valores da Tabela 1, podemos determinar o valor da taxa de infecciosidade $k$ do modelo discreto $D_1$, considerando a média dos valores encontrados:

$$k_n = \frac{S_{n+1} - S_n}{S_n(T - S_{n)}}$$

e obtemos $k = 0,0006586\% = 6,586 \times 10^{-6}$.

Podemos também melhorar a performace do modelo contínuo $M_1$ inicial $M(t) = \frac{KT}{K+e^{-\beta Tt}}$, desde que consideremos, por exemplo, como condição inicial M(8)=970 em lugar de M(0)=1.Assim teremos:

$$970 = \frac{KT}{K + e^{-8\beta T}} \Rightarrow K = \frac{970e^{-8\beta T}}{T - 970}$$

Por outro lado, sabemos que $M(12) = 0,8T \Longrightarrow$

$$0,8T = \frac{KT}{K + e^{-12\beta T}} \Rightarrow K = 4e^{e^{-12\beta T}}$$

Das duas equações tiramos que

$$(T - 970) \times 4e^{e^{-12\beta T}} = 970e^{-8\beta T} \Longrightarrow e^{4\beta T} = 8,371 \Longrightarrow \beta T = 0,5312$$

Para o valor de $K$ temos:

$$K = 4e^{-12\times 0,5312} = 0,006819$$

Temos que a solução geral do modelo contínuo $M_2$ é

$$M(t) = \frac{20,456}{0,006819 + e^{-0,5312t}}$$

Tabela 2: Comparação entre os modelos determinísticos alternativos

| Estágio | tempo: dias | $M_1$: Contínuo | Geométrico | Discreto $D_1$ | $M_2$ Contínuo |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 1,00 | 1 | 1,02 | 20,32 |
| 1 | 1,364 | 2,91 | 13 | 13,25 | 41,68 |
| 2 | 2,728 | 8,44 | 57 | 58,10 | 84,87 |
| 3 | 4,092 | 24,43 | 153 | 155,86 | 170,24 |
| 4 | 5,456 | 70,00 | 323 | 328,67 | 331,70 |
| 5 | 6,82 | 194,97 | 587 | 596,29 | 613,12 |
| 6 | 8,184 | 504,66 | 967 | 979,89 | 1.040,21 |
| 7 | 9,548 | 1.111,35 | 1483 | 1.497,74 | 1.569,21 |
| 8 | 10,912 | 1.893,85 | 2007 | 2.020,04 | 2081,48 |
| 9 | 12,276 | 2.498,46 | 2457 | 2.465,70 | 2.472,02 |
| 10 | 13,64 | 2.806,38 | 2784 | 2.787,88 | 2.718,90 |
| 11 | 15,004 | 2.930,51 | 2952 | 2.952,85 | 2.856,98 |
| 12 | 16,368 | 2.975,75 | 2990 | 2.990,12 | 2.928,97 |
| 13 | 17,732 | 2.991,62 | 2996 | 2.996,00 | 2.965,13 |

A comparação visual entre os quatro modelos pode ser vista na seguinte figura (Fig. 9)

Podemos observar que o único modelo que difere mais dos outros é o primeiro modelo contínuo $M_1$.

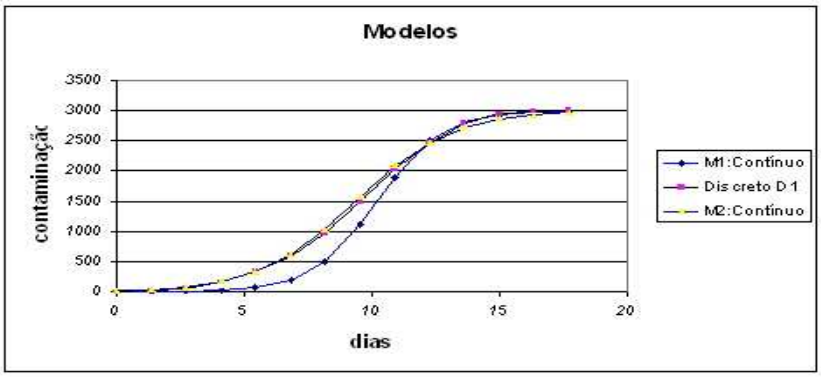


Figura 9: Comparação entre os 4 modelos

# 6 Modelo Fuzzy

Como pode-se notar a escolha do modelo matemático é determinante para se ter uma previsão de algum fato. Modelos determinísticos de um mesmo fenômeno podem prever resultados diferentes. Isto acontece invariavelmente porque nem sempre é possível dispor de todas as variáveis que atuam no fenômeno. Neste sentido, por mais **exata** que seja a matemática, por mais **determinísticos** que sejam os modelos, sempre teremos soluções **aproximadas** de alguma realidade. Assim, o uso de uma matemática menos determinística e mais grosseira pode ser muitas vezes tão eficaz para previsões quanto às obtidas pelos processos clássicos.

Vamos agora examinar o problema da transmissão de *podridão* em maçãs com o auxílio dos **conjuntos fuzzy** e de uma base de regras fornecida por especialistas (vamos considerar os dados do modelo $M_2$ como auxiliares para a montagem da base de regras). Com este processo, podemos fazer inferências sobre o estado de evolução da doença sem a ajuda de equações matemáticas.

Um conjunto fuzzy é aquele que valoriza seus elementos, isto é, se $x \in A$, devemos conhecer também com que **grau de pertinência** $x$ está em $A$. Desta forma, um conjunto fuzzy $A$ é dado pela sua função de pertinência

$\varphi_A$. Por exemplo, se a quantidade de maçãs podres em uma caixa de 3000 frutas é inferior a 10, dizemos que a "População de Contaminadas é Muito Baixa" e denotamos por $P_{bi}$. Para o conjunto $P_{bi}$ podemos definir a função de pertinência de seus elementos por

$$\varphi_{P_{bi}}(x) = \frac{600 - x}{600} \quad \text{se} \quad 0 \leq x < 600 \quad \text{e } \varphi_{P_{bi}} = 0 \text{ caso contrário}$$

Definir funções de pertinência na forma triangular é muito comum nas aplicações da teoria fuzzy.

## 6.1 Conjuntos fuzzy para níveis de maçãs contaminadas

- População de Contaminadas, **muito baixa** : $P_{bi}$, com $\varphi_{P_{bi}} = \frac{600-x}{600}$ se $0 \leq x < 600$ e $\varphi_{P_{bi}} = 0$ caso contrário;
- População de Contaminadas, **baixa**: $P_b$, com $\varphi_{P_b} = \frac{x-300}{450}$ se $300 \leq x < 750$ ; $\varphi_{P_b} = \frac{1200-x}{450}$ se $750 \leq x < 1200$ e $\varphi_{P_b} = 0$ caso contrário;
- População de Contaminadas, **média**: $P_m$, com $\varphi_{P_m} = \frac{x-900}{450}$ se $900 \leq x < 1350$; $\varphi_{P_m} = \frac{1800-x}{450}$ se $1350 \leq x < 1800$ e $\varphi_{P_m} = 0$ caso contrário;
- População de Contaminadas, **média alta**: $P_{ma}$, com $\varphi_{P_{ma}} = \frac{x-1500}{500}$ se $1500 \leq x < 2000$; $\varphi_{P_{ma}} = \frac{2400-x}{400}$ se $2000 \leq x < 2400$ e $\varphi_{P_{ma}} = 0$ caso contrário;
- População de Contaminadas, **alta**: $P_a$, com $\varphi_{P_a} = \frac{x-2200}{300}$ se $2200 \leq x < 2500$; $\varphi_{P_a} = \frac{2800-x}{300}$ se $2500 \leq x < 2800$ e $\varphi_{P_a} = 0$ caso contrário
- População de Contaminadas, **muito alta**: $P_{at}$, com $\varphi_{P_{at}} = \frac{x-2800}{200}$ se $2800 \leq x < 3000$; $P_{at} = 1$ se $p \geq 3000$ e $P_{at} = 0$ se $x < 2800$.

As funções de pertinência dos subconjuntos fuzzy, usados para modelar a contaminação e aqui estabelecidas como funções triangulares, podem ser visualizados na figura 10

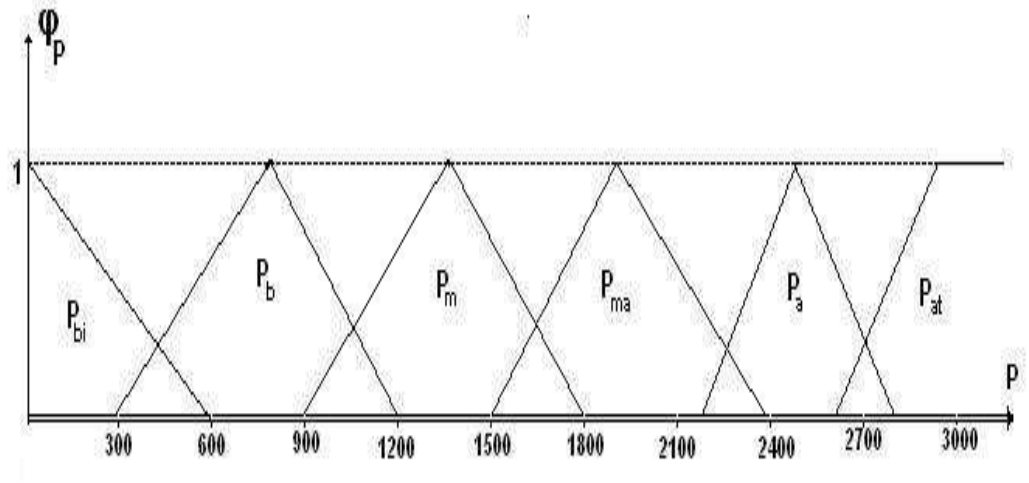


Figura 10: Funções de pertinência da contaminação de maçãs

Observamos que para cada valor de $x$ , a função de pertinência da densidade de infestação $\varphi_P$ pode pode ser dada por até dois valores. Senão vejamos, seja $x$ um valor dado no intervalo $[900, 1200)$ . O processo de fuzzificação de $x$ nos leva aos valores de $\varphi_P$:

Se $900 \leq x < 1050$ então $\varphi_P(x)$ pode ser dada por $\varphi_{P_b}(x) = \frac{1200-x}{450}$ e por $\varphi_{P_m} = \frac{x-900}{450}$.
Denotamos $\varphi_P(x)$ por $\left[\frac{1200-x}{450}\text{baixa} + \frac{x-900}{450}\textit{média}\right] = \frac{1200-x}{450}/P_b + \frac{x-900}{450}/P_m$. Observamos que nesta notação, usada para conjuntos fuzzy discretos, o sinal $+$ significa apenas que $x$ tem graus de pertinência em dois conjuntos distintos, sendo $\frac{1200-x}{450}$ ao conjunto *"população de contaminadas,* **baixa**" e grau $\frac{x-900}{450}$ ao conjunto *"população de contaminadas,* ***média****"*.

Por exemplo, se $x = 1000$, então $\varphi_{P_b}(1000) = \frac{200}{450} = 0,444$, isto é, 1000 maçãs podres tem grau de pertinência $0,444$ no subconjunto fuzzy *contaminação baixa* $P_b$. Também, $\varphi_{Pm}(1000) = \frac{100}{450} = 0,222$ é o grau de pertinência

de 1000 ao subconjunto fuzzy *contaminação média* $P_m$. De maneira análoga obtemos $\varphi_P(x)$ para outros valores de $x$.

## 6.2 Variação da população contaminada ou incidência da doença

Os subconjuntos fuzzy, modelados por funções de pertinência de *incidência da doença*, podem ser visualizados na figura 11

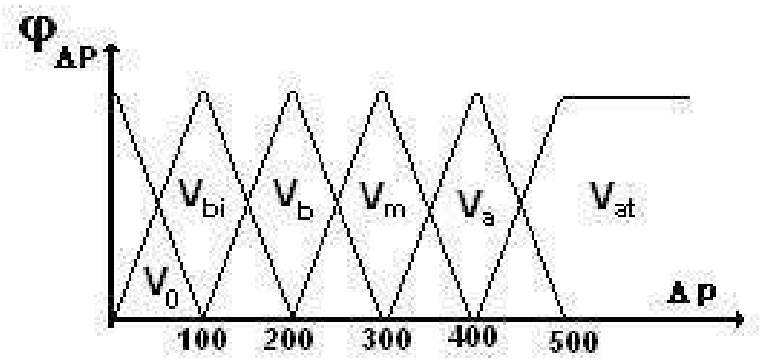


Figura 11: Funções grau de pertinência da variação de P

Denotamos por:

$V_0$ : incidência baixíssima;

$V_{bi}$ : incidência muito baixa;

$V_b$ : incidência baixa;

$V_m$ : incidência média;

$V_a$ :incidência alta;

$V_{at}$ :incidência muito alta.

As funções graus de pertinência das *incidências de doenças* $\Delta P$ são dadas por:

Se $0 \leq \Delta p < 100$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = \frac{100-\Delta p}{100}/V_0 + \frac{\Delta p}{100}/V_{bi}$;

Se $100 \leq \Delta p < 200$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = \frac{200-\Delta p}{100}/V_{bi} + \frac{\Delta p-100}{100}/V_b$;

Se $200 \leq \Delta p < 300$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = \frac{300-\Delta p}{100}/V_b + \frac{\Delta p-200}{100}/V_m$;

Se $300 \leq \Delta p < 400$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = \frac{400-\Delta p}{100}/V_m + \frac{\Delta p-300}{100}/V_a$;
Se $400 \leq \Delta p < 500$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = \frac{500-\Delta p}{100}/V_a + \frac{\Delta p-400}{100}/V_{at}$;
Se $500 \leq \Delta p$ então $\varphi_{\Delta P}(\Delta p) = 1/V_{at}$;

A base de regras fornece o entendimento do fenômeno e é da forma **"SE .... ENTÃO ... "** Para o fenômeno analisado parece coerente a seguinte base de regras:

Tabela 3: Base de regras

| | | | |
|---|---|---|---|
| Se | $P_{bi}$ | Então | $V_{bi}$ |
| Se | $P_b$ | Então | $V_m$ |
| Se | $P_m$ | Então | $V_a$ |
| Se | $P_{ma}$ | Então | $V_{at}$ |
| Se | $P_a$ | Então | $V_a$ |
| Se | $P_{at}$ | Então | $V_{bi}$ |

O método de inferência que vamos adotar aqui é o de Mandani que dá como saída um conjunto fuzzy da forma

$$M(x,u) = \bigvee_{1 \leq j \leq n} \{A_j(x) \wedge B_j(u)\}$$

No nosso caso específico este conjunto é bem simples de ser obtido.

No exemplo anterior tomamos $x = 1000$ maçãs podres que corresponde ao conjunto fuzzy $\varphi_P(1000) = 0,444/P_b + 0,222/P_m$. Pela inferência da Tabela 3, teremos como saída o conjunto fuzzy $\Delta_P$ cuja função de pertinência é $\varphi_{\Delta_P}(u) = 0,444/V_m + 0,222V_a$. O que devemos fazer agora é defuzzificar este conjunto de incidência de doença, isto é, tomar alguma medida deste conjunto. Isto pode ser feito, por exemplo, considerando

$$\begin{aligned} \Delta_P(u) &= \frac{[\varphi_{P_b}(x) \times \max \varphi_{V_m}] + [\varphi_{Pm}(x) \times \max \varphi_{Va}]}{\varphi_{P_b}(x) + \varphi_{Pm}(x)} \\ &= \frac{0,444 \times 300 + 0,222 \times 400}{0,444 + 0,222} = 222 \end{aligned}$$

Então, pelas regras, quando tivermos 1000 frutas podres, teremos no próximo estágio 1222 frutas podres. O modelo dinâmico proposto para previsão da doença é

$$\begin{cases} S_{n+1} = S_n + \Delta_n \\ S_0 = 1 \end{cases}$$

O processo iterativo pode ser feito à mão ou usando o Toolbox do Matlab e o resultado final de previsão ou solução pode ser visualizado na Fig.12

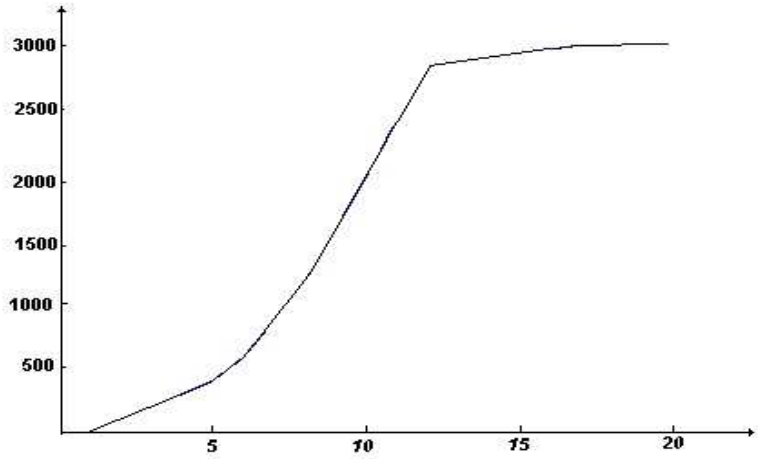


Figura 12: Solução do modelo fuzzy

O mais interessante neste fenômeno estudado é que não se tem condições de saber qual modelo é o melhor. Seria necessário ter dados experimentais da propagação da doença para decidir esta questão. A modelagem nem sempre pressupõe que se tenha dados reais, a intuição ou bom senso pode guiar as formulações dos modelos. Do ponto de vista do ensino-aprendizagem de Matemática o "melhor modelo" é secundário pois sempre se pode fazer um melhor do que o anterior e sempre se pode imaginar situações diferentes para o mesmo fenômeno.

# Referências

Blum, L., Amarante, C., Locatelli, P., Dezanet, A., Hack Neto, P., Marcon, M., Siega, V., e aes, L. G. (2005). Levedura aplicada em pós-colheita reduz podridões em maçãs. http://www.ufpel.tche.br.

Lunardi, R., Sanhuesza, R., e Bender, R. (2003). Imersão em Água no controle pós-colheita da podridão branca em maçãs cv. fuji. *Fitopatol. bras.*, 28(4).

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 119-136* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Descarga de Água de Produção em Operações *offshore*: Modelagem Matemática, Aproximação Numérica e Simulação Computacional

Julio C. Vásquez[1],
MAF, UCG, 15054-000, Goiania/GO.

João F. C. A. Meyer[2],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

**Resumo**. Neste trabalho, é analisado o comportamento transiente da dispersão de água produzida decorrente da atividade *offshore*, através de simulação numérica. O processo de dispersão é modelado através de um sistema de E.D.P. que reúne as equações clássicas de Stokes e de Difusão-advecção/reação em 3D, sendo que as velocidades obtidas na resolução numérica da I equação são usadas como parâmetro na equação de Difusão. Uma vez verificada existência e unicidade da solução da formulação variacional, são aplicados os métodos SUPG(de ordem 2) e Crank-Nicolson, para achar uma solução aproximada do problema original. Adicionalmente, estabelecemos algumas estimativas do erro induzido pelo método de Galerkin tanto no caso contínuo como no discreto no tempo.

***Palavras-chave***: *Equação de difusão-advecção/reação; formulação variacional; equação de Stokes; elementos finitos; SUPG.*

[1]vasquez@ucg.br
[2]joni@ime.unicamp.br

# 1 Água de Produção: O Problema, Um Modelo

A poluição crônica das operações rotineiras dos navios representa muito mais perigo ao meio ambiente que a poluição aguda dos acidentes. Estudos realizados em 1990 mostram que entre 15 e 30% de todo o óleo despejado no Mar do Norte (19.080 toneladas) foi conseqüência de operações *off-shore*. Apesar das atividades *off-shore* ocorrerem longe da costa, a poluição decorrente gera alterações da qualidade ambiental. Principalmente o sufocamento do assoalho oceânico com alterações das comunidades bentônicas.

Traços de vários metais pesados, tais como Hg, Cd, Pb, Ni e Ag fazem parte deste efluente Oliveira e Oliveira (2000). Compostos orgânicos tais como os alifáticos, aromáticos, polares e ácidos graxos estão naturalmente presentes nas águas produzidas. Adicionalmente uma grande variedade de produtos químicos é adicionada para resolver ou prevenir problemas operacionais, embora estes últimos sejam necessários na fase inicial da produção, tornam-se complicações no processo de tratamento da água de produção.

## 1.1 Métodos de Tratamento da Água de Produção

Após o processo de separação gravitacional, a água produzida ainda possui um elevado teor de hidrocarbonetos que devem ser removidos antes do seu despejo no mar. Para tal, aplicam-se métodos diferenciados para remover compostos dispersos e compostos dissolvidos. A eficiência dessas tecnologias depende dos volumes envolvidos, constituição da água, e do espaço físico no caso de instalações *off-shore*, inevitavelmente limitados pelo custo operacional. Uma forma de avaliar a eficiência dos tratamentos da água óleosa é por meio da análise de amostras coletadas diariamente ao longo da planta de tratamento. Porém este procedimento tende a causar grandes alterações nas medidas do TOG e outros parâmetros que caracterizam a qualidade da água de produção Pereira e Travalloni (2000).

## 1.2 Impacto Ambiental

O impacto ambiental devido à água de produção é geralmente avaliado pela toxicidade dos constituintes e pela quantidade de compostos orgânicos e inorgânicos presentes nesta. De acordo com a PARCOM (Paris Commission on Operational Pollution) o Hg, Cd e seus compostos são as substâncias* de toxicidade mais elevada. O despejo da água produzida no Brasil é regulado pelo IBAMA/CONAMA, a qual estabelece que o limite no caso de óleo e graxas é de 20(mg/L). Apesar das restrições relativas ao TOG, o efeito nocivo dos outros contaminantes não pode ser negligenciado.

## 1.3 O Modelo a ser Analisado

Logo que a água de produção é despejada no mar, as diferentes substâncias presentes nela experimentam processos de dispersão e, com alguma exceção de biodegradação, processos que, de acordo com as características desta atividade, acontecem devido ao fluxo, tanto pela difusão efetiva Marchuk (1986) como por advecção (decorrente da correnteza do mar), e também devido à volatilização e à absorção respectivamente. Isto nos levou a modelar o referido fenômeno através de sistemas que incluem a E.D.P de Difusão-Advecção/Reação.

Os efluentes da água de produção de uma unidade de produção irão geralmente afetar um volume de água do mar circunscrito a algumas centenas de metros de distância da unidade (Johnsen e *et al* (2000) e Kennicut e *et al* (1996)), cuja pluma se dispersará nas três dimensões, é plausível assumir que o domínio $\Omega \subset R^3$ considerado é um paralepidedo, tal como o ilustra a figura 1, a seguir.

Além disso, adotamos a seguir as seguintes notações:
$u(t, \mathbf{x}), (t, \mathbf{x}) \in \Omega_t = (0, T] \times \Omega$ representando a concentração de material presente na água de produção, na posição $\mathbf{x} \in \Omega \subset R^3$ e no instante $t$. $\alpha = \alpha(t, \mathbf{x}, u)$ é a função que descreve a difusividade efetiva desse material.

*fazem parte da lista de produtos proibidos

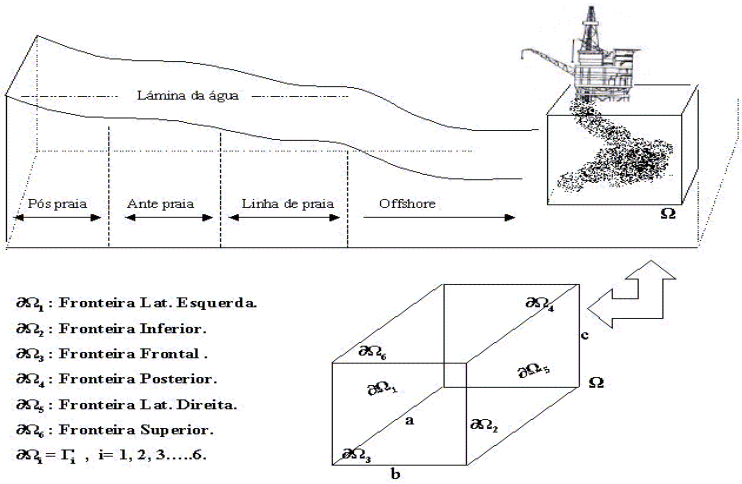


Figura 1: Domínio de Atuação

$W_1 = (w_1(\mathbf{x}, t), w_2(\mathbf{x}, t), w_3(\mathbf{x}, t))$ caracterizará o campo de velocidades do mar devido à circulação local, a marés e ventos. Denotamos com $V$ a resultante da circulação local $W_1$ e o campo $W_2$ o qual é induzido pela natureza gravitatória das diferentes susbtâncias contaminantes que fazem seu ingresso no mar através da fonte $f$. Neste trabalho vamos considerar que a circulação local $W_1$ tem comportamento estacionário e, sendo assim, consideraremos esse campo apenas como função da variável espacial. Apesar disto, é possível considerar a influência das marés através de uma mudança nas condições de fronteira[†] emulando a "variacão temporal"da circulação local em torno da unidade *offshore*.

De um modo geral, se denotamos com $\Gamma_N \subset \partial\Omega$ as fronteiras do oceano onde acontece a perda da substância, então esta é modelada através da condição

$$-\alpha \frac{\partial u}{\partial \eta} = k_N u, (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Gamma_N, \tag{1.1}$$

[†]as quais permitem gerar $W_1$ através da solução numérica das equações de Stokes

onde $\eta$ é o vetor normal unitário exterior à superfície. Esta condição de tipo Robin indica que a taxa de passagem de contaminante através da fronteira é suposta diretamente proporcional à concentração da própria substância nesse local. Neste caso, temos que $k_N = V \circ \eta$. No caso em que $k_{\Gamma_i} = 0$ temos que o fluxo através da fronteira $\Gamma_i$ é nulo, i.e. não há perda nem ingresso da substância. No caso das fronteiras nas quais não se registra a presença das substâncias poluentes temos a condição de Dirichlet homogênea:

$$u = 0, (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Gamma_D, \tag{1.2}$$

Assim, $\partial\Omega = \Gamma = \overline{\Gamma_N \bigcup \Gamma_D}, \Gamma_N \bigcap \Gamma_D = \emptyset$.

A função $f : \Omega_t \longrightarrow R$ representará o ingresso das substâncias contidas na água de produção, a mesma que acontece de maneira local ou pontual. A taxa da ação conjunta dos processos de volatilização, oxidação química e biodegradação dos constituintes do efluente será representada pela função $\sigma = \sigma(t, \mathbf{x})$.

As considerações acima permitem modelar nosso problema através da E.D.P.:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - Div(-\alpha \nabla u + Vu) &+ \sigma u = f, (t, \mathbf{x}) \in \Omega_t \\ u(0, \mathbf{x}) &= u_0(\mathbf{x}) \\ -\alpha(u)\frac{\partial u}{\partial \eta} &= k_N u, (t, \mathbf{x}) \in \Gamma_N. \end{aligned} \tag{1.3}$$

Neste, o campo de velocidades $W_1$ corresponde à solução numérica das equações de Stokes:

$$\begin{aligned} \mu \Delta W_1 &- grad(P) + f = 0 \\ div W_1 &= 0 \\ W_1(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}), \quad \forall \quad \mathbf{x} \in \Gamma_g \\ \frac{\partial W_1}{\partial \eta}|_{\Gamma_h} &= h. \end{aligned}$$

Aqui, $\Omega$ é um conjunto aberto e limitado do $R^3$ tal que $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_g \cup \Gamma_h$ e $\emptyset = \overline{\Gamma_g \cap \Gamma_h}$, $\mu$ é o coeficiente de viscocidade, $W_1$ é a velocidade , $P$ é a pressão e $f$ é a força do corpo (no nosso caso $f = 0$).

A possibilidade de descontinuidade das funções correspondentes à fonte, aos parâmetros ou à condição inicial faz com que a equação (1.3) possa não admitir solução no sentido clássico. Em geral, as equações derivadas das leis de conservação não têm essa solução no sentido clássico (ver Evans (1993)), porém definem problemas bem postos considerando a definição de soluções generalizadas ou fracas.

# 2 A Formulação Variacional

As exigências de suavidade e diferenciabilidade sobre a função $u$, impostas por uma E.D.P. como (1.3) podem ser enfraquecidas através da introdução da derivada no sentido das distribuições, o que permite obter a formulação Variacional ou Fraca (F.V) associada a (1.3), formulação que apresenta diversas vantagens. A base teórica dos métodos de elementos finitos é a F.V. Introduzindo uma discretização do domínio de solução, aproximamos a solução contínua com uma apropriada função contínua por partes, e, com isto, o problema de resolvermos uma E.D.P se reduz a resolver sucessivos sistemas. A F.V associada a (1.3) é

$$(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v)_\Omega - \alpha(\triangle u \mid v)_\Omega + (Div(Vu) \mid v)_\Omega = (f - \sigma u \mid v)_\Omega, \forall t \in (0, T], \quad (2.4)$$

$\forall v \in V \subset H^1(\Omega)$ e $(\cdot \mid \cdot)_{(\Omega)}$ é o produto interno usual em $\mathcal{L}^2(\Omega)$. De (4), com o recurso de instrumental analítico, obtem-se:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \mid v\right)_\Omega &+ \alpha(\nabla u \parallel \nabla v)_\Omega + (V \circ \nabla u \mid v)_\Omega + k\langle u \mid v\rangle_{\Gamma_r} \\ &= (f - \sigma u \mid v)_\Omega \qquad\qquad \forall v \in V, \forall t \in (0, T]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Aqui, $\langle \cdot \mid \cdot \rangle_{\Gamma_r}$ é o produto interno sobre a fronteira $\Gamma_r$. Um resultado devido a Lions (1961), garante a existência e unicidade de solução para uma

classe de problemas abstratos, e em particular para este, devidamente adequado aos objetivos deste trabalho.

## 2.1 Discretização Espaço-Temporal do Problema

Garantidas existência e unicidade da solução do problema variacional (2.5) em subespaços $V$ de $\mathcal{L}^2((0,T];H^1(\Omega))$ podemos utilizar algum método numérico apropriado para aproximar adequadamente esta solução. O Método de Galerkin é um método que permite construir uma solução aproximada da F.V através de Elementos Finitos.

Seja $V_h$ um subespaço de $V$ de dimensão finita gerado pela base $B = \{\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{n_h}\}$. Assim podemos representar qualquer função deste espaço, e, por isso, a solução do problema (2.5) no subespaço $V_h$, como:

$$u_h(t,x) = \sum_{i=1}^{n_h} c_i(t)\varphi_i(x).$$

Substituindo $u_h$ na formulação variacional (2.5) e uma vez que no método de Galerkin a formulação peso-residual é tal que as funções peso $v$ são da mesma classe das funções base ou teste $\varphi_i$, temos :

$$\sum_i^{n_h} \frac{dc_i}{dt}(\varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega + \sum_i^{n_h}\{\alpha(\nabla\varphi_i \parallel \nabla\varphi_j)_\Omega + k\langle\varphi_i \mid \varphi_j\rangle_{\Gamma_r} + (V \circ \nabla\varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega\}c_i$$
$$= (f - \sigma\varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega, \forall\varphi_j \in B,$$

equação que equivale ao sistema linear de E.D.O.:

$$A(\varphi_i,\varphi_j)\dot{c}(t) + B(\varphi_i,\varphi_j)c(t) = d(f,\varphi_j), \tag{2.6}$$

onde $B = (b_{ij}), A = (a_{ij})$ e $d = d_j$ são dados por :

$$\begin{aligned} b_{i,j} &= \alpha(\nabla\varphi_i \parallel \nabla\varphi_j)_\Omega + (V\nabla \circ \varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega + \sigma(\varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega + k\langle\varphi_i \mid \varphi_j\rangle_{\Gamma_r}, \\ a_{i,j} &= (\varphi_i \mid \varphi_j)_\Omega, \quad d_j = (f|\varphi_j)_\Omega. \quad i,j = 1,2,...n_h. \end{aligned}$$

Dos diferentes tipos de elementos finitos que podem ser escolhidos para discretizar um determinado domínio bidimensional, em geral os triângulos

são os mais adequados para descrever domínios cuja geometria é mais irregular. Assim, para domínios tridimensionais, os tetraedros são uma extensão natural e conveniente desses elementos triangulares.

Denotemos com $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ uma família finita de $NT$ tetraedros $\Omega_e$, dois a dois disjuntos ou tendo como interseção no máximo, uma face, uma aresta ou vértice e tais que :

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{NT} \Omega_e,$$

e associamos a esta malha o parâmetro $h$ dado por $h = max_e\{diam(\Omega_e)\}$ e. Denotamos então esta família $\{\Omega_e\}_{e=1}^{NT}$ por $\Upsilon_h$. Consideramos $V_h$ como o espaço das funções polinomiais de três variáveis de grau menor ou igual a 2 definidas em $\Omega_e$.

## 2.2 Estimativas de Erro

A estimativa abaixo corresponde ao erro cometido quando aplicado o Método de Galerkin contínuo no tempo para achar a solução aproximada $u_h$ do problema (2.6).

$$\begin{aligned}\|u-u_h\|^2_{L^\infty(0,T;\mathcal{L}^2(\Omega))} \leq e^{\lambda T}(C_0\|u_0-u_{h_0}\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)} - C_1\|u-u_h\|^2_{\mathcal{L}^2(0,T;H^1(\Omega))} \\ +C_2(\|u-\phi\|^2_{\mathcal{L}^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|u-\phi\|^2_{\mathcal{L}^\infty(0,T;\mathcal{L}^2(\Omega))} \\ +\|\frac{\partial(u-\phi)}{\partial t}\|^2_{\mathcal{L}^2(0,T;\mathcal{L}^2(\Omega))}) \quad \forall\phi\in\mathcal{L}^2(0,T;V_h),\end{aligned}$$

onde:

$$C_0 = \tfrac{1+2\epsilon+\frac{1}{2\epsilon}}{1-2\epsilon}, C_1 = \tfrac{\tilde{c_1}-2\epsilon(\lambda+1)}{1-2\epsilon}, C_2 = \tfrac{\tilde{c_2}+\tilde{c_3}+\frac{1}{2\epsilon}}{1-2\epsilon}, \quad e \quad \epsilon < 1/2.$$

Observe-se que a cota superior do erro cresce exponencialmente com o valor T. Do ponto de vista teórico isto indica uma dificuldade para as realizações de estimativas para períodos demasiado prolongados, o que não é o caso, pois nossos processos acontecem em intervalos de tempo relativamente curtos (Fay *in* Cantão (1998)). Douglas e Doupont (1970) obtêm outro limitante para

estimar o erro independemente de T para o caso não linear e sob a hipótese de $a$ ser continuamente Lipstziana em $v$. Os autores fazem também algumas observações e simplificações decorrentes no caso em que a equação é linear.

A discretização temporal de (2.6), feita através do método de diferenças finitas de Crank-Nicolson, propocionará uma solução aproximada $U$. Para tal, consideramos a formulação desta equação em termos de $t = (m + \frac{1}{2})\Delta t$ onde $m$ é inteiro não negativo e $\Delta t$ é o passo no tempo. E possível mostrar que

$$\begin{aligned} a_1\|z_M\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)} &+ lc_2^{-1}c_3\Delta t\textstyle\sum_{m=0}^{M-1}\|z_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \\ &+2L\Delta t\textstyle\sum_{m=0}^{M-1}a_2\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}\|^2_{H^1(\Omega)} \\ &\leq \tfrac{c_2^{-1}}{2\delta_1(\Delta t)^2}\textstyle\sum_{m=1}^{M-1}\|(u-\phi)_{m+\frac{1}{2}}-(u-\phi)_{m-\frac{1}{2}}\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \\ &+a_3\|(u_0-\phi(0,.))\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)}+\tfrac{1}{2\delta_2c_2}\|(u-\phi)_{M-1}\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)} \\ &+\tfrac{1}{2\delta_3c_2}\|(u-\phi)_{\frac{1}{2}}\|^2_{\mathcal{L}^2(\Omega)}+\vartheta(\Delta t)^5, \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad \forall\,\phi\in\mathcal{L}^2(0,T;V_h), \end{aligned}$$

onde $z_m = u_m - U_m$ e

(i) $a_1 = (F(\Delta t))^M - \frac{2\delta_2}{c_2})$,

(ii) $a_2 = (\mu_4 + \mu_5 + \mu_6)$ e

(iii) $a_3 = (1 + 2c_2^{-1}\delta_3 - l\Delta t)$.

Em outras palavras, com este resultado, obtem-se um limitante como aquele que foi obtido anteriormente, só que, agora, para a aproximação de Galerkin discreta, garantindo a qualidade das aproximações numéricas pelos métodos escolhidos.

## 2.3 Oscilações Numéricas: SUPG

Existe a possibilidade de que as soluções numéricas obtidas através do Método de Galerkin sejam corrompidas por oscilações, e isto poderá acon-

tecer em casos de problemas com convecção ou advecção dominantes. Estas oscilações indesejáveis podem ser evitadas fazendo um adequado refinamento da malha, mas o preço a pagar é um alto custo computacional. Uma alternativa para esta opção é o método Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) introduzido por Brooks e Hughes (1982), no qual a ideia básica é modificar as funções peso residual para o termo convectivo do Método de Galerkin, pertubação que só atua na direção do fluxo, evitando a excessiva difusibilidade presente nas soluções obtidas através dos outros métodos, sem introduzir difusão artificial e perder consistência como alguns métodos Upwind. Assim, as funções modificadas são da forma:

$$\tilde{\varphi}_i = \varphi_i + \psi_i,$$

onde $\varphi_i$ são as funções que geram $V_{h0}$, e $\psi_i$ são funções descontinuas que só atuam na direção do campo de velocidades, as quais dependem tanto de $V$ como do número de Péclet. Como em Codina (1998), neste trabalho consideramos:

$$\psi_i = \tau V \circ \nabla \varphi_i,$$

onde $\tau$ é um parâmetro, escolhido de tal forma a se obter uma solução nodalmente exata ou muito próxima desta. Para problemas de dimensão espacial maior que 1 uma estratégia amplamente adotada é proceder como no caso unidimensional, no qual se atinge uma solução nodalmente exata para elementos finitos lineares, quando:

$$\tau = (\coth(Pe) - \tfrac{1}{Pe})\tfrac{1}{2|V|},$$

onde $Pe = \frac{|V|h}{2\alpha}$ é o número de Péclet, sendo $\alpha$ o coeficiente de difusão, $V$ é a velocidade unidimensional respectivamente, e $h$ representa o comprimento de um elemento da malha uniforme. O processo para calcular $\tau_e$ é conforme o procedimento que aparece em Codina (1998); Codina et al. (1992), já incorporado com sucesso em diversos trabalhos correlatos (Cantão (1998) e De Oliveira (2003)).

## 2.4 Implementação:

Foram implementados programas em MATLAB versão 6.5 para a confecção da malha de elementos finitos e do campo de velocidades. Este último foi obtido através da solução numérica da equação de Stokes com as condições de fronteira: $V(x, y, z) = (v_1(x, z), v_2, v_3)$, onde: $v_1(x, z) = \frac{V_0(a-x)(x+a)z(2c-z)}{(ac)^2}$, sendo as duas últimas componentes constantes.

# 3 Resultados: Simulações

Devido à natureza diferente dos diversos compostos da água de produção, o estudo do comportamento espaço-temporal da pluma de água de produção é feito como em Johnsen e *et al* (2000) e Kennicut e *et al* (1996), através da análise individual dos grupos de constituintes mais representativos levando em cosideração suas características físico-químicas durante sua descarga no ambiente aquático.

Nos diversos cenários é feita uma discretização do domínio $\Omega$, atribuindo aos parâmetros do domínio os seguintes valores:

Tabela 1: Parâmetros da discretização espacial do domínio

| Parâmetros | Valores (km) |
|---|---|
| a | 1.8 |
| b | 0.9 |
| c | 0.15 |
| dx (nx=18) | 0.1 |
| dy (ny=9) | 0.1 |
| dz (nz =3) | 0.05 |

O tamanho do passo do tempo adotado será $dt = 0,03125$, tal que 1 hora de simulação equivalente a 32 iterações (ou passos) no tempo. Além disso, consideramos uma fonte pontual e constante, localizada numa determinada profundidade, algo que corresponde à situação estudada.

As taxas de degradação biológica $\sigma$ dos principais constituintes da água de produção, serão assumidas variáveis apenas com a profundidade. De tal forma que:

$$\sigma(z) = \begin{cases} \sigma_1 & 0 \leq z < \frac{c}{3} \\ \sigma_2 & \frac{c}{3} \leq z < \frac{2c}{3} \\ \sigma_3 & \frac{2c}{3} \leq z \leq c, \end{cases}$$

onde $\sigma_1, \sigma_2$ e $\sigma_3$ são constantes cujos valores são atribuidos de acordo com a natureza da substância em questão.

No caso do campo $W_2$, o qual é induzido pela natureza gravitatória das diferentes susbtâncias contaminantes que ingressam no mar através da fonte $f$, é considerado de tal forma que $W(x, y, z) = (0, 0, v_3)$, onde $v_3$ é constante e seu valor dependerá exclusivamente da natureza da substância a ser analisada, podendo ser positiva, negativa ou nula, para o caso de substâncias leves como PAHs(2-3 Anéis), Metais pesados e óleo disperso respectivamente. A seguir, em (3.1) as simulações do óleo disperso, caso ilustrativo do trabalho feito nas três situações.

## 3.1 Dispersão de óleo

Óleo disperso é um dos constituintes da água de produção que mais atenção recebe por parte das entidades de fiscalização do meio ambiente. Está presente em gotículas e encontra-se suspenso na fase aquosa. Sua concentração na água de produção depende da sua densidade, da tensão superficial entre o óleo e as fases da água, do tipo e eficiência do tratamento químico (ver Site: Enviromental Assessment Division (2004)). A natureza físico-química desta substância permite, neste cenário, considerarmos que não há maior influência da força gravitatória sobre ele, i.e., a componente vertical do campo $W_2$ é nula.

Ressaltamos que neste cenário a fonte foi desligada após 3 três horas de funcionamento. Os valores adotados para a difusividade e o decaimento são da mesma ordem de grandeza que aqueles utilizados nos trabalhos de Cantão

Tabela 2: Parâmetros do modelo utilizados na simulacão do óleo disperso

| Parâmetro | Valor |
|---|---|
| $\alpha$ | $0.003km^2/h$ |
| $\sigma$ | $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.02/h, \sigma_3 = 0.1/h$ |
| $(k_N)$ | $k_2 = k_6 = 0, k_N = V \circ \eta_N(km/h)$ |
| Vazão(fonte) | 1 (g/L)/h |

(1998) e De Oliveira (2003). Para efeitos de uma melhor visualização e uma adequada análise dos resultados das diferentes simulações, achamos conveniente exibir o comportamento espaço-temporal da concentração de cada substância, num mesmo nível de altura $z$. Para todos os diferentes cenários foram considerados os níveis correspondentes a $z = 0, z = \frac{c}{3}, z = \frac{2c}{3}$ e $z = c$ sendo que o primeiro e último nível correspondem ao fundo do mar e à superfície respectivamente.

## 3.2 Comentários dos resultados

Na Figura 2, os gráficos (a) mostram que após três horas, a concentração do óleo na região que corresponde a $z = \frac{c}{3}$ é maior que na altura correspondente a $z = \frac{2c}{3}$ e a concentração de óleo nesta profundidade é menor do que na superfície ($z = c$). Como a correnteza decresce com a profundidade, então a substância se dispersa mais na superfície do que em qualquer outro nível de profundidade provocando desta maneira uma menor concentração em cada ponto do domínio. Outro fator que contribui para isto é que a taxa de degradação é maior na superfície. Além disso, nos três casos temos um deslocamento da pluma, predominante na direção do eixo y, e isto se deve à correnteza ser predominante nessa direção.

Os gráficos (b) desta mesma figura correspondem à concentração do óleo na superfície após uma, duas e três horas respectivamente. Claramente apreciam-se os efeitos de difusão e de transporte ao longo do tempo, uma vez

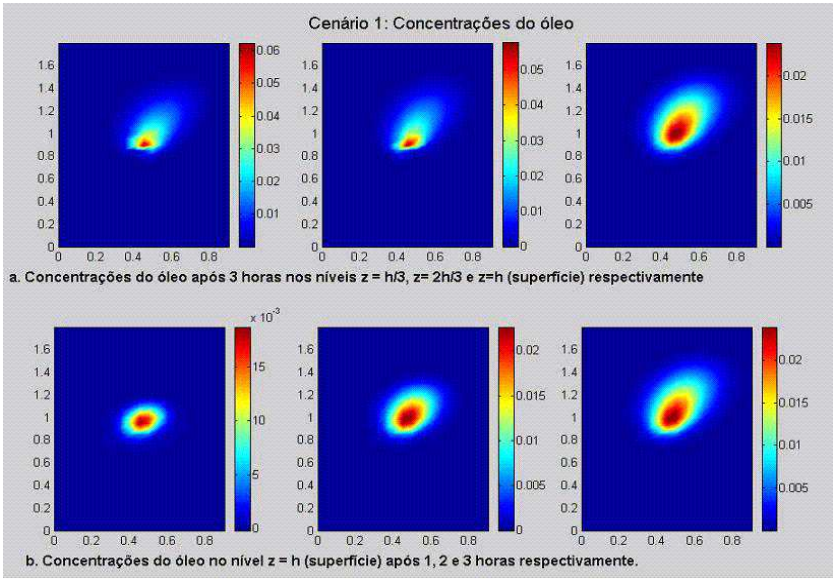


Figura 2: Concentração de óleo disperso

que a fonte se mantem ligada constantemente durante estas três horas.

# 4 Conclusões

Os gráficos das simulações dos diferentes cenários revelam resultados compatíveis com o esperado comportamento espaço-temporal das diversas substâncias mencionadas quando influenciadas por fenômenos de difusão e dispersão, sob determinadas condicões de fronteira e seus respectivos parâmetros.

Por outro lado, este texto apresenta de modo original o tratamento teórico que leva à garantia de convergência dos métodos de Galerkin discreto e contínuo nas situações abordadas. Esta situação abrange a inclusão no modelo e no tratamento algorítmico da variabilidade do coeficiente das

degradações, da dependência espaço-temporal do perfil de velocidades, e, desde que de modo adequado, da dependência de alguns dos parâmetros da própria concentração do efluente.

Apesar de termos considerado um domínio bastante regular, é perfeitamente possível modelar o processo de dispersão da água de produção em domínios de geometrias irregulares, bastando para isto fazer pequenas modificações no programa principal cujo código numérico aparece no apêndice deste trabalho. Em outras palavras, os resultados não dependeram da geometria do domínio ainda que se apóiem no uso de tetraedros.

Acreditamos que este modelo, uma vez calibrado, venha poder ser instrumento de apoio na avaliação do impacto ao ambiente marinho devido à atividade *offshore*, inclusive na fase de projetos tanto no dimensionamento das unidades quanto aos efeitos resultantes da localização.

Como sabemos, o tipo de informação requerido pelas instituições de fiscalização da qualidade ambiental deve ser tanto quantitativo como qualitativo e determinado em tempo real. Uma vez que os resultados das simulações podem ser tanto qualitativos quanto quantitativos, e que o programa demanda alguns minutos (menos de 5 minutos[‡]) então podemos considerar este trabalho como uma ferramenta adicional na tomada de decisões e procedimentos para avaliação do impacto em ambientes marinhos devido à descarga de água de produção.

# Referências

Brooks, A. N. e Hughes, T. J. R. (1982). Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:199–259.

[‡]Pentium 4, 2.4 GHz, 512 MB Memoria Ram e Sistema Operacional Windows.

Cantão, R. F. (1998). Modelagem e simulação numérica de derrames de óleo no canal de São Sebastião, SP. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Codina, R. (1998). Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 156:185–210.

Codina, R., Oñate, E., e Cervera, M. (1992). The intrinsic time for the streamline upwind/petrov-galerkin formulation using quadratic elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94:239–262.

De Oliveira, R. F. (2003). *O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: modelagem, análise numérica e simulações.* Tese de Doutorado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.

Douglas, J. e Doupont, T. (1970). Galerkin methods for parabolic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 7(4):1575–1626.

Evans, L. C. (1993). *Partial Differential Equations*, volume 3A of *Berkeley Mathematics Lecture Notes.* Berkeley Univ. Press, San Francisco.

Johnsen, S. e *et al* (2000). The environmental impact factor: A proposed tool for produced water reduction, management and regulation. Stavanger Norway. SPE-paper No. 61178. International Conference on Health, Safety and the Environment in Oil and Gas Exploration and Production.

Kennicut, M. C. e *et al* (1996). Geochemical patterns in sediments near offshore production platforms. *Can. Journal Aquat. Science*, 53:2554–2566.

Lions, J. L. (1961). *Equations Diffrentelles Operationelles et Problèmes aux Limites.* Springer, Berlin.

Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16 of *Studies in Mathematical and its Applications.* North-Holland, Amsterdan.

Oliveira, G. R. e Oliveira, M. K. (2000). Remoção de contaminantes tóxicos dos efluentes líquidos oriundos da atividade de produção de petróleo no mar. *Bol. Tec. Petrobras*, 43(2):129–136.

Pereira, O. A. e Travalloni, A. M. (2000). Metodologia experimental de amostragem isocinética para efluentes. *Bol. Tec. Petrobras*, 43(1):62–68.

Site: Enviromental Assessment Division (2004). A white paper describing produced water from production of crude oil, natural gas, and coal bed methane:. *URL:* www.ead.anl.gov/pub/dsp$_detail.cfm?PubID=1715$.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 137-146* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Aprendizagem Escolar e Qualidade de Vida via Modelagem Matemática e Simulações[1]

João Frederico C. A. Meyer[2],
DMA, IMECC–UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.

Nilson S. Peres Stahl[3],
Lab. Ciências Mat., CCT–UENF, 28.013-600, Campos dos Goytacazes/RJ.

**Resumo**. Este trabalho propõe o uso da modelagem de fenômenos locais relativos a qualidade de vida, com uso de instrumental matemático do ensino médio, como modo de motivar, justificar e promover a aprendizagem transdisciplinar de tais fenômenos. São apresentados alguns exemplos cujos comentários ilustram esses tópicos: a inclusão da aprendizagem de temas da qualidade de vida, o uso de matemática em situações efetivas, a presença de temas locais e atuais no currículo escolar. Também se apresentam nos exemplos o uso da matemática discreta, especificamente em termos gerais de equações de diferenças em suas diversas caracterizações.

***Palavras-chave****: Matemática discreta, equações de diferenças, qualidade de vida, educação matemática.*

## 1 Introdução e Justificativa

A Matemática tem se apresentado, tradicionalmente, como uma das disciplinas mais temidas pelos educandos, principalmente nos níveis funda-

[1]Educação Matemática
[2]joni@ime.unicamp.br
[3]stahl@uenf.br

mental e médio. As dificuldades na aprendizagem podem, muitas vezes, ocasionar a retenção continuada do educando chegando até mesmo à evasão escolar. Naturalmente, tais dificuldades podem decorrer de inúmeras ações pedagógicas. Neste contexto acreditamos que uma postura partindo do pressuposto de que a educação é parte da própria experiência humana e que o ensino centrado nos interesses do educando ou do grupo, seja uma proposta pedagógica mais favorável. Neste sentido adotamos situações-problema envolvendo a qualidade de vida via modelagem como estratégia do ensino/aprendizagem da Matemática.

# 2 Objectivo

Este trabalho visa usar a modelagem matemática de fenômenos ambientais como meio de criar de condições de promover mudanças em professores e alunos quanto à matemática, seu uso instrumental e seus paradigmas. Foi preparado para trabalho com comunidades ligadas a escolas públicas, e objetiva, a longo prazo, uma melhoria no aproveitamento da parte de alunos, em termos de seu rendimento (considerado como aprendizado) e de capacitação de professores, motivando-os e incentivando-os a novas práticas de ensino, novas estratégias didáticas (Skovsmose, 2001), novas abordagens de conteúdos - e novos desafios.

# 3 Método

São estudadas abordagens discretas de problemas, sua relação com conceitos tradicionais de progressões, seqüências, equações de diferenças e o uso de continuidade no estudo de problemas discretos. Nesta ótica, as situações-problema serão retiradas do dia a dia dos alunos e da comunidade como um todo na forma de projetos. Neste ponto serão estimulados a utilizar equipamentos de cálculo, planilhas e softwares matemáticos mais adequados

à aprendizagem. Também será proposta uma inclusão de uso de instrumentos que, mesmo não sendo novos, são-no em termos de suas presenças nas aulas de matemática: informações da web, imagens de satélite, levantamentos aerofotogramétricos, e simulações. Além de envolver as escolas da região de Campos dos Goytacazes, RJ, o projeto prevê uma interação intensa com docentes e alunos do Laboratório de Ciências Matemáticas (LCMAT) do Centro de Ciência e Tecnologia (CCT) da UENF - Universidade Estadual do Norte Fluminense.

Inicialmente foi proposto um cronograma de doze meses para a realização das atividades, com início no primeiro semestre letivo de 2005. Questões sobre crescimento populacional, abastecimento e água potável, produção de lixo, tratamento e disposição final de esgoto doméstico são os temas iniciais abordados pelos educandos que, sob orientação dos professores, utilizam a Matemática como ferramenta na sua solução (Stahl, 2003; Meyer e Stahl, 2000).

# 4 Desenvolvimento

## 4.1 PROJETO I: Construindo um modelo matemático para previsão do consumo de água, produção de lixo e esgoto

### 4.1.1 Situação-problema

A dinâmica demográfica é um fenômeno inerente à nossa história e um de seus aspectos, o do crescimento, acarreta a geração de diversos problemas de origem ambiental, como o aumento do consumo de água, maior produção de lixo e esgoto, entre outros. Mais especificamente, na cidade de Campos dos Goytacazes - RJ, ocorrem-nos as seguintes questões:

a) Na atual situação de crescimento populacional haverá abastecimento de água suficiente para a cidade num futuro próximo como, por exemplo,

para o ano de 2040?

b) Mesmo que haja tal recurso natural a estação de tratamento de água da cidade terá capacidade para abastecer essa população futura?

c) Com relação à produção do lixo doméstico, haverá local disponível para sua destinação final nesse futuro próximo?

d) O esgoto produzido atualmente é convenientemente tratado e disposto, se for tratado, ainda poderá continuar a sê-lo no futuro?

### 4.1.2 Coleta de Dados

Os dados referentes ao número de habitantes da cidade de Campos dos Goytacazes encontram-se registrados na Tabela 1

Tabela 1: Crescimento da População de Campos

| **Ano** | **Nº de Habitantes** |
|---|---|
| 1940 | 180.677 |
| 1950 | 200.327 |
| 1960 | 246.865 |
| 1970 | 285.432 |
| 1980 | 320.940 |
| 1991 | 376.290 |
| 2000 | 406.989 |

### 4.1.3 O Modelo Matemático

A obtenção do modelo matemático que permitirá estimar a população futura baseias-se no método do ajuste de curvas por mínimos quadrados. Este processo de estimação apresenta uma base matemática que não está ao alcance do nível médio, entretanto podemos contornar essa dificuldade

se o tratamento dispensado aos dados for por meio de uma abordagem estatística, o que significa estar trabalhando com uma equação de primeiro grau, de acordo com o diagrama de dispersão referente a Tabela 1. A Figura 1 apresenta essa tendência linear.

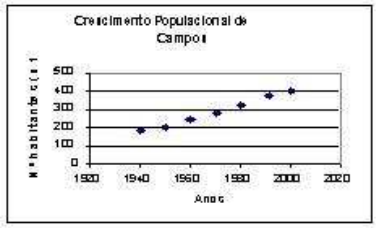


Figura 1: Gráfico de dispersão referente ao crescimento populacional de Campos

### 4.1.4 Sugestão de tópicos ou assuntos a serem explorados pelo professor

A título de sugestão, apresentamos aos professores alguns tópicos/assuntos a serem trabalhados com a aplicação do projeto:

- modelos matemáticos;
- construção e tipos de gráficos;
- diagramas de dispersão;
- construção e tipos de gráficos via aplicativos numéricos e/ou planilha eletrônica via microcomputador;
- tendências lineares e não lineares;
- reta média, ajuste de curva por quadrados mínimos (abordagem estatística em nível médio);

- reta média (ajuste de curva) via aplicativos numéricos e/ou planilha eletrônica via microcomputador;
- função linear;
- equação da reta;
- estimativa da população para o ano de 2040;
- progressão aritmética e geométrica;
- "estimativa da população para o ano de 2040 utilizando-se de aplicativos numéricos via microcomputador;
- escalas (análise de fotos via satélite).

### 4.1.5 Solucionando o problema gerador

Sabendo-se que o consumo médio de água, a produção de esgoto e lixo per capita e por dia é de respectivamente, 300 litros, 240 litros e 1,5 quilos, podemos, no nível escolar desejado, projetar os valores correspondentes para a população do ano de 2040. Conhecendo-se a capacidade de produção atual de água tratada, a capacidade de tratamento do esgoto e o tamanho das áreas para disposição final do lixo por análise de fotos via satélite, as respostas às questões do item 1 podem ser tratadas de forma imediata.

## 4.2 PROJETO II: Cálculo da vazão do Rio Ururaí

### 4.2.1 Situação-problema

O rio Ururaí tem como origem a Lagoa de Cima, sendo, portanto, seu vertedor. Apresenta índices de poluição significativos e vem perdendo piscosidade ao longo dos anos. Em regiões ribeirinhas, famílias inteiras sobreviviam da pesca num passado não muito distante, e agora têm que se dedicar a outras atividades. Na época chuvosa o rio transborda e inunda a faixa de circulação

dos moradores. Isto ocorre, segundo eles, devido ao assoreamento causado pelo acúmulo de lixo em seu leito e a degradação da mata ciliar, além de outros fatores.

Neste contexto, uma questão ambiental relativa à qualidade de vida dos ribeirinhos se evidencia, ou seja, diante de uma possível canalização do riacho, quais deveriam ser as dimensões de sua seção transversal e quais suas características geométricas possíveis (Stahl, 2003; Meyer e Stahl, 2001).

### 4.2.2 Coleta de dados e modelo

Para a análise da escolha dessa seção transversal de canalização, torna-se necessário, primeiramente, estimar a vazão do riacho. Para tanto é feita sua batimetria , ou seja, escolhida uma seção, esta é dividida em trechos regulares medindo-se suas profundidades construindo-se seu perfil. A figura 2 apresenta esta situação.

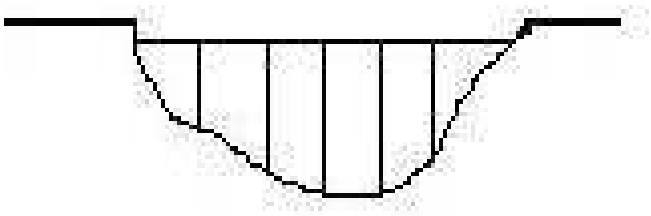

Figura 2: Construção do perfil do riacho (batimetria).

Sabe-se que a vazão (Q) é definida como sendo a relação entre o volume (V) e o tempo (t), ou Q = V/t.

Este volume, por sua vez, é definido como sendo o produto da área (A) (seção transversal) por um comprimento (L). Esta pode ser uma medida conveniente situada, por exemplo, 10m a jusante e a montante da seção em estudo, portanto 20 m.

Para o cálculo da área (A) seria possível lançar mão do ajuste de curva polinomial com a determinação da função que melhor se ajustasse aos pontos. Este procedimento leva em conta construções algébricas que estão além

do nível médio e devemos, portanto, recorrer a métodos mais simples. A determinação da área (A) da seção poderá ser obtida do perfil reproduzido em papel milimetrado ou quadriculado, tomando algum cuidado com escalas. Trabalhando com escalas, por exemplo, 1:100, teremos que cada quadrado de um centímetro representará 1 metro quadrado. Com o somatório dos quadrados, teríamos a área da seção transversal do riacho. Essa medida também poderia ser obrida por outro método, ou seja, a seção seria re-dividida em trapézios, tantos quantos possíveis, e do somatório das áreas de cada um teríamos também o valor da área (A) da seção.

O tempo (t) poderia ser medido cronometrando-se a passagem de um elemento (uma garrafa plástica vazia, por exemplo) arrastado pela correnteza no espaço correspondente ao mesmo comprimento (L) utilizado para o cálculo do volume. Note-se que as velocidades da corrente variam entre a margem e o eixo do leito do riacho, entretanto vamos aproximá-la por valor constante ao longo do perfil.

### 4.2.3 Modelos do perfil de canais

Numa eventual canalização do rio Ururaí, poder-se-ia optar por três perfis diferentes, a saber:

i- retangular;

ii- semicircular;

iii- trapezoidal.

A Figura 3 apresenta as três possibilidades.

### 4.2.4 Sugestão de tópicos ou assuntos a serem explorados pelo professor

A título de sugestão, apresentamos aos professores alguns tópicos/assuntos a serem trabalhados com a aplicação do projeto:

Figura 3: - Seções possíveis para canais.

- cálculo das áreas de figuras geométricas;
- variação de uma função com relação a sua variável dependente;
- relações métricas de triângulos;
- p)trigonometria;
- cálculo da área da seção do riacho via microcomputador por meio de aplicativo numérico (Matlab).

#### 4.2.5 Solucionando o problema gerador

Conhecida a vazão do riacho, a determinação da seção dos diversos canais em função de sua característica geométrica será imediata. Resta a discussão sobre os efeitos ambientais de uma canalização desse tipo e suas conseqüências a médio e longo prazos.

## 5 Resultados Obtidos

Embora o projeto esteja ainda em andamento, observou-se que tanto os alunos quanto os professores se mostram motivados. Isto se deve às mudanças de atitudes docentes e discentes ao longo de um processo que rompe com o paradigma tradicional: a utilização da modelagem matemática não apenas como estratégia de ensino aliado ao emprego de planilhas eletrônicas e aplicativos numéricos, mas na avaliação quantitativa e qualitativa de fenômenos próximos, e de relevância social. O conjunto das tecnologias usadas, quando

devidamente aplicadas, propiciam um terreno fértil para o ensino e aprendizagem da Matemática, mas mais, para que a atividade escolar se aproprie do compromisso social.

## Referências

Meyer, J. F. C. e Stahl, N. S. P. (2000). Modelos computacionais em sistemas ambientais: O desafio de criar uma nova disciplina. XXII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Santos/SP.

Meyer, J. F. C. e Stahl, N. S. P. (2001). Determinação da vazão de um córrego via pesquisa de campo, modelos matemáticos e computacionais. XXIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Santos/SP.

Skovsmose, O. (2001). *Educação Matemática Crítica.* Ed. Papirus, Campinas/SP.

Stahl, N. S. P. (2003). *O Ambiente e a Modelagem Matemática no Ensino do Cálculo Numérico.* Tese de Doutorado, Faculdade de Educação – Unicamp, Campinas-SP.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 147-156* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# O uso de Controladores Fuzzy para Resolução de Equações Diferenciais Ordinárias

Marina R. Barros Dias[1], Laécio C. Barros[2],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

**Resumo**. Nesse artigo nós propomos uma metodologia para obter soluções numéricas de Equações Diferenciais Ordinárias cujo campo de direções pode ser apenas parcialmente conhecido. Para isto, aliamos métodos de controladores fuzzy com métodos numéricos tradicionais. Justificativas da aproximação dessas soluções para a solução teórica são apresentadas. Aplicamos a metodologia ao modelo de crescimento logístico (ou Verhulst) e uma comparação com a solução clássica é comentada. Finalmente, indicamos essa metodologia como uma ferramenta auxiliar para obtenção de parâmetros.

***Palavras-chave***: *Equações Diferenciais Ordinárias, Controladores Fuzzy, Métodos Numéricos, Soluções Aproximadas.*

## 1. Introdução

Muitas vezes nos deparamos com fenômenos que podem ser modelados por Equações Diferenciais Ordinárias, cuja resolução exige cálculos complexos. Na maioria das vezes, fazemos uso da Análise Numérica, cuja teoria já é bastante aprofundada e seus resultados são conhecidamente eficientes. Mais ainda, muitas vezes, principalmente em fenômenos biológicos, tais equações

[1]madias@ime.unicamp.br
[2]laeciocb@ime.unicamp.br

são parcialmente conhecidas, isto é, o campo de direções é conhecido apenas qualitativamente. Nesse caso, uma ferramenta indicada é a teoria fuzzy, mais especificamente os controladores fuzzy que, com o auxílio da lógica fuzzy e de um especialista, são capazes de "captar" as principais informações de um determinado fenômeno.

Assim, propomos a "união" da Análise Numérica, com toda a sua eficiência já comprovada, e a Teoria dos Conjuntos Fuzzy (mais especificamente, os Controladores Fuzzy) para "produzir" soluções numéricas do fenômeno estudado. A seguir, faremos um pequeno resumo das teorias dos conjuntos fuzzy por nós utilizada Barros e Bassanezi (2005) e Peixoto (2005); Bando (2002). Os métodos de Análise Numérica não serão aqui comentados, pois acreditamos que eles sejam conhecidos e, caso não sejam, podem ser facilmente encontrados Cunha (2003).

## 2. Preliminares

Um subconjunto (clássico) $A$ do universo $U$ pode ser representado por sua função característica, que é dada por

$$\chi_A(x) = \begin{cases} 1, & se\ x \in A \\ 0, & se\ x \notin A. \end{cases}$$

A idéia de Zadeh, ao formular o conceito de subconjuntos fuzzy, foi extender o conceito de um elemento pertencer ou não a um conjunto, ampliando o contradomínio de $\chi_A$ para $[0, 1]$. Adimitiu-se portanto, que um elemento, ao pertencer a um conjunto, o faz com um determinado grau.

Um subconjunto fuzzy $A$ de $U$, ou simplesmente conjunto fuzzy, é caracterizado por uma função de pertinência $\varphi_A : U \to [0, 1]$, em que o número $\varphi_A(x)$ representa o grau de pertinência do elemento $x$ ao subconjunto fuzzy $A$.

Um controlador fuzzy é um sistema baseado em regras fuzzy e possui, basicamente, quatro componentes: um processador de entrada (ou fuzzifi-

cador), um conjunto de regras linguísticas, um método de inferência fuzzy e um processador de saída (ou deffuzificador), que gera um número real como saída.

A fuzzificação é o estágio onde as entradas do sistema são modeladas por conjuntos fuzzy com seus respectivos domínios. As funções de pertinência são formuladas para cada conjunto fuzzy envolvido no processo e, mesmo que a entrada seja crisp (clássica), ela será fuzzificada por meio de sua funão característica. A base de regras pode ser considerada como o "núcleo" do controlador fuzzy. Nela se encontram as proposições fuzzy, que são fornecidas de acordo com um especialista. É neste ponto que as variáveis e suas classificações linguísticas são catalogadas e, em seguida, modeladas por conjuntos fuzzy, isto é, funções de pertinência. As proposições fuzzy aqui descritas são feitas na forma linguística:

$R_1$: SE $x$ é $A_1$ E $y$ é $B_1$ ENTÃO $z$ é $C_1$
$R_2$: SE $x$ é $A_2$ E $y$ é $B_2$ ENTÃO $z$ é $C_2$

onde $A_i$, $B_i$ e $C_i$ são conjuntos fuzzy.

O método de inferência que será utilizado em nosso trabalho é o de Mamdani Barros e Bassanezi (2005), que agrega as regras por meio do operador lógico *OU* modelado pelo operador matemático máximo ($\vee$) e, em cada regra, os operadores lógicos $E$ e ENTÃO são modelados pelo operador mínimo ($\wedge$).

Por fim, na deffuzificação, o valor da variável linguística de saída é traduzido por um valor real. O método comumente usado, e será também o método utilizado em nosso trabalho, é o método do Centro de Gravidade ou Centróide. Este método pode ser entendido como uma média ponderada onde $\varphi_A(x)$ funciona como peso do valor $x$.

No caso contínuo, a defuzzificação pode ser dada pela fórmula

$$\bar{z} = \frac{\int \varphi_A(x) x dx}{\int \varphi_A(x) dx}.$$

O teorema seguinte desempenhará um papel fundamental para justificar nossa metodologia.

***Teorema:*** Suponhamos que as funções de pertinência que compõem a base de regras sejam contínuas e com valores nulos fora de intervalos (como por exemplo, as triangulares ou trapezoidais). Se a t-norma e a t-conorma são contínuas e for adotado um método de deffuzificação, como centro de massa ou média dos mínimos, então a classe das funções $f_r$ é densa na classe das funções definidas e contínuas em conjuntos compactos Nguyen e Walker (2000).

Aqui, t-norma e t-conorma são operadores lógicos de $[0,1]$x$[0,1]$ em $[0,1]$ que generalizam os operadores mínimo e máximo, respectivamente.

# 3. Metodologia

Suponha que um determinado fenômeno seja modelado matematicamente pelo PVI

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0, \end{cases} \tag{3.1}$$

cuja solução é dada por

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(s, y(s))ds.$$

Como é sabido, dependendo da complexidade do campo $f$, $y$ pode não ter uma expressão analítica explícita. Nesse caso, o que se faz é adotar algum método, como os de Runge-Kutta, para obter uma solução numérica $y_n$ para o PVI (3.1), com

$$y_n \to_{n\to\infty} y.$$

É claro que as aproximações $y_n$ só serão obtidas se o campo $f$ for conhecido, ou seja, o conhecimento de $f$ é uma imposição do método numérico para produzir a estimativa $y_n$ para cada $x_n$.

Do ponto de vista de modelagem, a crítica que se faz é que, muitas vezes, o campo de direções $f$ é conhecido apenas parcialmente. Isto é, há clareza apenas em algumas propriedades qualitativas de $f$, que são reveladas pelo fenômeno estudado. A partir daí, com o objetivo de se produzir uma solução matemática para o problema, adota-se, arbitrariamente, alguma expressão matemática, que representa aquelas propriedades do fenômeno para o campo $f$.

Nossa proposta aqui é "substituir" o campo $f$ em (3.1) por uma base de regras que representa aquelas propriedades características do fenômeno. Isto é, substituir o campo teórico $f$ pela $f_r$ do teorema acima, produto da base de regras combinada com alguma metodologia de controladores fuzzy. Aqui adotaremos o método de inferência de Mamdani, com centro de massa como deffuzificador.

Desse modo, o PVI (3.1) será substituído por

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f_r(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}, \tag{3.2}$$

e, à luz do teorema citado acima, espera-se que

$$y_r \to_{r\to\infty} y,$$

já que

$$f_r \to_{r\to\infty} f,$$

onde $y_r$ é a solução de (3.2). Mais ainda, como $f_r$ é conhecida na forma de tabela, pois é a saída do controlador fuzzy, faz-se necessário a utilização de algum método para se obter sua solução numérica, $y_r^n$.

Desse modo temos

$$y_r^n \rightarrow_{n\rightarrow\infty} y_r \rightarrow_{r\rightarrow\infty} y$$

o que nos faz crer que

$$y_r^n \rightarrow_{r\rightarrow\infty}^{n\rightarrow\infty} y$$

# 4. Aplicações

Apenas com o intuito de ilustrar a metodologia aqui sugerida por nós, vamos aplicá-la ao modelo de Verhulst e comparar sua solução com a classicamente conhecida.

Como sabemos, a característica principal no modelo de Verhulst é que a razão de crescimento de uma população depende diretamente dos recursos disponíveis da seguinte maneira Edelstein-Keshet (1987):

- Para populações baixas a região de crescimento é alta;
- Para populações altas a região de crescimento é baixa.

A partir das características desse modelo, supomos a seguinte base de regras fuzzy para o modelo de Verhulst considerado como entrada a densidade populacional ($y$) e como saída a razão de crescimento percentual, ou específica, denotada por $\frac{1}{y}\frac{dy}{dx}$:

1. Se a população é "muito pequena" então a variação é "grande positiva"
2. Se a população é "pequena" então a variação é "grande positiva"
3. Se a população é "média" então a variação é "média positiva"
4. Se a população é "média alta" então a variação é "média positiva"
5. Se a população é "alta" então a variação é "pequena positiva"
6. Se a população é "muito alta" então a variação é "pequena positiva"

7. Se a população é "altíssima" então a variação é "negativa"

Com base nas regras acima, dividimos a variável de entrada "população" em sete compartimentos, com os seguintes termos linguísticos: *muito pequena, pequena, média, média alta, alta, muito alta* e *altíssima*. Para a variável de saída "variação", os termos linguísticos considerados foram: *negativa, pequena positiva, média positiva* e *grande positiva*, ou seja, temos quatro compartimentos para esta variável. Nas figuras 1 e 2, estão ilustradas as funções de pertinência das variáveis de entrada e saída, respectivamente:

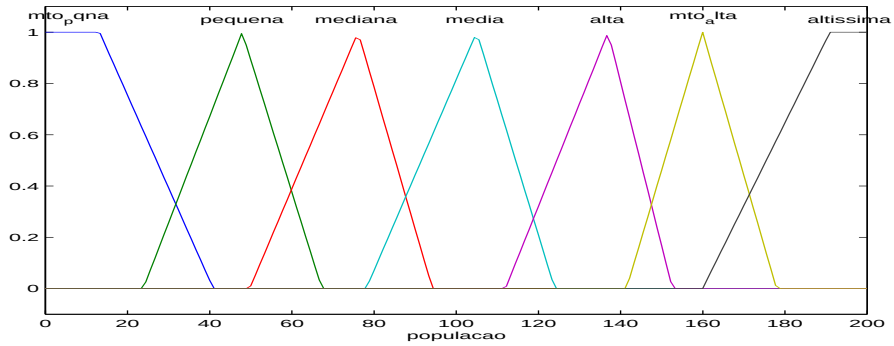


Figura 1: Função de pertinência da variável "população"

Utilizamos, neste artigo, o controlador fuzzy e o método de Euler Aperfeiçoado, cujas soluções são obtidas através da fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_r(x_n, y_n) + f_r(x_n + h, y_n + hf_r(x_n, y_n))],$$

onde $h$ é o passo utilizado para a discretização.

Com o intuito de comparar o resultado obtido, lembramos que o modelo de Verhulst segue a seguinte equação

$$\frac{dy}{dx} = ax(K - x)$$

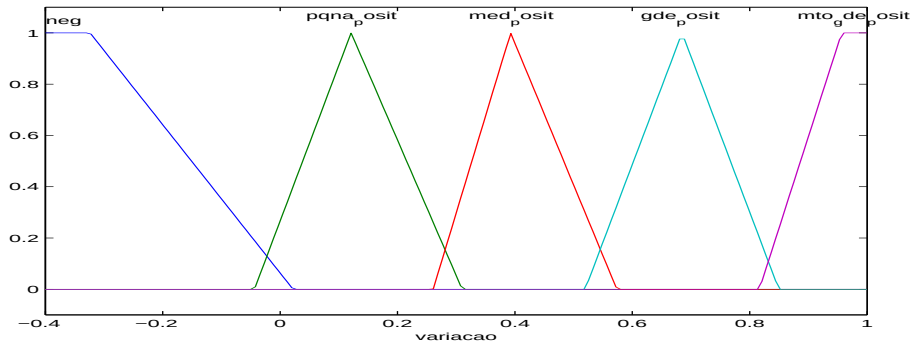


Figura 2: Função de pertinência da variável "variação"

onde $a$ é a taxa de crescimento específico e $K$ é a capacidade suporte da população. Observamos ainda que, para este artigo, utilizamos os seguintes parâmetros: $a = 1$ e $K = 167$.

Na figura 3 vemos as soluções obtidas através dos dois métodos: o clássico, com o campo $f$ conhecido, e o fuzzy, feito a partir da base de regras. O valor inicial x(0) = 10 foi o mesmo nos dois casos.

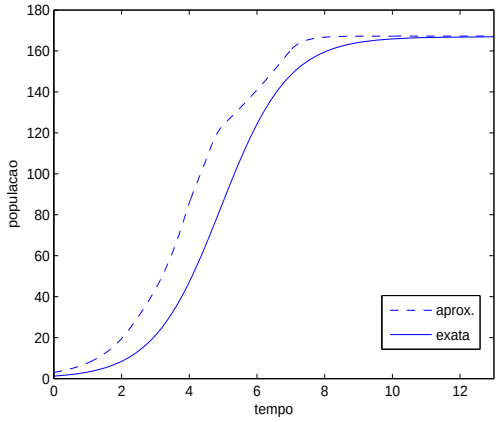


Figura 3: Gráfico das soluções do modelo de Verhulst no caso clássico e obtido pelo controlador fuzzy

A figura 3 ilustra, ainda que apenas graficamente, o quanto as soluções clássicas ($y$) e via sistema fuzzy ($y_r$) estão próximas.

Queremos ressaltar que o exemplo acima foi escolhido para ilustrar a metodologia aqui proposta porque, nesse caso, o campo $f$ é bastante conhecido, bem como a solução $y$. No entanto, devemos lembrar que $y_r$ depende apenas do sistema fuzzy. Isto significa que não precisamos de nenhum modelo pré-concebido $f$ sugerindo uma solução da forma $y_r$ para representar o fenômeno estudado.

# 5. Conclusões

Como comentamos acima, as soluções via metodologia clássica e via sistema fuzzy são bastante semelhantes. Qual delas deve ser escollhida para melhor representar o fenômeno é uma questão a ser debatida. Enquanto no caso clássico há uma arbitrariedade na escolha do campo $f$ como modelo do fenômeno, no caso fuzzy a arbitrariedade é fundamentalmente no método de inferência adotado, já que a base de regras é construída juntamente com um especialista, e portanto, com forte representatividade do fenômeno estudado.

Se, por algum motivo, adota-se o campo $f$ como paradigma, e consequentemente $y$ é a solução do problema, então podemos "melhorar" as estimativas $y_n$ produzidas pela metodologia fuzzy, de várias maneiras: aumentando $r$; aumentando $n$ ou ainda escolhendo um método numérico mais eficiente, como os de Runge-Kutta de ordem mais alta.

Finalmente queremos dizer que a metodologia apresentada por nós pode auxiliar na investigação de parâmetros do modelo dado pelo campo $f$, que geralmente tem grande interpretação física/biológica. Para isto, basta usar o conjunto de dados gerados pelo nosso método e por meio de algum método de ajuste, obter estimativas da solução teórica $y$. Estudos preliminares sobre este assunto o leitor pode consultar Barros e Bassanezi (2005).

# Referências

Bando, F. M. (2002). Sistemas fuzzy e aproximação universal. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

Barros, L. C. e Bassanezi, R. C. (2005). Tópicos em lógica fuzzy com aplicações em biomatemática. No prelo.

Cunha, M. C. C. (2003). *Métodos Numéricos*. Editora Unicamp, Campinas/SP.

Edelstein-Keshet, L. (1987). *Mathematical Models in Biology*. McGraw-Hill, Inc, N. York.

Nguyen, H. T. e Walker, E. A. (2000). *A First Course in Fuzzy Logic*. Chapman and Hall/CRC, N. York.

Peixoto, M. S. (2005). Sistemas dinâmicos e controladores fuzzy: um estudo da dispersão da morte súbita dos citros em são paulo. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

*BIOMATEMÁTICA* ***15*** *(2005), 157-170* *ISSN 1679-365X*
*Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP*

# Extensión de un modelo de difusión de partículas contaminantes en medios acuíferos planos a la superficie esférica

Rosa M. Mendez Parra[1],
Dumar A. Villa Zapata[2],

Faculdad de Ciencias Básicas, Uniquindio – Armênia, Colombia.

**Resumen**. En el presente trabajo, se realiza una extensión de un modelo de difusión, empleado por el Doctor João F. Meyer, de la Universidad de Campinas (Brasil), sobre el modelamiento de difusión de partículas contaminantes en medios planos, como ríos, lagos y mares costeros. La extensión se hace para encontrar un modelo equivalente, que permita describir, en la superfície bidimensional esférica, la difusión de tales partículas.

***Palabras-clave***: *Ecuación de difusión, coordenadas esféricas, contaminación en medios acuosos, modelaje matemática.*

## 1. Introdución

La difusión es un fenómeno presente en muchos aspectos de la naturaleza. Uno de ellos, es la difusión de partículas contaminantes en un medio acuoso. El presente trabajo, tiene por objeto modificar un modelo de difusión

[1]rosamendez@uniquindio.edu.co
[2]dumar@uniquindio.edu.co

de partículas contaminantes, apropiado en un medio líquido y plano (ríos, lagos o mares costeros), para que pueda ser utilizado en superficies esféricas (el océano). Para lograr este fin, se utiliza uno de los sistemas de coordenadas curvilíneas y se plantean en el sistema escogido los elementos requeridos para la extensión del modelo.

## 2. Algunos aspectos sobre la difusión

Existen en la naturaleza algunos procesos físicos, llamados Fenómenos de Transporte, que involucran transferencia de materia, energía o momentum. Ejemplos de estos procesos son la viscosidad, propagación del calor y la difusión de masa.

Los modelos de difusión son planteados con ayuda de herramientas matemáticas que permiten la descripción de los procesos difusivos, estas herramientas son las leyes de conservación y las ecuciones diferenciales ordinarias y parciales. Algunos procesos biológicos, descritos a partir del modelo de difusión, son encontrados en Murray (1991); Edelstein-Keshet (1988); Okubo (1980).

Difusión es el proceso por el cual, la materia se propaga de una parte de una región en un sistema, a otra región del mismo (Cranck, 1964). Originalmente, bajo difusión se comprendía al proceso de auto-mezclado de las moléculas de un fluido. Posteriormente esta idea fue replanteada, ya que puede resultar que en el proceso difusivo se encuentren fuerzas del medio* que ayuden a la difusión de partículas, además de reacciones químicas o físicas del soluto con el solvente.

En síntesis, la difusión tiende a devolver el sistema de estudio, a un estado de equilibrio, esto es, un estado de concentración constante.

La difusión se produce por dos mecanismos básicos: difusión molecular o Browniana y difusión turbulenta. La primera, es aquella en la cual las

*Fuerzas convectivas

partículas suspendidas en un fluido, experimentan un movimiento aleatorio, producido por colisiones entre ellas; este fenómeno se conoce como movimiento browniano. La segunda, es la difusión que incluye procesos inducidos por agentes externos al fluido, los cuales, entregando energía de alguna forma al fluido, lo vuelven homogéneo, esto hace que en la difusión turbulenta las partículas se difundan más rápidamente que en la difusión molecular.

Como no todos los procesos de difusión ocurren a la misma velocidad, se ha definido un número llamado *Coeficiente de difusión*, usualmente denotado por $D$, que mide la velocidad de la difusión de una sustancia en otra.

Las leyes que rigen los procesos de difusión de materia o masa son: la *ley de conservación de masa*[**] y *la ley de Fick*[***].

La ley de conservación de la materia, afirma que: *la tasa de variación de la concentración de partículas en una región, en un instante dado, es igual a la tasa de entrada de las partículas, menos la tasa de salida de las partículas, en la región considerada.*

La primera ley de Fick establece que en un medio homogéneo e isotrópico, *el flujo de partículas es proporcional a menos el gradiente de concentración de las mismas.*

La primera ley de Fick expresada en términos matemáticos es:

$$J(x;t) = -D\frac{\partial C(x;t)}{\partial x}, \tag{2.1}$$

en donde:

- $J(x;t)$: es el flujo de partículas, dado en unidades de masa por unidad de área por tiempo.
- $C(x;t)$: es la concentración de la masa, dado en unidades de masa por volumen.
- $D$: es el coeficiente de difusión, dado en unidades de área por tiempo.

[**]Enunciada por Lavoiser en el siglo XIX.
[***]Enunciada por Fick en 1855.

La ley de conservación de masa expresada en términos matemáticos es:

$$\frac{\partial C(x;t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x;t)}{\partial x}. \tag{2.2}$$

Al derivar (2.1) con respecto a $x$ y reemplazando en (2.2), se obtiene:

$$\frac{\partial C(x;t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C(x;t)}{\partial x^2}. \tag{2.3}$$

Esta ecuación es llamada la *Segunda ley de Fick* o *Ley de Difusión Unidimensional*. Al extender la ecuación(2.3), a un espacio $n-dimensional$, la fórmula resultante para la difusión es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C(x;t)}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2 C(x;t)}{\partial x_n^2}\right). \tag{2.4}$$

# 3. Estudio del problema

El modelo cartesiano empleado por Meyer para describir la difusión de partículas contaminantes, en un medio bidimensional Meyer (2000), está dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x,y,t)}{\partial t} &= D\nabla^2 C - \overrightarrow{V}(y)\frac{\partial C}{\partial x} - \sigma C + f(x,y,t), \\ &\qquad (x,y) \in \Omega,\ \Omega \subset \mathbb{R}^2,\ t \in (0,T], \end{aligned} \tag{3.5}$$

en donde:

- $C$: es la concetración de particulas;
- $\sigma$: representa la tasa de degradación o decaimiento de las partículas;
- $\overrightarrow{V} = V(x;y;t)$: es un campo de velocidades;
- $D$: es la difusividad de las partículas;
- $f(x;y;t)$: es una fuente (o sumidero según el caso);
- $(x;y) \in \Omega$, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ y, $t \in (0,\ T]$

Meyer considera las siguientes hipótesis simplificadoras del modelo:

1. El coeficiente de difusión $D$ es constante en todas las direcciones.
2. La degradación $\sigma$ es directamente proporcional a la concentración del contaminante.
3. El campo de velocidades $\overrightarrow{V}$ tiene una componente nula en $y$, la otra componente en dirección de $x$ depende de $y$.

La frontera $\partial\Omega$ de la región está dada por: $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ y las condiciones de frontera para este modelo son:

$$1. C|_{\Gamma_0} = 0 \quad 2. \left.\frac{\partial C}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_1} = 0 \quad 3. \left.\frac{\partial C}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_2} = kC.$$

Meyer hace una aplicación de su modelo a mares costeros, en la isla de São Sebastião (Brasil), en este estudio emplea el siguiente modelo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x,y,t)}{\partial t} &= div\left(D\nabla C - \overrightarrow{V}C\right) - \sigma C + f\left(x,y,t\right), \\ &\qquad (x,y) \in \Omega,\ \Omega \subset \mathbb{R}^2,\ t \in (0,T]. \end{aligned} \tag{3.6}$$

La condición inicial para este estudio es:

$$C\left(x,y,0\right) = C_0\left(x,y\right), \tag{3.7}$$

y las condiciones de frontera son:

$$1. - D\ \frac{\partial C}{\partial n}_{\Gamma_0} = g_0\left(x,y,t\right) \tag{3.8}$$

$$2. - D\left.\frac{\partial C}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_1} = g_1\left(x,y,t\right) \tag{3.9}$$

$$3. - D\left.\frac{\partial C}{\partial \eta}\right|_{\Gamma_2} = q\overrightarrow{V}_n C. \tag{3.10}$$

Él supone que si en (3.8) y (3.9), $g_0 = g_1 = 0$, significa que hay una parte de la frontera, por la cual no hay paso de contaminante y que hay otra parte de la frontera, que está suficientemente lejos de ella, por lo tanto, se puede considerar que hasta allá no llegará el contaminante. Para la condición 3, supone que el paso de contaminante es proporcional a la intensidad de la corriente marina.

Nuevamente, $D$ y $\sigma$ son considerados constantes, y el vector velocidad es $\overrightarrow{V} = (V_1(x,y), V_2(x,y))$.

Como el modelo empleado por Meyer(Meyer, 2000) en una superficie plana, no es lo suficientemente bondadoso para aplicarlo en el océano, dadas las diferencias geométricas de las regiones de trabajo, se hace necesario reformularlo. Para hacer la extensión del modelo, se requieren entonces, de las expresiones para el gradiente, la divergencia y el laplaciano[****] en el sistema coordenado esférico.

Las expresiones matemáticas de las derivadas ya citadas, están íntimamente ligadas al uso de los factores de escala. Esto sucede porque en el sistema coordenado cartesiano, un incremento en alguna de las variables involucradas, es proporcional a la magnitud de un desplazamiento espacial, lo que no sucede en los otros sistemas coordenados. Son entonces, los factores de escala los que permiten corregir las posibles distorsiones que se generen al pasar del sistema cartesiano a los sistemas curvilíneos. A continuación se tienen las expresiones matemáticas[*****]para el gradiente, la divergencia y el laplaciano en los sistemas curvilíneos.

▷ gradiente:

$$\nabla f = \frac{1}{h_1}\frac{\partial f}{\partial u_1} + \frac{1}{h_2}\frac{\partial f}{\partial u_2} + \frac{1}{h_3}\frac{\partial f}{\partial u_3}. \tag{3.11}$$

▷ divergencia:

$$divF = \frac{1}{h_1 h_2 h_3}\left[\frac{\partial(h_2 h_3 F_1)}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 F_2)}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 F_3)}{\partial u_3}\right]. \tag{3.12}$$

[****]Ya que éstas son las derivadas involucradas en el modelo cartesiano.

[*****]Los términos $h_i$, $i = 1, 2, 3$, son los factores de escala.

▷ laplaciano:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{h_1 h_2 h_3}\left[\frac{\partial}{\partial u_1}\left(\frac{h_2 h_3}{h_1}\frac{\partial f}{\partial u_1}\right) + \frac{\partial}{\partial u_2}\left(\frac{h_1 h_3}{h_2}\frac{\partial f}{\partial u_2}\right) + \frac{\partial}{\partial u_3}\left(\frac{h_1 h_2}{h_3}\frac{\partial f}{\partial u_3}\right)\right]. \tag{3.13}$$

## 3.1. Sistema de coordenadas esféricas

La elección del sistema de coordenadas esféricas para la extensión del modelo, se explica por su similitud con la superficie oceánica.

En el sistema de coordenadas esféricas $\rho$ denota la distancia del origen $o$ al punto $\hat{p}\ (\rho, \lambda, \phi)$, $\lambda$ es el ángulo que se forma al proyectar el vector $o\hat{p}$ en el plano $xy$ y la parte positiva del eje $x$; y, $\phi$ va a ser el ángulo que se forma entre el vector $o\hat{p}$ y la proyección del mismo en el plano $xy$. Tenemos así que la variación de estos parámetros es $\rho \geq 0$, $0 \leq \lambda \leq 2\pi$ y $-\pi/2 \leq \phi \leq \pi/2$.

Como los factores de escala en coordenadas esféricas polares son:

$$h_\rho = \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \rho}\right| = 1; \quad h_\lambda = \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \lambda}\right| = \rho\cos\phi; \quad h_\phi = \left|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi}\right| = \rho, \tag{3.14}$$

las expresiones para el gradiente, la divergencia y el laplaciano en coordenadas esféricas resultan ser:

▷ Gradiente:

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial \rho}, \frac{1}{\rho\cos\phi}\frac{\partial f}{\partial \lambda}, \frac{1}{\rho}\frac{\partial f}{\partial \phi}\right). \tag{3.15}$$

▷ Divergencia:

$$divF = \nabla \cdot F = \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial\left(\rho^2 F_\rho\right)}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho\cos\phi}\frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda} + \frac{1}{\rho\cos\phi}\frac{\partial\left(\cos\phi F_\phi\right)}{\partial \phi}. \tag{3.16}$$

▷ Laplaciano:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho^2\frac{\partial f}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2\cos^2\phi}\frac{\partial}{\partial \lambda}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2}\right) + \frac{1}{\rho^2\cos\phi}\frac{\partial}{\partial \phi}\left(\cos\phi\frac{\partial f}{\partial \phi}\right). \tag{3.17}$$

# 4. Extensión del modelo de difusión

El interés del presente trabajo es mostrar como se puede expresar la difusión de partículas sobre la superficie esférica. Para esto, se tienen en cuenta dos aspectos: primero, considerar inicialmente una esfera de radio (1), lo que implica que las variaciones a lo largo del radio esférico serán nulas y por lo tanto no aparecerán en la ecuación que modela la difusión de partículas en la superficie esférica. La segunda es que debido a que $\rho = 1$, la difusión de partículas estará determinada por las variaciones angulares $\lambda$ y $\phi$ de las coordenadas esféricas, como también de la velocidad de la corriente marina, de la reacción de las partículas con el medio y de la existencia de una posible fuente o sumidero de partículas.

Teniendo en cuenta los términos para la degradación y generación neta de las partículas, como también la influencia de la velocidad del fluido, se tiene entonces, que el modelo bidimensional, extendido en la superficie esférica, queda expresado como:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C(x,y,t)}{\partial t} \quad = \quad & D\left[\frac{1}{\cos^2\phi}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2}\right) + \frac{\partial^2 C}{\partial \phi^2} - \tan\phi \frac{\partial C}{\partial \phi}\right] \\
& - \left[\frac{V_1}{\cos\phi}\frac{\partial C}{\partial \lambda} + V_2 \frac{\partial C}{\partial \phi}\right] - \sigma C + f\left(\lambda, \phi, t\right), \\
& (\lambda, \phi) \in \Omega, \Omega \subseteq S^2 \text{ y } t \in [0, T], \\
& \partial\Omega = \phi_0 \cup \lambda_0 \cup \phi_1 \cup \lambda_1,
\end{aligned} \tag{4.18}$$

en donde:

- La difusividad $D$ es constante, en cualquier dirección.
- El decaimiento $\sigma$ es directamente proporcional a la concentración del contaminante y es considerado constante.
- La velocidad $\overrightarrow{V}$ de la corriente marina varía en el espacio,

$$\overrightarrow{V} = \left(V_1\left(\lambda, \phi\right), V_2\left(\lambda, \phi\right)\right).$$

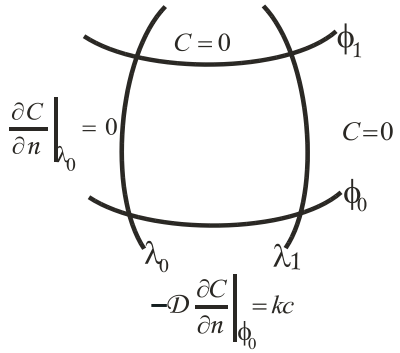


Figura 1: Condiciones de frontera

- El término $f$ es el mismo que en el modelo tridimensional cartesiano.

Las condiciones iniciales y de frontera para el modelo están dadas por:
Condición inicial:

$$C(\lambda, \phi, 0) = C_0(\lambda, \phi) \tag{4.19}$$

Condiciones de frontera:

$$1.C\Big|_{\phi_1} = 0 \quad 2.C\Big|_{\lambda_1} = 0 \quad 3.\frac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\lambda_0} = 0 \quad 4. - D\frac{\partial C}{\partial \eta}\Big|_{\phi_0} = kC. \tag{4.20}$$

Las condiciones iniciales 1 y 2, en(4.20) significan que están suficientemente lejos de la región de concentración de contaminante, por lo que por ahí no alcanzarán a difundirse partículas contaminantes. La tercera condición expresa que si la velocidad de la corriente marina, va en esa dirección, no habrá difusión de contaminante, en dirección opuesta a dicha velocidad; finalmente, la última condición nos indica que el paso de contaminante, es proporcional a la cantidad de contaminante presente. La gráfica de 1 ilustra la situación.

Las dos primeras condiciones son las de Dirichlet, la tercera es la de Von Neumann y la cuarta corresponde a una condición de Robin.

# 5. Confrontación de los modelos

Los modelos son confrontados por medio de dos simulaciones: una para el modelo planteado por Meyer y otra correspondiente al modelo extendido a la superficie esférica. Las simulaciones fueron programadas en Matlab 6.5, utilizando el método explícito de diferencias progresivas.

Los datos para las simulaciones se obtienen al tomar como partícula contamiante el petróleo, los valores para el coeficiente de difusión, coeficiente de degradación y campo de velocidades fueron sugeridos por Meyer.

## 5.1. Análisis de resultados de las simulaciones

Considerando además de la parte difusiva de ambos modelos, los términos de degradación, campo de velocidades y generación neta de partículas, se obtienen los siguientes resultados:

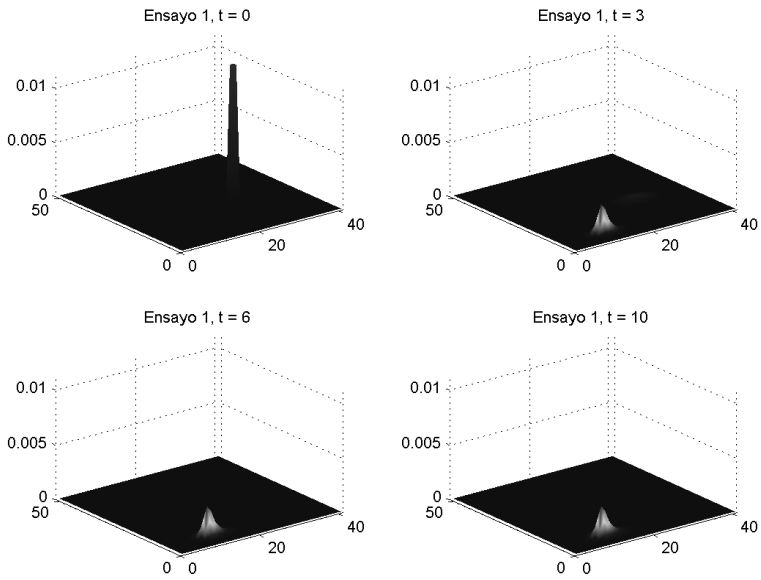


Figura 2: Difusión cartesiana

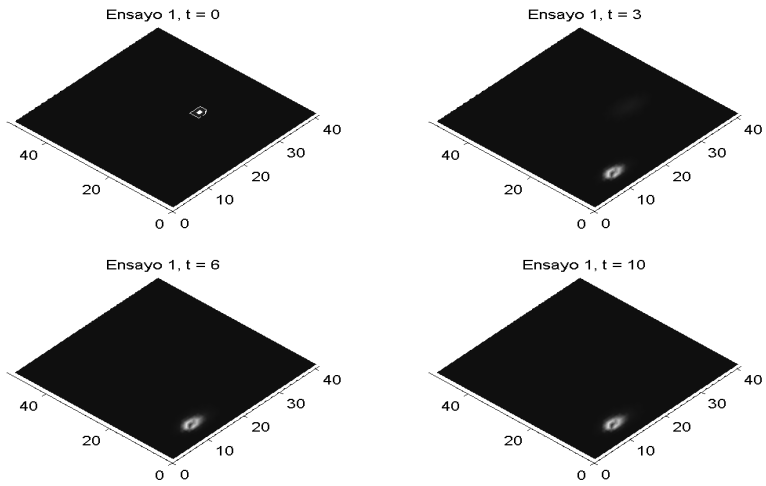


Figura 3: Difusión cartesiana vista superior

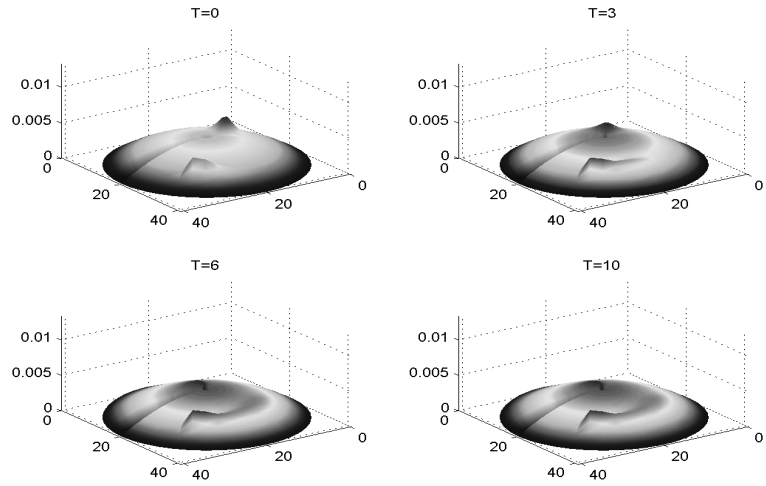


Figura 4: Difusión esférica

Para el modelo cartesiano se puede observar que la concentración inicial rápidamente se difunde por el medio, mientras la fuente va aumentando poco a poco, en tanto que para el modelo esférico las gráficas muestran como la concentración inicial se va difundiendo y también va siendo transportada por el campo de velocidades, es decir, hay difusión y advección, igual situación se

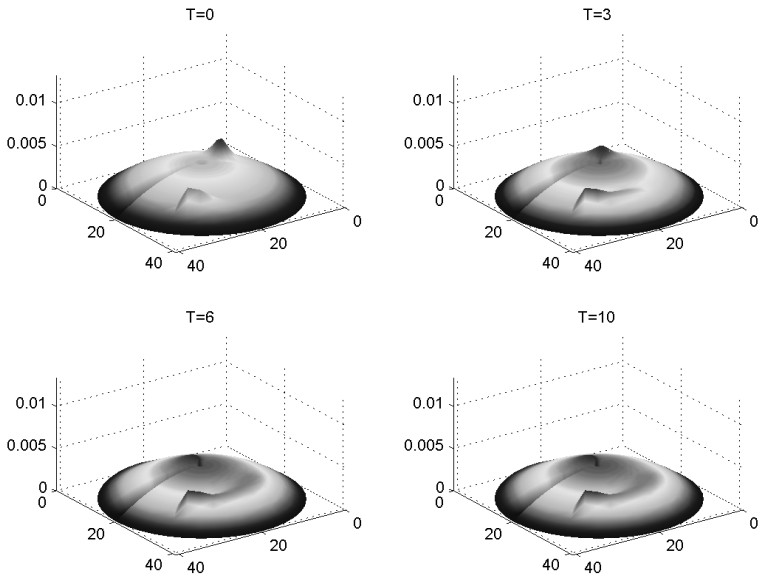


Figura 5: Difusión esférica vista superior

puede apreciar para la fuente neta de generación de partículas contaminantes.

Esto permite afirmar que existe una diferencia significativa entre las simulaciones de los dos modelos, por lo que se justifica la realización del presente trabajo.

# 6. Resultados

1. El modelo obtenido es más aproximado a la realidad que el modelo inicial, por cuanto tiene presente la curvatura de la tierra, esto gracias a la influencia de los factores de escala.

2. Existe una diferencia al emplear los dos modelos en la superficie esférica, esto se puede apreciar en los resultados gráficos de las simulaciones hechas.

3. Aunque el modelo presente una discontinuidad en $\phi = \pi/2,$ (en los

polos).

4. El trabajo deja la posibilidad de seguir profundizando en el modelo extendido, en los siguientes aspectos:

   *a*) Puede pensarse en tomar $\rho$ diferente de 1 y analizar los resultados.

   *b*) Estudiar la difusión de partículas en las tres variables espaciales: $\rho$, $\lambda$ y $\phi$.

   *c*) Tomar a $D$ y $\sigma$ variando en espacio y en el tiempo.

# Referencias

Burden, R. J. y Faires, J. D. (1985). *Análisis Numérico.* Grupo Editorial Iberoaméricana.

Cranck, J. (1964). *The Mathematics of Difusion.* Oxford at the Clarendon Press.

Departamento de Física Aplicada III (2003/2004). Sistemas de coordenadas ortogonales. Universidad de Sevilla, Sevilla, España.

Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology.* Random-House, N. York.

James, W. R. y *et al.* (1982). *Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa.* Lymusa.

Meyer, J. F. C. A. (2000). Modelos matemáticos de impacto ambiental: uma visão introdutória. Notas de aula, IMECC–UNICAMP, Campinas/Sp, Brasil.

Murray, J. D. (1991). *Mathematical Biology.* Springer, N. York, second edition.

Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models.* Springer, N. York.

Pita Ruiz, C. (1995). *Cálculo Vectorial.* Prentice Hall, México.