

# B i O Matemática

17



IMECC - UNICAMP

Campinas 2007 ISSN 1679-365X



Acará-açu —  $Astronotus\ spp$ — Foto: G.L. Diniz

#### Conselho Editorial

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

#### Prefácio:

"A água, quando é muito pura, não tem peixes ..." T'sai Ken T'an.

Dentre as muitas frases e bordões que são trombeteados em nossos ouvidos nestes tempos de altos decibéis no meio acadêmico e na política educacional, os mais comuns e insistentes têm sido aqueles que atingem seu clímax gozoso na quase impronunciável palavra "interdisciplinaridade".

Considerando-se que, de fato, o tema a que corresponde este termo está em voga nos países que lideram a produção científica e, levando-se em conta a fixação cultural do Brasil no poder místico e pagão da "palavra repetida", (somos o país do "abracadabra"), nada disto deve nos espantar. Mas, para piorar, algumas trombetas da "interdisciplinaridade" poderiam ser interpretadas mais como um sinal de debandada do que de avanço e, de fato, muitos dentre os mais entusiasmados pregadores desta nova (n-ésima) onda, ou fé, acreditam pouquíssimo no que dizem enquanto aproveitam vistosamente da sua premeditada pose. Não é de todo incomum, por exemplo, ver bons projetos de pesquisa em Biomatemática serem rejeitados por caírem na fresta (larga) entre os vetustos e focalizados comitês de Biologia e Matemática das agências financiadoras, ou, o trabalho de um profissional nesta mesma área ser taxado de "alternativo", no pior sentido da palavra, durante avaliações acadêmicas.

Mas, esta é uma dificuldade política esperável diante da divisão de um bolo financeiro e, na verdade, é bem prevista pela famosa

Lei de (Max) Planck: "Novas teorias não são facilmente aceitas no seu nascedouro, se elas prevalecem, é porque a geração contemporânea a elas desaparece".

A história e a genética de populações há muito registram que a interfertilização aprimora as raças enquanto que a endogenia não raro leva à degenerescência e à idiotice, uma observação que tem mais do que um sentido metafórico quando relacionada ao desenvolvimento científico, pois ambos os casos se baseiam em princípios gerais comuns. Já, a frase epígrafe atribuída ao venerável *Tsai Ken Tan*, típica da sutileza e concisão oriental, esta sim, é uma metáfora luminosa para a Matemática, e particularmente adequada à Biomatemática.

Dentre as ciências hifenadas, que surgiram em profusão desde as últimas décadas do século XX, a Bio-Matemática têm uma característica especial, não menos por tratar do assunto que mais nos deve interessar enquanto vivos, mas também por ter passado, rapidamente, de um mero e secundário ramo da Biologia, a uma posição especial nas ciências naturais, o que é fartamente comprovado pelo desenvolvimento da Matemática Biológica, onde as idéias típicas da Biologia se imbricam com a Matemática em campos, ainda toscos mas viçosos, como os algoritmos genéticos, as redes neurais, a sociobiologia ("ant-colony algorithm") e muitos ainda por florescer. Para sintetizar este fato, nada mais elegante e definitivo do que o aforismo de Joel E. Cohen-(Lab. of Populations-Rockefeller Univ.): "Mathematics is Biology's next Microscope, Only Better:Biology is Mathematics' Next Physics, Only Better".

 ${\cal O}$  que mais se poderia desejar de uma "interdisciplinaridade" do que esta notável interfertilização?

A direção deste desenvolvimento não é de todo surpreendente se lembrarmos que nenhum dos líderes da moderna Biomatemática (Ronald Ross, W. McKendrick, James Murray, Lee Segel, Simon Levin, Robert May, Arthur Winfree e outros) foi um matemático "puro" arrependido a procura de um novo "play-ground" ou um biólogo com matofobia, antes, eram cientistas no sentido amplo da "filosofia natural", interessados primeiramente em fenômenos biológicos ao mesmo tempo que aptos com as técnicas matemáticas apropriadas para o seu estudo. A Biomatematica que eles nos legaram é dominada pelo conceito de populações, de íons a sapiens,

em que os indivíduos não são principalmente partículas materiais, mas incluem organismos, cada um deles com um rico comportamento. Isto significa que temos diante de nós problemas muito mais difíceis do que aqueles que a Física Teórica encontrou. (Murray Gell-Mann – Premio Nobel de Física: "Imagine how hard Physics would be if electrons could think.") e isto implica que na formação de biomatemáticos não se pode ter uma perna curta na Matemática. A continuação desta notável tradição, que não toma conhecimento de fronteiras artificiais e, não as cria para os outros, é o que se impõe à nova geração de cientistas.

A Biomatemática que não tem por finalidade o estudo de uma questão biológica relevante ou, que se desvia das teorias matemáticas necessárias e utiliza as que são dispensáveis, vai perecer naturalmente, mas, é uma pena que se sacrifique tanto esforço, idealismo e, juventude a estes deuses de pés de barro.

Voltando a Tsai Ken Tan, lembremos mais uma vez, que a língua portuguesa é, talvez, a única em que o termo <u>pesquisar</u> é etimologicamente (e, mui apropriadamente) derivado da palavra latina "<u>piscare</u>" <u>— "pescar</u>", ao contrário do inglês, francês, e mesmo do italiano que tem por base a palavra "<u>circare</u>" <u>— "cercar</u>", e do vizinho espanhol. Portanto, juntemos o útil ao agradável, a fome e a vontade de comer, nas piscosas águas da Biomatemática.

Wilson Castro Ferreira Jr. Campinas, 23 de Agosto de 2007.

### Índice

Considerations to continue researches concerning agricultural products drying process through numerical simulation, M. Amendola1
Sistema neuro-fuzzy para prognóstico de câncer de próstata, M. J. P. Castanho11
Programação matemática fuzzy aplicada a problemas de poluição do ar, L. A. Pinto Cantão & R. F. Cantão21
Um modelo diferencial de recrutamento de formigas, R. A. Assis & L. M. E. Assis35
Sobre incertezas em modelos epidemiológicos do tipo SIS, L. C. Barros, M. B. F. Leite, R. Z. G. Oliveira & R. C. Bassanezi47
Curvas Padrões de Tratamento do HIV, R. S. M. Jafelice & R. C. Bassanezi55
Padrões de Turing em um Sistema Presa-Predador, L. A. D. Rodrigues, D. J. Seidel & D. C. Mistro65
Estudo da poluição por esgoto num trecho urbano de rio, G. L. Diniz & S. A. F. Alegria73
Aplicação de Redes MLP na Predição de Estrutura Secundária de Proteínas - PREDCASA, L. P. B. Scott, J. Chahine & J. R. Ruggiero87
Modelo de von Bertalanffy generalizado aplicado ao crescimento de suínos de corte, L. Oliveira, A. J. V. Brandão & R. C. Bassanezi101
Estimativa do coeficiente de difusão da Influenza Aviária (H5N1), J. M. Rodrigues & J. F. C. A.

## Considerations to continue researches concerning agricultural products drying process through numerical simulation

Mariangela Amendola<sup>1</sup>, FEAGRI – UNICAMP, 13.081-970, Campinas/SP, Brazil Phone: (55) 19 35211065, Fax: (55) 19 35211004

Abstract This work discusses the arguments that lead to the implementation choice between two finite difference schemes to solve the differential equation that models a specific drying process of agricultural product. The main purpose of using the methodology of mathematical modeling and numerical simulation is to compare its theoretical results with experimental data, in the least square method sense, in order to be able to identify thermal properties of the product. There are considered experimental data obtained from the soybean drying process and the one-dimensional mathematical model based on Fourier's law, under initial and boundary conditions according to the conducted experiment. All computations were implemented with MATLAB 6.5. As the explicit scheme needs to be carried out satisfying the stability criteria, it is around 46 times slower than the implicit scheme for the same temporal mesh; 98 when the Crout Method is used; and 980 times when using Crout and a larger temporal mesh— allowed only for the implicit scheme. To continue drying researches using other products we recommend the implicit scheme, mainly due to the number of simulations required.

**Keywords**: Implicit scheme; Explicit scheme; Thermal properties; Soybean.

#### 1. Introduction

Knowing the drying kinetics as well as the parameters and thermal properties that characterize the drying process of agricultural products has become important to support the application of technologies to assure these products conservation. This experimental research area has shown improvements all over the world, as can be found in specific literature for post-harvest technology.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>amendola@agr.unicamp.br

Particularly at College of Agricultural Engineering at University of Campinas, located in Brazil and known as FEAGRI/UNICAMP, pioneer-research work has been carried out using also applied mathematical as an important tool by Ito et al. (2002). In this research they used one algorithm based on the explicit scheme of the finite differences method, which was implemented with MATLAB 6.1, to solve the differential equation based on Fourier's law according to the initial and boundary condition based on a specific experimental procedure performed previously.

Despite the obtained values of the thermal property of the agricultural product dried, the used scheme requires a complementary extern algorithm to assure the stability criteria, which was taken according to the same orientation that appear in Pirozzi e Amendola (2005).

This request, as it is known, leads to more computational effort than that spent when using the implicit scheme, which has been used to similar researches (e.g. Amendola e Teruel (2002); Amendola (2003); Amendola e Pirozzi (2004); Amendola (2004); Amendola e Teruel (2005); Amendola e Pirozzi (2005); Amendola e Sarria (2005); Amendola e Queiroz (2005); Amendola (2005)).

Thus, searching for methodologies to improve this research, following the same investigation performed to the precooling process (Amendola e Pirozzi (2005)), we discuss the arguments that lead to the implementation choice of these two kinds of finite difference scheme: explicit and implicit, and also to the adequate choice of some included algorithms.

#### 2. Material and methods

The experimental data considered were selected from those recorded from the soybean drying experimental process as described in Ito et al. (2003).

To conduct this experiment a cylindrical equipment was constructed which allows the drying product be placed in such a way that the process occurs in the spatial domain defined between two cylinders with radii  $R_1 = 0.013$  [m] and  $R_2 = 0.049$  [m], subject to a heat source, qf = 393.7 [W/m<sup>2</sup>], placed at its central axis.

For a certain height of the equipment and at four positions along this spatial domain the values of soybean temperature, T [°C], were recorded along the time, t [s], approximately at each 100s during 6000s.

The following fixed parameters of the process or product were considered: initial temperature  $T_0 = 23.1$  [°C], density = 1180 [kg/m³] and heat capacity  $C_p = 1970$  [J/kg°C].

The conductivity thermal value, k [W/m°C], is the unknown of this investigation. For this product it can be considered as belonging to the interval K = [0.1, 0.3], as seen in the literature.

To find the best k value using this theoretical methodology, different values for k must be used in the mathematical model that describes the heat transfer process, perform the simulation of the referred process and compare the corresponding results, in the least square sense, with the experimental data. This must be carried out varying these k values untill the best residual value is reached.

The mathematical model associated to this specific process of heat transfer is the same previously established in Ito et al. (2002), which is based on the equation of Fourier's second law, one-dimensional, in cylindrical coordinates, under initial and boundary conditions based on the referred experimental procedure:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho C_p r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{r \partial T}{\partial r} \right), \quad R_1 < r < R_2$$

$$T(r, 0), T_0 \; ; \quad r \in [R_1, R_2]$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} (R_1, t) = qf$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} (R_2, t) = 0$$

The numerical simulation must be carried out according to some method in order to approximate the temperature values, T = T(r, t), at points of the spatial domain and along the time.

To use both finite difference schemes, the following convention will be adopted:

$$T_j^i = T(i\Delta t, j\Delta r), \text{ for } j = 1, \dots N_x \text{ and } i = 1, \dots N_t;$$

where:

 $\Delta r$  is the spatial mesh inside the product;  $\Delta t$  is the temporal mesh of the process;  $N_x$  is the number of points in the spatial mesh and

 $N_t$  is the number of integrations carried along the time.

The analysis of the spatial mesh size influence must be carried out, and to use the explicit scheme a known stability criteria must be observed.

The explicit and implicit schemes we have used are defined respectively by the following expressions:

$$T_j^i = f_0 \left( 1 - \frac{\Delta r}{r(j)} \right) T_{j-1}^{i-1} + \left( f_0 \left( -2 + \frac{\Delta r}{r(j)} \right) + 1 \right) T_j^{i-1} + f_0 T_{j+1}^{i-1}$$

$$f_0 \left( 1 - \frac{\Delta r}{r(j)} \right) T_{j-1}^i + \left( f_0 \left( -2 + \frac{\Delta r}{r(j)} \right) - 1 \right) T_j^i + f_0 T_{j+1}^i = -T_j^{i-1}$$

where:

$$f_0 = \text{Fourier number} = \frac{k}{\rho C_p} \left( \frac{\Delta t}{\Delta r^2} \right) [].$$

The initial condition is:

$$T_i^1 = T_0, \quad i = 1, \dots N_x,$$

where  $T_0$  is the initial temperature [°C].

The boundary conditions are:

$$T_1^i = T_2^i + b, \quad i = 1, \dots N_t.$$

where:

$$b = \frac{qf \times \Delta r}{k}.$$

and

$$T_{N_x}^i = T_{N_x-1}^i, \quad i = 1, \dots N_t.$$

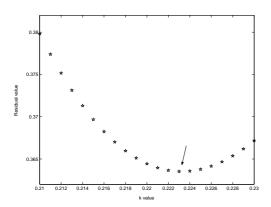
The algorithms were implemented with MATLAB 6.5.

#### 3. Results and discussion

The spatial mesh size can be taken as having 65 points and the stability criteria was observed, both as established to the case of explicit scheme as presented in Ito et al. (2002).

In Figure 1 the residual values are shown as a function of the value obtained for k when using the explicit scheme for k varying in subintervals of K = [0.1, 0.3] established according to Bossarino et al. (2005) to automatically find the thermal property only at the central position. This was the selected position just because it is where the fit results show the worst agreement in all the cases studied by Ito et al. (2003). In the present case the best value k is k = 0.223 [W/m°C], which is associated to the residual value of 0.3480.

The experimental data and the numerical results obtained from both of these schemes for the same best k value are shown in Figure 2.



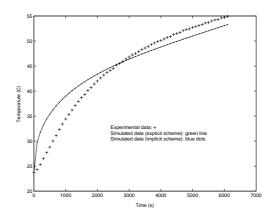


Figure 1: Residual values as a function of k values in [0.21, 0.23].

Figure 2: Experimental data and numerical results obtained using the explicit scheme and the implicit scheme, both to the best k value.

Despite the fact that the best value for k reached through the implicit scheme is, as expected, the same as that obtained through the explicit scheme, some considerations referring to the computational time must be reinforced.

Table 1 shows the computational time required for each numerical scheme

according to the results in Amendola (2005). These results reveal disagreement with the observations pointed out in Ito et al. (2004) as regards to the computational effort, once the explicit scheme spent around 46 times the time spent by the implicit scheme for the same temporal mesh.

Furthermore Table 2 shows the computational time required for the implicit scheme implemented according to the classical literature, which means that the incorporation of improvements to the algorithm based on the implicit scheme, specially using the Crout Method to solve the linear system (Richtmyer e Morton (1967)) and allowing a coarse temporal mesh.

As the total investigation involves several simulations till the best value of the thermal property is reached at each point along the radii of the equipment, even knowing that the implicit scheme and Crout Method are avoided by most beginner researchers, due to its perceived complexity, the results presented in Table 2 show that this composed scheme is adequate to continue this kind of research.

Table 1: Kind of scheme and computational time

Scheme	Time(s)
Explicit	$\sim 98$
Implicit	$\sim 2$

Table 2: Implicit scheme and computational time

Implicit scheme	Time (s)
Crout method to same temporal mesh	$\sim 1$
Crout method to a coarser temporal mesh	$\sim 0.1$

#### 4. Conclusion

The explicit scheme is around 46 times slower than the implicit scheme, for the same temporal mesh; 98 when as compared to the Crout method; and 980 times when compared to the Crout Method and a larger temporal mesh.

The numerical simulation methodology using the implicit scheme must be reinforced as the adequate methodology for the completion of this kind of investigation not only to this agricultural product and/or drying process.

#### Acknowledgements

The author would like to thank the scientific committee of the Eighth U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM8), Austin-TX, for the opportunity to discuss this research.

#### References

- Amendola, M. (2003). Analysis of the parameters associated to numerical simulation of the heat transfer process in agricultural products. in "International Workshop on Information Technologies and Computing Techniques for the Agro-Food Sector", Barcelona.
- Amendola, M. (2004). Minicurso: Sistemas de suporte à decisão para processos agrícolas: simulação numérica de processos de transferência de calor. páginas 112–138. in "Congresso Temático de Dinâmica e Controle da SBMAC", Ilha Solteira.
- Amendola, M. (2005). Considerations to continue researches in drying process numerical simulation of agriculture products at feagri/unicamp. CD ROM. in "National Congress on Computational Mechanics", Austin.
- Amendola, M. e Pirozzi, D. C. Z. (2004). Researches considerations in precooling and numerical simulation for agriculture products at feagri/unicamp. página 71. in "International Post Harvest Symposium", Verona.
- Amendola, M. e Pirozzi, D. C. Z. (2005). Researches considerations in pre-cooling and numerical simulation for agricultural products at feagri/unicamp. *ISHS Acta Horticulturae*, 682:1599–1604.
- Amendola, M. e Queiroz, M. R. (2005). Mathematical modeling and numerical simulation of the drying process to identify the mass diffusion coefficient of bananas. in "Iberian Latin-American congress on Computational methods in Engineering-CILAMCE", Guarapari.

Amendola, M. e Sarria, S. D. (2005). Mathematical modeling and numerical simulation of the forced air precooling process of fig fruit (ficus carica l.) roxo de valinhos. in "Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering-CILAMCE", Guarapari.

- Amendola, M. e Teruel, B. J. (2002). Uso de un esquema implícito y de splines para la simulación numérica del proceso de enfriamiento de naranjas. página 141. in "Congreso Iberoamericano de Tecnología de Poscosecha y Agroexportaciones", Chile.
- Amendola, M. e Teruel, B. J. (2005). Esquema implícito e de splines para a simulação numérica do processo de resfriamento de frutas esféricas. Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental, 9:78–82.
- Bossarino, D., Amendola, M., e Gaspar, C. R. (2005). Simulação computacional para a determinação de propriedades de grãos submetidos a um tipo de secagem. in "Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional", São Paulo.
- Ito, A. P., Amendola, M., e Park, K. J. (2002). Construção e avaliação de um sistema de determinação de condutividade e difusividade térmica em regime transiente. páginas 141–142. in "Congreso Iberoamericano de Tecnología de Poscosecha y Agroexportaciones", Chile.
- Ito, A. P., Amendola, M., e Park, K. J. (2003). Determinação da condutividade térmica de grãos de soja. Revista Ibero-americana de Tecnología Poscosecha, 5:82–85.
- Ito, A. P., Park, K. J., e Ardito, T. H. (2004). Application of an explicit finite difference model to obtain thermal diffusivity of soybean. páginas 613–620. in "International Drying Symposium IDS 2004", São Paulo.
- Pirozzi, D. C. Z. e Amendola, M. (2005). Modelagem matemática e simulação numérica do resfriamento rápido de morango com ar forçado. *Engenharia Agrícola*, 25:222–230.
- Richtmyer, R. D. e Morton, K. W. (1967). Difference methods for initial value problems. Interscience, New York.

### Sistema neuro-fuzzy para prognóstico de câncer de próstata

Maria José de Paula Castanho<sup>1</sup> DEMAT – UNICENTRO, 85.010-990, Guarapuava-PR.

Resumo. Modelos utilizando redes neurais e sistemas baseados em regras fuzzy têm surgido como uma alternativa aos modelos tradicionais em diagnóstico médico. Neste artigo, é apresentado um sistema híbrido, ANFIS (Adaptative-Network-Based Fuzzy Inference System), que combina a capacidade de aprendizagem das redes neurais com a facilidade de interpretação dos sistemas fuzzy, para prognóstico de câncer de próstata. Para avaliar o desempenho do sistema, foi construída a curva ROC (Receiver Operating Characteristic) utilizando dados de 190 pacientes submetidos à prostatectomia radical. Os sistemas neuro-fuzzy são uma boa opção para o desenvolvimento de sistemas de diagnóstico quando se dispõe de um grande número de dados experimentais.

Palavras-chave: ANFIS, câncer de próstata; prognóstico; redes neurais; sistemas baseados em regras fuzzy.

#### 1. Introdução

Atualmente, segundo o Instituto Nacional do Câncer - INCA, o câncer de próstata tem a segunda taxa mais elevada tanto na mortalidade quanto na incidência entre as neoplasias malignas masculinas. A Sociedade Americana de Câncer estima uma taxa de cura de 90% quando a doença está confinada na próstata e a glândula inteira é removida através da prostatectomia radical. Porém, quando o tumor apresenta metástase, o objetivo deixa de ser a cura, e passa a ser o prolongamento da vida e o alívio dos sintomas.

Partin e colaboradores (Partin et al., 1997) afirmam que aproximadamente 60% dos pacientes diagnosticados clinicamente como portadores de tumor confinado à próstata, na realidade, apresentam doença em estágio mais avançado, que

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>zeza@unicentro.br

10 Castanho

já não pode ser eliminada por cirurgia ou radiação. Deduz-se disto que a avaliação correta do estágio é muito importante porque os riscos das terapias curativas intensivas (incontinência urinária, impotência, perda de densidade óssea entre outros) justificam-se apenas se o tratamento tiver razoável chance de sucesso.

Modelos utilizando redes neurais e sistemas baseados em regras fuzzy têm surgido como uma alternativa aos modelos tradicionais em diagnóstico médico. Particularmente, no câncer de próstata podemos citar alguns estudos: Naguib e Sherbet (Naguib e Sherbet, 1997) apresentam uma aplicação de redes neurais na pesquisa do câncer de próstata e mama. Em 1998, Naguib e colaboradores (Naguib et al., 1998) utilizam redes neurais para analisar a resposta do paciente ao tratamento do câncer de próstata. Partin e colaboradores (Partin et al., 1997) utilizam uma análise de regressão multinomial log-linear para estimar a probabilidade do câncer de próstata estar confinado no órgão, ou não, construindo tabelas de probabilidade. Essas tabelas foram atualizadas em 2001 (Partin et al., 2001). Lorenz e colaboradores (Lorenz et al., 1997) utilizam uma classificação neuro-fuzzy para detecção de câncer de próstata em imagens ultrasonicas. Castanho e colaboradores (Castanho et al., 2003) desenvolvem um sistema especialista fuzzy para prever o estágio patológico do câncer de próstata usando as variáveis pré-operatórias: nível de PSA, grau de diferenciação do tumor e estado clínico. Han e colaboradores (Han et al., 2001) utilizam redes neurais para predizer o estágio patológico do câncer de próstata e comparam seus resultados com os obtidos por meio dos nomogramas de Partin encontrando melhores resultados.

Todo modelo desenvolvido tem limitações. As redes neurais são ótimas em reconhecimento de padrões, porém não são boas em explicar como obtêm suas respostas. Os sistemas fuzzy podem raciocinar com informações imprecisas, seus resultados são facilmente explicáveis, mas não podem adquirir automaticamente as regras que utilizam para produzir os resultados. Essas limitações são suprimidas com a combinação dessas técnicas formando um sistema híbrido. Nesse artigo é desenvolvido um sistema híbrido, neuro-fuzzy, para auxiliar o médico no prognóstico do câncer de próstata.

#### 2. Sistema Neuro-Fuzzy

Sistemas neuro-fuzzy são arquiteturas, que utilizam sistemas fuzzy para representar e processar o conhecimento de forma clara e de fácil interpretação, e que aproveitam a capacidade de aprendizado das redes neurais.

Para desenvolver o modelo, será utilizado o sistema ANFIS (ADAPTATIVE-NETWORK-BASED FUZZY INFERENCE SYSTEM (Shing e Jang, 1993)) que é uma classe de redes neurais adaptáveis funcionalmente equivalente a um sistema de inferência fuzzy. Aplica uma combinação do método de mínimos quadrados e do método do gradiente descendente (backpropagation) para treinar os parâmetros das funções de pertinência de forma a minimizar um erro de medida determinado.

O mecanismo de inferência fuzzy utilizado é do tipo Takagi-Sugeno-Kang (Barros e Bassanezi, 2006), confome esquematizado na Figura 1. A rede neural híbrida

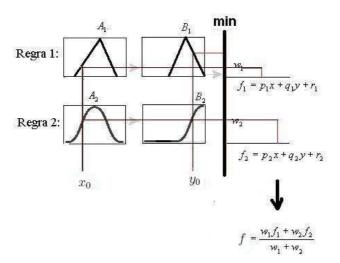


Figura 1: Mecanismo de inferência do tipo Takagi-Sugeno-Kang

que representa esse tipo de inferência é uma rede adaptável com 5 camadas como ilustrada na Figura 2. Os nós que têm parâmetros a serem adaptados são represen-

12 Castanho

tados por quadrados enquanto os nós fixos são circulares. O conjunto de parâmetros de uma rede neural adaptável é a união do conjunto de parâmetros de cada nó adaptável.

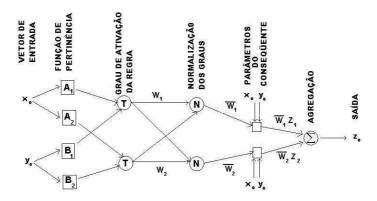


Figura 2: Rede adaptável baseada em sistemas de inferência fuzzy

Nessa estrutura, todos os nós da mesma camada têm a mesma função. Cada camada representa uma parte do mecanismo de inferência conforme descrito a seguir:

Camada 1: Cada nó nesta camada tem a seguinte função:  $\phi_i^1 = \mu_{A_i}(x)$  na qual x é a entrada do nó i, e  $A_i$  é o termo lingüístico associado com esta função. Em outras palavras,  $\phi_i^1$  é a função de pertinência de  $A_i$  e especifica o grau com o qual a variável de entrada x satisfaz o termo lingüístico  $A_i$  associado a este nó. Qualquer função contínua, como triangular ou trapezoidal ou em forma de sino, pode ser usada como função de nó desta camada. Os parâmetros desta camada são chamados parâmetros do antecedente.

Camada 2: Cada nó calcula o grau de ativação da regra associada. A saída dos neurônios é:

$$\omega_i = A_i(x_0) * B_i(y_0) = A_i(x_0) \wedge B_i(y_0)$$

Ambos os nós estão representados com uma letra T na Figura 2 porque eles podem representar qualquer t-norma para modelar a operação lógica and.

Camada 3: Cada nó desta camada está representado por uma letra N na Figura 2, para indicar a normalização dos graus de ativação. A saída do neurônio é o grau de ativação normalizado da regra i.

$$\overline{\omega} = \frac{\omega_i}{\omega_1 + \omega_2},$$

para i = 1, 2.

Camada 4: Cada nó desta camada tem a função

$$\phi_i^4 = \overline{\omega_i} f_i = \overline{\omega_i} (p_i x + q_i y + r_i)$$

onde  $\overline{\omega_i}$  é a saída da camada 3, e  $\{p_i, q_i, r_i\}$  é o conjunto de parâmetros. Os parâmetros desta camada são chamados parâmetros do consequente.

Camada 5: O nó simples desta camada calcula a saída total do sistema como a soma de todas as entradas individuais deste nó:

$$\phi_i^5 = \sum_i \overline{\omega_i} f_i.$$

A partir da arquitetura posposta (Figura 2) pode-se observar que, dados os parâmetros do antecedente, a saída pode ser expressa como uma combinação linear dos parâmetros do consequente.

#### 3. Aplicação em Câncer de Próstata

O objetivo é construir um sistema neuro-fuzzy para classificar pacientes com câncer confinado na próstata e pacientes com câncer não confinado.

Tabelas de probabilidade são utilizadas pelos médicos para predizer o estágio do câncer. A mais conhecida foi elaborada por Partin e colaboradores (Partin et al., 1997) em 1997 e atualizada em 2001 (Partin et al., 2001). Uma regressão multinomial log-linear foi efetuada utilizando as variáveis pré-operatórias: estado clínico, nível sérico de PSA (antígeno prostático específico), e grau de diferenciação das células na biópsia, dado pelo escore de Gleason, para encontrar a probablidade do estágio do câncer que pode estar confinado no órgão, ter penetração capsular, ter envolvimento de vesículas seminais, ou ter envolvimento de linfonodos pélvicos.

14 Castanho

As variáveis utilizadas por Partin são incertas: o estado clínico é determinado pelo exame digital retal (DRE) que depende da percepção e experiência do médico; o nível sérico de PSA está relacionado com o estágio patológico, embora altos níveis de PSA nem sempre estão associados com estado patológico avançado e baixos valores não necessariamente implicam em câncer órgão-confinado; o escore de Gleason é atribuído por um patologista após a análise do material retirado na biópsia que é heterogêneo, portanto um valor preciso é atribuído para descrever uma situação imprecisa.

A teoria dos conjuntos fuzzy é apropriada para trabalhar com essas incertezas. Um especialista pode auxiliar na construção das funções de pertinência e das regras fuzzy, porém, se há disponibilidade de dados poderá ser utilizado um algoritmo de aprendizado: as redes neurais.

Como os médicos utilizam tabelas de probabilidade para auxiliar no diagnóstico e não havia banco de dados disponível, foi construído um banco sintético com as informações fornecidas pelas tabelas de probabilidade de Partin (Partin et al., 1997). Cada paciente tem como dados pré operatórios:

- estado clínico, classificado de acordo com a Tabela TNM em: T1 (tumor não palpável), T2a (palpável, circunscrito a menos da metade de um lobo), T2b (palpável, afetando mais da metade de um lobo, mas não os dois), T2c (palpável, tumor comprometendo os dois lobos), T3 (extensão além da cápsula prostática). Além desse estágio, o tumor certamente está não confinado.
- nível de PSA: até 4 ng/ml é considerado normal, de 4 a 10 ng/ml é levemente elevado, entre 10 e 20 ng/ml é moderadamente elevado e um nível acima de 20 ng/ml é considerado altamente elevado.
- escore de Gleason: graus 2 a 4 são tumores bem diferenciados que têm comportamento menos agressivo, graus 5 e 6 são moderadamente diferenciados, grau 7 é considerado pouco diferenciado e graus 8 a 10 são indiferenciados, mais agressivos.

Com base nesses dados, tem-se a probabilidade do paciente estar num dos seguintes estágios: câncer confinado no órgão, penetração capsular, envolvimento de vesículas seminais ou envolvimento de linfonodos pélvicos.

Para a obtenção do número e do tipo de funções de pertinência que melhor descrevem cada variável foram utilizados dados de 800 pacientes para treinamento e 800 pacientes para validação.

Após muitas simulações, utilizando o software MATLAB®, versão 7.0 (Jang e Gulley, 1997), concluiu-se que, nesse caso, 30 iterações são suficientes para a determinação das funções de pertinência. O número ideal de iterações é aquele em que a função erro tem seu ponto de mínimo. Na Tabela 3 são descritas as simulações que contêm os erros menores.

OD 1 1 4 A	. 1	. 1 ~				c ~	1	
Tabela 1: A	lanımacı	eimiilacode	nara	ancontrar	20	tuncose	do	nortinoncia
Tabela I. F.	riguinas	Simulacoes	para	cheomitai	as	Tuncoes	uc	perunencia
	U							1

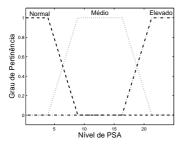
Número FP	Tipo FP	Iterações	Erro trein	Erro teste
4 3 4	TRI	30	0,0675	0,0689
3 3 3	TRI	30	0,0754	0,0733
3 2 4	GAUS	30	0,0583	0,0586
3 2 4	GAUS2	30	0,0611	0,0622
3 2 4	TRAP	30	$0,\!0549$	0,0572
3 2 4	GBEL	30	0,0575	0,0576
3 2 4	PI	30	0,0670	0,0688
3 2 4	DSIG	30	0,0658	0,0661
3 2 4	PSIG	30	0,0658	0,0661

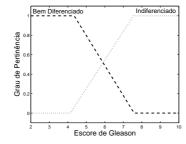
Na primeira coluna tem-se o número de funções de pertinência para as variávies PSA, Gleason e Estado Clínico, respectivamente. Na segunda coluna, o tipo das funções de pertinência testados: : triangular (TRI), gaussiana (GAUS), uma combinação de duas gaussianas (GAUS2), trapezoidal (TRAP), em forma de sino (GBEL), gaussiana achatada (PI), diferença de duas sigmóides (DSIG) e o produto de duas sigmóides (PSIG). Nas colunas 4 e 5 estão os erros dos dados de treinamento e dos dados de validação. O menor erro indica a melhor opção de funções de pertinência.

Nesse caso, após 30 épocas, foram consideradas melhores as funções de pertinência trapezoidais sendo que a variável lingüística nível de PSA recebeu classificação: normal, médio e elevado; a variável escore de Gleason foi classificada como bem diferenciado (tumor menos agressivo) e indiferenciado (tumor mais agressivo) e variável estado clínico é classificada numa escala de 0 a 1 sendo valores próximos

16 Castanho

do zero sem evidência de tumor e próximos de 1 quando o tumor já alcançou a cápsula prostática. As Figuras 3, 4 e 5 mostram as variáveis de entrada que melhor descrevem os dados de treinamento.





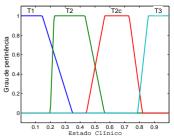


Figura 3: Nível sérico de PSA

Figura 4: Escore de Gleason

Figura 5: Estado Clínico

Para exemplificar, é apresentada uma simulação da chance de um paciente com nível de PSA no sangue igual a 24,4 ng/ml, escore de Gleason da biópsia classificado como 8 e estado clínico avaliado pelo médico no exame de toque retal como 0,5 (zero indica nenhum achado suspeito e 1 indica a certeza do médico no comprometimento da próstata). Pelo sistema construído, a chance do paciente ter câncer não confinado na próstata é 0,975.

Para validar o sistema foi utilizado um banco de dados do Hospital das Clínicas, da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. Durante o período de janeiro de 1997 a junho de 2004, 190 pacientes com média de idade de 64 anos foram submetidos à prostatectomia radical. Após a cirurgia, com a análise do material retirado (próstata e estruturas adjacentes) foi constatado que 138 pacientes tinham câncer confinado no órgão e, portanto, grande chance de cura enquanto que em 52 pacientes o câncer já tinha atingido a cápsula prostática e estruturas adjacentes como vesículas seminais e linfonodos pélvicos.

Para avaliar o desempenho do sistema foi utilizada a análise ROC (Zweig e Campbell, 1993). Considerando um ponto de corte igual a 0,64, tem-se especificidade igual a 0,69 e sensibilidade igual a 0,59. Alterando o ponto de corte aumenta a especificidade e diminui a sensibilidade, ou vice-versa.

A área sob a curva ROC (Figura 6) é 0,65 indicando que dados dois pacientes, um com câncer confinado no órgão, e outro com câncer não confinado, a probabil-

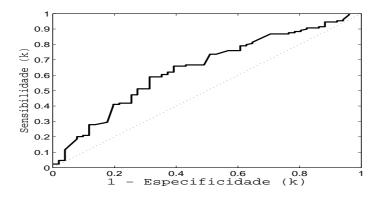


Figura 6: Curva ROC

idade do resultado do primeiro ser menor do que o resultado do segundo é 0,65. Esse resultado parece não ser um bom resultado pois a área em torno de 1 indica 100% de acerto e área em torno de 0,5 indica que o teste não discrimina os pacientes porém, se cada uma das variáveis for considerada separadamente as áreas sob as curvas ROC ficam em torno de 0,5.

#### 4. Conclusões

Os sistemas neuro-fuzzy por combinarem a capacidade de treinamento das redes neurais e a facilidade de entendimento dos sistemas especialistas fuzzy são uma boa opção para o desenvolvimento de sistemas de diagnósticos, quando se dispõe de um grande número de dados experimentais.

Na validação do sistema, a área sob a curva ROC não indica um bom desempenho para o banco de dados utilizado, porém, é melhor do que a análise de cada variável em separado. Deve-se ressaltar que, tendo em vista a indisponibilidade de muitos dados experimentais, foi necessário construir um banco de dados sintéticos com base na regressão efetuada por Partin e colaboradores, isto é, são dados obtidos a partir de outros dados já manipulados. Espera-se que, se um banco de dados reais for utilizado, o desempenho seja mais satisfatório.

18 Castanho

#### Referências

Barros, L. e Bassanezi, R. (2006). Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática. Editora da UNICAMP.

- Castanho, M. J. P., Yamakami, A., Barros, L. C., e Vendite, L. L. (2003). Prognostic of the pathological stage of prostate cancer: An option using fuzzy sets theory. Proceedings of the Third Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology, 1:247–253.
- Han, M., Snow, P., Brandt, J., e Partin, A. (2001). Evaluation of artificial neural networks for the prediction of pathological stage in prostate carcinoma. *Cancer Supplement*, 91(8):1661–1666.
- Jang, J. e Gulley, N. (1997). MATLAB Fuzzy Logic Toolbox User's Guide. The MathWorks, Inc., USA.
- Lorenz, A., Blüm, M., Ermert, H., e Senge, T. (1997). Comparison of different neuro-fuzzy classification systems for the detection of prostate cancer in ultrasonic images. *Proceeding of the IEEE Ultrasonics Symposium*, páginas 1201–1204.
- Naguib, R., Robinson, M., Neal, D., e Hamdy, F. (1998). Neural network analysis of combined conventional and experimental prognostic markers in prostate cancer: a pilot study. *British Journal of Cancer*, 78(2):246–250.
- Naguib, R. e Sherbet, G. (1997). Artificial neural networks in cancer research. *Pathobiology*, 65:129–139.
- Partin, A., Kattan, M., Subong, E., Walsh, P., Wojno, K., Oesterling, J., Scardino, P., e Pearson, J. (1997). Combination of prostate-specific antigen, clinical stage, and gleason score to predict pathological stage of localized prostate cancer. *JAMA*, 277(18):1445–1451.
- Partin, A., Mangold, L., Lamm, D., Walsh, P., Epstein, J. I., e Pearson, J. (2001). Contemporary update of prostate cancer staging nomograms Partin Tables for the new millennium. *Urology*, 58(6):843–848.

- Shing, J. e Jang, R. (1993). ANFIS: Adaptative-network-based fuzzy inference system. *IEEE Trans on Systems, Man and Cybernetics*, 23(3):665–685.
- Zweig, M. e Campbell, G. (1993). Receiver-operating characteristic (ROC) plots: A fundamental evaluation tool in clinical medicine. *Clinical Chemistry*, 39(4):561–577.

20 Castanho

## Programação matemática fuzzy aplicada a problemas de poluição do ar

Luiza A. Pinto Cantão¹,

Depto. de Eng. Ambiental, UNESP, Av. Três de Março nº 511, 18087-180,

Sorocaba/SP.

Renato F. Cantão<sup>2</sup>,

Thorus Scisoft, Estrada Telebrás/UNICAMP km 97, 13081-970, Campinas/SP.

Resumo. Neste trabalho apresentamos o uso de um problema de Programação Matemática Fuzzy como ferramenta para avaliação de cenários relacionados à políticas de controle de poluição do ar. A técnica apresentada foi aplicada com dados sintéticos à cidade de Sorocaba.

Palavras-chave: Programação Matemática; Teoria Fuzzy; Poluição do Ar.

#### 1. Introdução

Em CETESB (2005), CETESB (2006), CETESB (2007) e Muramoto et al. (2004), caracterizam-se ultrapassagens dos limites legais de ozônio\* na região de Sorocaba, fazendo com que sua região urbana fosse a primeira em uma cidade do interior do Estado de São Paulo a ser estudada de maneira abrangente pela CETESB (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental).

Este fato, unido a um perfil industrial bastante diversificado, uma população de 500.000 habitantes, uma taxa de urbanização de 98.53% e uma frota composta por cerca de 230.000 veículos automotores<sup>†</sup> tornam Sorocaba uma escolha atraente para este tipo de modelagem.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>luiza@sorocaba.unesp.br

 $<sup>^2 \</sup>verb|cantao@thorus-scisoft.com.br|$ 

<sup>\*</sup>Poluente secundário, originado de reações físico-químicas envolvendo  $NO_x$  (óxido de nitrogênio) e COVs (compostos orgânicos voláteis).

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup>Junho de 2003, pela PRODESP (Companhia de Processamento de Dados do Estado de São Paulo, www.prodesp.sp.gov.br).

#### 2. Objetivos

Neste contexto, apresentaremos aqui a aplicação do modelo desenvolvido por Sommer e Pollatschek (1978) para a região de Sorocaba – SP. Note-se que o tipo específico de poluente não faz parte da modelagem, pois a finalidade é a de inserir a região de estudo nesta problemática.

Na seção 3 discutiremos a formulação do modelo em Sommer e Pollatschek (1978), na seção 4 o desenvolvimento do exemplo para a região de Sorocaba – SP e os resultados obtidos. Finalmente, na seção 5 as conclusões e trabalhos futuros.

#### 3. Metodologia

Um dos aspectos a serem estudados na problemática de poluição do ar são as políticas de controle. No contexto de otimização estas políticas de controle aparecem como um problema de controle de poluição que atenda aos padrões estabelecidos, mas levando em conta os custos associados à implementação destes métodos de controle.

Em Sommer e Pollatschek (1978) esta discussão é apresentada de maneira simples e bastante genérica. Os pontos que devem ser levados em consideração neste tipo de problema são:

- Há uma expressão para cada fonte que forneça a concentração de poluentes em uma determinada localidade geográfica conhecida como função de transferência, que depende apenas da fonte e de sua localização;
- A redução na emissão é viável, mas limitada;
- Os padrões de qualidade do ar são fixados pelas fontes reguladoras governamentais e estes não podem ser ultrapassados.

Os tópicos listados acima são muito convenientes em modelagem matemática, mas em problemas reais as informações podem ser vagas ou pouco precisas. Assim, o objetivo em Sommer e Pollatschek (1978) é o de introduzir a Programação Matemática Fuzzy para problemas de políticas de poluição do ar.

No exemplo que segue, considera-se:

- Um único tipo de poluente, obtido de várias fontes na área de controle;
- Os padrões de qualidade do ar dados devem ser atingidos em pontos de controle chamados receptores, dentro da área de estudo;
- As condições climáticas são ignoradas neste modelo.

A função de transferência  $s_j$  existe para cada fonte j (j = 1, ..., J) indicando a concentração de poluentes no nível do solo com coordenadas  $(x_1, x_2)$ . Esta função pode ser generalizada pela função Gaussiana:

$$s_j(x_1, x_2) = \alpha_j e^{\beta_j}$$

onde  $\alpha_j = \alpha_j(x_1, x_2)$  e  $\beta_j = \beta_j(x_1, x_2)$  são parâmetros conhecidos relacionados a cada fonte poluente. A taxa de concentração em um ponto receptor i (i = 1, ..., I) provocado pela fonte j é:

$$s_{ij} = s_j \left( x_1^i, x_2^i \right)$$

onde  $(x_1^i, x_2^i)$  são coordenadas dos pontos-receptores i.  $s_{ij}$  são dados estabelecidos e expressam a taxa atual de concentração.

Seja  $E_j \in [0,1]$  a variável de decisão que indica a redução do poluente na fonte j, assim:

$$E_j$$
 é a taxa de redução; 
$$(1-E_j)\,s_{ij}$$
 é a taxa de concentração depois da redução.

Finalmente, supondo que a concentração total em um ponto receptor seja a soma da concentração de poluentes que são liberados de todas fontes, temos:

$$S_i = \sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij}.$$

A partir das equações descritas acima, podemos pensar no problema de Programação Matemática Fuzzy.

A primeira restrição fuzzy é: para cada ponto-receptor  $i, S_i$  não exceda o padrão d mas tente manter-se menor do que  $e_i$  que é um padrão desejável neste ponto receptor i. Matematicamente:

$$\sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij} \lesssim e_i; d \qquad \forall i$$
(3.1)

A Figura 1 expressa graficamente a função de pertinência associada ao símbolo  $\lesssim$ . A notação  $e_i$ ; d denota que  $e_i$  é o nível de poluição desejável e d o padrão permitido de emissão do poluente.

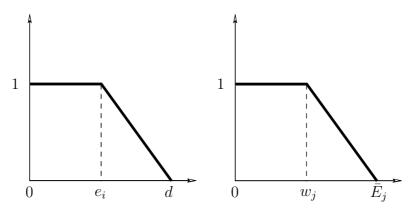


Figura 1: Violação das restrições (3.1) e (3.2), respectivamente.

A segunda restrição fuzzy é: garanta, para cada fonte j que a taxa de redução não exceda  $\bar{E}_j$  e tente manter-se abaixo de  $w_j$ . Matematicamente:

$$E_j \lesssim w_j; \bar{E}_j \qquad \forall j$$
 (3.2)

onde  $\bar{E}_j$ ,  $w_j \in [0,1]$ . Finalmente, a função objetivo é dada por:

$$z = \min \sum_{j=1}^{J} c_j E_j \tag{3.3}$$

e  $c_j$  é custo total da redução para a fonte j.

Como o conjunto de restrições é fuzzy, a função objetivo passa a ser interpretada como: Minimize  $\sum c_j E_j$  mas considere todas as funções de pertinência  $\mu_i$  e  $\mu_j$ .

As restrições (3.1) e (3.2) possuem o mesmo tipo de desigualdade fuzzy  $(\lesssim)$ , e para cada uma delas a seguinte função de pertinência que caracteriza a sua natureza fuzzy é dada a seguir:

$$\mu_i(E_j) = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad (1 - E_j)s_{ij} < e_i \\ \frac{d - (1 - E_j)s_{ij}}{d - e_i} & \text{se} \quad (1 - E_j)s_{ij} \in [e_i, d] \end{cases}$$

e

$$\mu_j(E_j) = \begin{cases} 1 & \text{se } E_j < w_j \\ \frac{\bar{E}_j - E_j}{\bar{E}_j - w_j} & \text{se } E_j \in [w_j, \bar{E}_j] \end{cases}$$

Uma restrição do tipo  $\lesssim$  é formulada como duas desigualdades usando uma variável de folga  $s_i \geq 0$ , para a restrição (3.1):

$$\forall i \begin{cases} \sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij} - s_i \leq e_i \\ s_i \leq d - e_i \end{cases}$$
(3.4)

e  $t_i \ge 0$  para (3.2):

$$\forall j \begin{cases} E_j - t_j & \leq w_j \\ t_j & \leq \bar{E}_j - w_j \end{cases}$$
 (3.5)

Agora, as funções de pertinência para a restrição (3.4),  $\forall i,$  e para (3.5),  $\forall j,$  são:

$$\mu_i = 1 - \frac{s_i}{d - e_i}$$
 e  $\mu_j = 1 - \frac{t_j}{\bar{E}_j - w_j}$ 

A não-negatividade das variáveis também deve ser garantida, ou seja:  $E_j \geq 0$ ,  $t_j \geq 0, \ \forall j$  e  $s_i \geq 0, \ \forall i$ .

A função de pertinência da função objetivo (3.3) é dada por:

$$\mu_0 = \begin{cases} 1 & \text{se} & z < \alpha_0 \\ 1 - \frac{\alpha_0 - z}{\beta_0 - \alpha_0} & \text{se} & z \in [\alpha_0, \beta_0] \\ 0 & \text{se} & z > \beta_0 \end{cases}$$
(3.6)

A Figura 2 ilustra a função acima (3.6).

Ao contrário das funções de restrições (3.1) e (3.2), onde os limites de satisfação de cada restrição são dados, temos de determinar os limites inferior e superior,  $\alpha_0$  e  $\beta_0$ , respectivamente, para a função de pertinência da função objetivo.

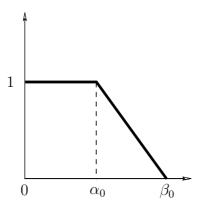


Figura 2: Violação da função objetivo (3.3) – função de pertinência (3.6).

#### 3.1 Determinação de $\alpha_0$

O valor de  $\alpha_0$  pode ser obtido através da solução do problema

min 
$$\sum_{j=1}^{J} c_j E_j$$

$$\sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij} \leq d \qquad \forall i$$

$$E_j \leq \bar{E}_j \qquad \forall j$$

$$E_j \geq 0 \qquad \forall j$$

$$(3.7)$$

Supondo que  $E_j^\ast$  seja a solução de (3.7), então assumimos que

$$\alpha_0 = \sum_{j=1}^{J} c_j E_j^*$$

O problema (3.7) fornece o melhor valor possível para a função objetivo, já que todas as restrições podem atingir os valores padrão máximos d.

#### 3.2 Determinação de $\beta_0$

O valor da função objetivo deve ser menor do que  $\underline{z}$ , onde  $\underline{z} = \sum_{j=1}^{J} c_j \underline{E}_j$ , e  $\underline{E}_j$ , para  $\forall j$ , é a solução ótima do problema. Assim,  $\beta_0 = \underline{z}$  da função objetivo

do problema que inclua as pertinências das restrições mas exclua a pertinência da função objetivo e a própria função objetivo. Assim, resolvemos o seguinte problema:

min 
$$\sum_{i=1}^{I} \frac{s_i}{d - e_i} + \sum_{j=1}^{J} \frac{t_j}{\bar{E}_j - w_j}$$
S. a 
$$\sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij} - s_i \leq d \qquad \forall i$$

$$s_i \leq d - e_i \qquad \forall i$$

$$E_j - t_j \leq \bar{E}_j \qquad \forall j$$

$$t_j \leq \bar{E}_j - w_j \qquad \forall j$$

$$E_j, t_j \geq 0 \qquad \forall j$$

$$s_i \geq 0 \qquad \forall i$$

$$(3.8)$$

O problema (3.8) fornece o pior valor possível para a função objetivo, já que suas restrições levam em conta os valores desejáveis  $s_i$ , menores – e portanto mais estritos – que os padrões d.

#### 3.3 O Problema

Adicionando a função de pertinência da função objetivo em (3.8), temos:

min 
$$\sum_{i=1}^{I} \frac{s_i}{d - e_i} + \sum_{j=1}^{J} \frac{t_j}{\bar{E}_j - w_j} + \sum_{j=1}^{J} \frac{c_j E_j}{\beta_0 - \alpha_0}$$
S. a 
$$\sum_{j=1}^{J} (1 - E_j) s_{ij} - s_i \leq d \qquad \forall i$$

$$s_i \leq d - e_i \qquad \forall i$$

$$E_j - t_j \leq \bar{E}_j \qquad \forall j$$

$$t_j \leq \bar{E}_j - w_j \qquad \forall j$$

$$E_j, t_j \geq 0 \qquad \forall j$$

$$s_i \geq 0 \qquad \forall i$$

#### 4. Resultados

Usando o mapa da região de Sorocaba como base (figura 3), foram colocadas duas fontes poluidoras  $(s_1 \ e \ s_2)$  e três pontos receptores  $(R_1, R_2 \ e \ R_3)$ .

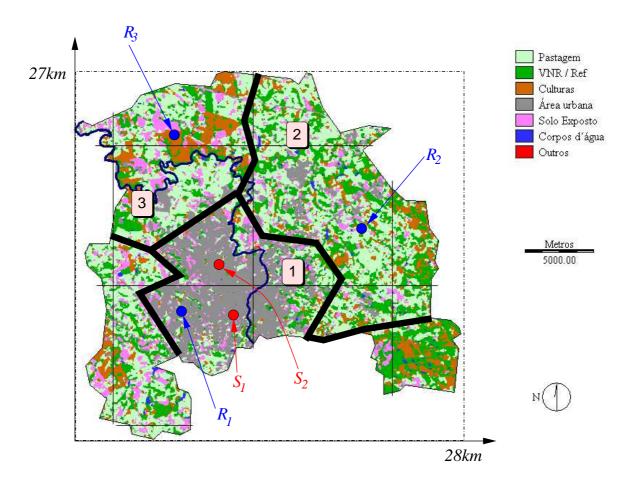


Figura 3: Mapa da região de Sorocaba.

Para cada fonte, calculamos as funções de transferência usando funções cujas curvas de nível são elipses e cujo decaimento é exponencial. Assim:

$$s(x_1, x_2) = e^{(-A)}$$

sendo:

$$A = \frac{(x_1 \cos t - x_2 \sin t)^2}{a^2} + \frac{(x_1 \sin t + x_2 \cos t)^2}{b^2}$$

Note que,  $(x_1, x_2)$  é o centro da elipse (coordenadas das fontes poluidoras), (a, b) são os eixos e t o ângulo de rotação. Assim:

	$s_1$	$s_2$
$(x_1, x_2)$	(11.34, 9.02)	(9.9, 12.33)
(a, b)	(16, 6)	(17, 5)
t	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{-2\pi}{2}$
	4	3

Como mostra a Figura 3, o mapa foi dividido em três regiões: urbana, pastagem e culturas  $-R_1$ ,  $R_2$  e  $R_3$ , respectivamente. Cada região possui um total de poluentes permitidos d e um total desejável  $e_i$ , como segue na Tabela 1. Como dados das fontes  $s_1$  e  $s_2$  temos  $\bar{E}_j$ , a taxa de redução permitida,  $w_j$ , a taxa de redução desejada e  $c_j$ , o custo da redução. A Tabela 2 apresenta estes dados. A Tabela 3 apresenta o índice de poluentes nas fontes receptoras.

	Área	$e_i$	d
1	$R_1$ : Urbana	0.8	1
2	$R_2$ : Pastagem	0.55	1
3	$R_3$ : Culturas	0.5	1

Tabela 1: Concentração de poluente desejado e permitido.

j	$c_j$	$\bar{E}_j$	$w_j$
1	2	0.2	0.05
2	3	0.3	0.12

Tabela 2: Taxas de redução desejada, esperada e custo de redução.

P	ontos I	Receptores	Emissão de Poluentes		
e s	suas Co	oordenadas	nas Fontes		$\sum_{j=1}^{2} s_{ij}$
i	$x_1^i$	$x_2^i$	$s_{1i}$	$s_{2i}$	
1	7.2	9.02	0.762	0.524	1.2865
2	18.8	15.5	0.675	0.031	0.706
3	7.2	22.0	0.014	0.561	0.576

Tabela 3: Dados do problema.

Para o tratamento numérico, a equação (3.4) é reformulada como:

$$\forall i \begin{cases} \sum_{j=1}^{J} E_{j} s_{ij} + s_{i} \geq \sum_{j=1}^{J} s_{ij} - e_{i} \\ s_{i} \leq d - e_{i} \end{cases}$$
 (4.10)

O valor de  $\alpha_0$  é dado por:

min 
$$2E_1 + 3E_2$$
  
S. a  $0.762E_1 + 0.524E_2 \ge 0.2865$  (4.11)  
 $E_1, E_2 \ge 0$ 

As demais restrições foram excluidas do problemas pois, neste caso, estas já apresentam um somatório inferior à taxa de concentração desejável. O resultado deste problema nos dá:

$E_1$	$E_2$	$z = \alpha_0$
0.2	0.256	1.167

Tabela 4: Solução do problema (4.11).

O valor de  $\beta_0$  é pelo problema:

min 
$$5s_1 + 2.22s_2 + 2s_3 + 6.67t_1 + 5.56t_2$$
  
S. a  $0.762E_1 + 0.524E_2 + s_1 \ge 0.4865$   
 $s_1 \le 0.2$   
 $0.675E_1 + 0.031E_2 + s_2 \ge 0.156$   
 $s_2 \le 0.45$   
 $0.014E_1 + 0.561E_2 + s_3 \ge 0.076$   
 $s_3 \le 0.5$   
 $E_1 - t_1 \le 0.05$   
 $t_1 \le 0.15$   
 $E_2 - t_2 \le 0.12$   
 $t_2 \le 0.18$   
 $E_1, E_2, s_1, s_2, s_3, t_1, t_2 \ge 0$ 

A solução do problema (4.12) apresenta-se na Tabela 5.

$E_1$	$E_2$	$\underline{z} = \beta_0$
0.2	0.256	2.7852

Tabela 5: Solução do problema (4.12).

A partir das Tabelas 1, 2, 3, 4 e 5 e da discussão apresentada até aqui, apre-

sentamos o problema completo.

Finalmente, a solução ótima para o problema de poluição do ar (4.13) é apresentada na Tabela 6.

$E_1^*$	$E_2^*$	$z^*$
0.2	0.256	3.50715

Tabela 6: Solução do problema (4.13).

Note que, para  $E_2$  conseguimos uma taxa de emissão abaixo do permitido (conforme Tabela 2).

**Nota:** os problemas lineares foram resolvidos usando o software lp\_solve<sup>†</sup>, versão 5.5, e GNU Octave<sup>§</sup> versão 2.1.69 em sistema operacional GNU/Linux.

 $<sup>^{\</sup>ddagger} \texttt{tech.groups.yahoo.com/group/lp\_solve/}$ 

<sup>§</sup>www.octave.org

#### 5. Conclusões

Este modelo é bastante simples e genérico, pois o tipo de poluente é omitido, bem como condições atmosféricas. Dados sintéticos foram usados na validação do modelo. Porém, fica clara a flexibilidade existente em problemas reais e propõe-se uma resolução usando a Teoria Fuzzy.

Para trabalhos futuros, analisaremos a emissão de  $NO_x$  em dois locais da região de Sorocaba: no centro da cidade e a emissão de uma empresa, em Votorantim – SP. Ambas medidas serão obtidas através dos relatórios CETESB (2005), CETESB (2006), CETESB (2007) e Muramoto et al. (2004). Suas respectivas plumas serão aproximadas através de um modelo bidimensional simplificado de dispersão de poluentes atmosféricos Bean (1993), Cantão (2004).

## Agradecimentos

Agradeço ao apoio e colaboração na coleta de infomações sobre Poluição do Ar da Profa Dra Maria Lucia Pereira Antunes e ao constante apoio do Prof. Dr. Akebo Yamakami e Msc. Ricardo Coelho Silva.

#### Referências

- Bean, S. E. P. C. (1993). Modelagem matemática e aproximação numérica do estudo de poluentes aerossóis. Master's thesis, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas.
- Cantão, R. F. (2004). Construção de um Software de Elementos Finitos Usando Programação Genérica/Generativa: Considerações sobre C++, Performance e Generalidade. PhD thesis, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas.
- CETESB (2005). Relatório de qualidade do ar no estado de são paulo. Technical report, CETESB Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, www.cetesb.sp.gov.br.

- CETESB (2006). Relatório de qualidade do ar no estado de são paulo. Technical report, CETESB Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, www.cetesb.sp.gov.br.
- CETESB (2007). Relatório de qualidade do ar no estado de são paulo. Technical report, CETESB Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, www.cetesb.sp.gov.br.
- Muramoto, C. A., Fialho, R. C., de Souza, J. B., Chamani, M. C., Gallo, G. I., e Benavente, A. C. M. B. (2004). Estudos investigativos da ocorrência de ozônio troposférico na região de sorocaba sp. Technical report, CETESB Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, www.cetesb.sp.gov.br.
- Sommer, G. e Pollatschek, M. A. (1978). A fuzzy programming approach to an air pollution regulation problem. In Trappl, R., Klir, G. J., e Ricciardi, L., editors, *Progress in Cybernetics and Systems Research*, volume III, páginas 303–313. John and Sons.

# Um modelo diferencial de recrutamento de formigas

Raul Abreu de Assis<sup>1</sup>
Luciana Mafalda Elias de Assis<sup>2</sup>
Dep. de Matemática, UNEMAT, 78390-000 – Barra do Bugres/MT.

Resumo. Neste trabalho apresentamos um sistema de equações diferenciais para modelar o comportamento de recrutamento de formigas. É apresentada a análise de estabilidade sistema linearizado.

Palavras-chave: Recrutamento; Modelagem; Colônia de Formigas; Fuzzy; Equações Estocásticas;

## 1 Introdução

Desconsiderando as aplicações em robótica, otimização e inteligência artificial, ainda assim o estudo de sistemas auto-organizados estaria justificado pela curiosidade científica e o senso de estética. Desvendar quais são os mecanismos reguladores da ordem em sistemas complexos pode ser desafiador e elucidativo.

Como as formigas escolhem uma rota? Como os cupins se organizam para construir seu ninho? Como os insetos sociais com um repertório de de comportamentos sociais relativamente simples, podem atingir uma organização tão perfeita de maneira a responder de forma coletiva às variações de clima, demanda de comida, ameaça de predadores e outros fatores inesperados?

Modelos matemáticos desempenham um papel fundamental no entendimento desses fenômenos. Com eles, podemos fazer hipóteses simples e simular ou analisar o comportamento do sistema sob essas hipóteses. A criação de modelos para o comportamento de insetos sociais possibilitou, por exemplo, a criação de novos algoritmos de otimização e roteamento de dados (Bonabeau et al., 1999).

Neste trabalho, apresentamos um modelo de equações diferenciais para o experimento da ponte binária (Denebourg et al., 1989; Bonabeau et al., 1999), um

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>raulassis@vahoo.com

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>lucianabbg@unemat.br

36 Assis

experimento pioneiro que foi capaz de isolar os principais mecanismos pelos quais uma colônia de formigas é capaz de efetuar escolhas de caminho "inteligentes". Aqui, escolha "inteligente" é para ser entendida como a melhor sob um determinado parâmetro, isto é, caminho de menor comprimento, fonte de alimento de melhor qualidade, etc.

### 2 O modelo

O experimento da ponte binária consiste basicamente de uma montagem experimental em que se oferecem dois caminhos a uma colônia de formigas, variando-se as condições experimentais. Nas diferentes montagens, pode-se variar o comprimento de cada caminho, a qualidade da fonte em cada caminho, etc. Esquemas de exemplos de montagens são apresentadas na figura 1. O experimento é descrito em detalhe em (Denebourg et al., 1989; Bonabeau et al., 1999).

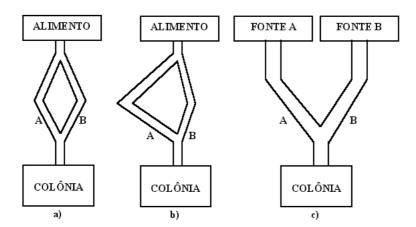


Figura 1: Esquemas de montagem para o experimento da ponte binária. a) dois ramos de mesmo comprimento. b) ramos de comprimentos distintos. c) ramos de mesmo comprimento e fontes de qualidades distintas.

Várias espécies de formigas utilizam uma substância química para se orientar, denominada  $ferom \hat{o}nio$  Hölldobler e Wilson (1990). Definindo  $f_A$  como a quantidade de feromônio no ramo A e  $f_B$  a quantidade no ramo B, temos que quanto maior

for a diferença relativa entre  $f_A$  e  $f_B$ , maior será a chance das formigas escolherem trafegar pelo ramo A. Um forma de modelar essa probabilidade é simplesmente tomar:

$$P_A(f_A, f_B) = \frac{(f_A + k)^n}{(f_A + k)^n + (f_B + k)^n}$$
(2.1)

onde k é um parâmetro que representa um limiar de comparação com um ramo não marcado por feromônio, (isto é, se a quantidade de feromônio em um ramo ultrapassar k, ele pode ser considerado significativamente atrator com relação a um ramo não-marcado) e n é um parâmetro que representa a sensibilidade das formigas.

O resultados de simulações de Monte Carlo utilizando essa função para modelar a escolha de ramo pelos agentes levaram a resultados coerentes com as obervações experimentais (Denebourg et al., 1989; Assis, 2003; Assis e Jr., 2003). Para modelar o sistema utilizando equações diferenciais, tomaremos como variáveis dependentes do tempo as quantidades de feromônio em cada ramo: x correspondendo ao ramo A e y correspondendo ao ramo B.

Faremos então as seguintes hipóteses simplificadoras:

- a quantidade de feromônio em cada ramo decai exponencialmente na ausência de depósito.
- 2. existe um fluxo constante F de agentes por unidade de tempo realizando a escolha entre os ramos A e B
- 3. a cada ramo corresponde uma taxa de depósito por agente que pode variar de acordo com as condições do experimento.  $\alpha$  é quantidade de depósito de feromônio por agente no ramo  $A,\beta$  quantidade de depósito por agente no ramo B

Com relação ao item 3, os coeficientes podem variar por duas razões: qualidade da fonte de alimento e comprimento do ramo. No caso da qualidade da fonte, existem evidências (Sudd e Franks, 1987) que espécies de formigas podem modular a quantidade de feromônio depositado em função da riqueza da fonte. Com relação ao comprimento, temos que se um ramo é mais comprido que o outro, então a taxa de depósito médio no ramo mais curto, para quantidades iguais de feromônio em cada ramo, é maior que no ramo mais longo, pois os agentes completam seu percurso mais

38 Assis

rapidamente. Uma forma de representar esse fator é aumentando a taxa de depósito por agente em cada ramo, na seção 4, mostramos que, de fato, uma modelagem levando em conta o comprimento dos ramos é análoga à variação dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ . Assim, as quantidades  $\alpha$  e  $\beta$  são uma representação da "qualidade" (levando-se em conta comprimento e/ou qualidade de fonte) dos ramos A e B, respectivamente.

Para modelar a dinâmica do sistema, sugerimos as equações:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x^2}{x^2 + y^2} \alpha F - \lambda x$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y^2}{x^2 + y^2} \beta F - \lambda y$$
(2.2)

Note que nos primeiros termos das equações do sistema 2.2, acima temos termos na forma  $\frac{x^2}{x^2+y^2}\alpha F$ , que representa a fração do tráfego que flui pelo ramo A vezes o fluxo F de agentes multiplicado pela quantidade de feromônio depositado por agente no ramo A. A soma das frações do tráfego que flui sobre os ramos é sempre um, como pode ser visto facilmente. Existem outras formas de se modelar a distribuição do tráfego em resposta às quantidades de feromônio. Se  $p_A$  representa a fração do tráfego que flui pelo ramo A, dadas a quantidades x e y de feromônio em cada ramo, utilizando a forma geral

$$p_A(x,y) = \frac{x^n}{x^n + y^n}$$

temos que existe uma mudança crítica de comportamento para n=1, enquanto para todos os valores maiores que um o comportamento é similar ao de n=2. Dessa forma, analisaremos o caso n=2 ciente de que ele representa uma ampla classe de respostas de distribuição de tráfego em função da quantidade de feromônio em cada ramo. A análise da mudança de comportamento para n=1 fica reservada para trabalhos futuros.

Utilizando a adimensionalização  $x^* = x/\alpha, y^* = y/\alpha$  e  $t^* = \lambda t$  e retirando os asteriscos, ficamos com o seguinte sistema adimensionalizado:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x^2}{x^2 + y^2} f - x$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y^2}{x^2 + y^2} \gamma f - y$$
(2.3)

onde  $f = F/\lambda$  é um parâmetro adimensional que representa o fluxo e  $\gamma = \beta/\alpha$  representa a proporção de depósito por agente entre o ramo B e o ramo A. Dessa

forma,  $\gamma$  representa a relação de qualidade entre os ramos B e A, por exemplo,  $\gamma=1/2$  representa que A é melhor que B,  $\gamma=2$  representa B melhor que A e  $\gamma=1$  representa ramos de igual qualidade.

Por hora apenas observaremos que o sistema possui uma singularidade na origem. Na verdade, mostraremos mais adiante que essa singularidade não apresenta obstáculo para os propósitos do modelo, podendo ser corrigida e também porque ela deixa de existir para pontos arbitrariamente próximos da origem.

O pontos de equilíbrio do sistema são  $(x_0,y_0)=(f,0), (x_1,y_1)=(0,\gamma f)$  e  $(x_2,y_2)=\left(\frac{\gamma^2 f}{\gamma^2+1},\frac{\gamma f}{\gamma^2+1}\right)$ . Para encontrar o último ponto estacionário, basta observar que, para  $x=\gamma y$ , temos que  $\frac{dy}{dx}=1/\gamma$ , de onde temos uma trajetória em linha reta sobre a reta  $x=\gamma y$  e y(t) satisfaz a equação:

$$\dot{y} = \frac{\gamma f}{\gamma^2 + 1} - y \tag{2.4}$$

de onde extraímos o ponto estacionário  $(x_2,y_2)$  e também observamos que o ponto é atrator sobre essa reta. Da solução  $y(t) = \frac{\gamma f}{\gamma^2+1} - y_0 e^{-t}$  temos que um dos autovalores do sistema linearizado no ponto  $(x_2,y_2)$  é -1. Na figura 2 apresentamos um plano de fase em que  $\gamma=1$  e f=1.

A análise de estabilidade dos pontos  $(x_0, y_0)$  e  $(x_1, y_1)$  é trivial e mostram que ambos são estáveis com autovalor -1 com multiplicidade 2 em ambos casos. Para o ponto  $(x_2, y_2)$  já sabemos que um dos autovalores é igual a -1. Se tomamos  $y = \gamma(f - x)$ , temos que:

$$\dot{y} = \frac{f\gamma^3 (f - x)^2}{x^2 + \gamma^2 (f - x)^2} - \gamma (f - x) = -\gamma \dot{x}$$

de onde temos novamente uma trajetória em linha reta, conforme indicado pelo plano de fase da figura 2.

Escrevendo a equação para  $\dot{x}$ , ficamos com:

$$\dot{x} = \frac{x^2}{x^2 + \gamma^2 (f - x)^2} - x = \frac{x(f - x)(x - x_2)}{(x^2 + g^2 (f - x)^2)(g^2 + 1)} = h(x)$$
 (2.5)

com  $x_2 = g^2 f/(g^2 + 1)$ , a coordenada x do ponto estacionário  $(x_2, y_2)$ . Da equação 2.5, acima, determinamos os pontos estacionários de x sobre a reta  $y = \gamma(f - x)$ ,

40 Assis

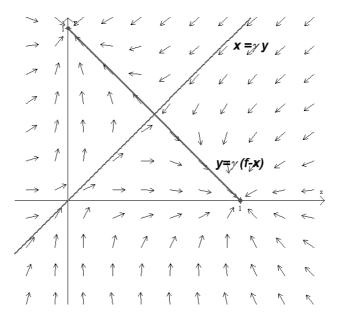


Figura 2: Plano de fase para o sistema 2.3. A separatriz  $x = \gamma y$ , determina a região atratora dos ramos  $A \in B$ .

x = 0, x = f e  $x = x_2$ . Observando que  $x_2 < f$  e analisando o sinal da função h(x), temos que:

$$\begin{cases} x < 0 \Rightarrow h(x) > 0 \\ 0 < x < x_2 \Rightarrow h(x) < 0 \\ x_2 < x < f \Rightarrow h(x) > 0 \\ f < x \Rightarrow h(x) > 0 \end{cases}$$

Pelas relações de sinal acima, temos que x=0 é estável,  $x=x_2$  é instável e x=f é estável. Logo, o ponto estacionário  $(x_2,y_2)$  é ponto de sela, independentemente dos valores de f e  $\gamma$ .

Interpretando biologicamente esses resultados, temos que o ponto (f,0), representa a escolha da colônia pelo ramo A e sua estabilidade significa que mesmo que uns poucos indivíduos errem o caminho, a escolha permanece estável. Analogamente, o ponto  $(0,\gamma f)$  representa a escolha do ramo B. O ponto instável,  $(x_2,y_2)=\left(\frac{\gamma^2 f}{\gamma^2+1},\frac{\gamma f}{\gamma^2+1}\right)$  representa uma distribuição do tráfego entre os ramos (por exemplo, se  $\gamma=1$ , então teríamos 50% de tráfego em cada ramo), a instabilidade desse ponto significa que a colônia acaba por escolher apenas um dos ramos, concentrando o

seu tráfego. Em particular, para a espécie do experimento da ponte binária, *Linep-ithema humile*, isso é exatamente o que acontece, prevalecendo o tráfego sobre um único ramo (Denebourg et al., 1989).

O parâmetro adimensional  $\gamma$  controla a inclinação da separatriz  $x=\gamma y$ , portanto, regulando a região atratora de cada um dos pontos que representam a escolha do ramo A ou B. Na figura 3 esboçamos um plano de fase com  $\gamma=2$ , representando a situação em que o ramo B tem maior qualidade que o ramo A, note como a região atratora do ramo B aumenta em relação a região do ramo A.

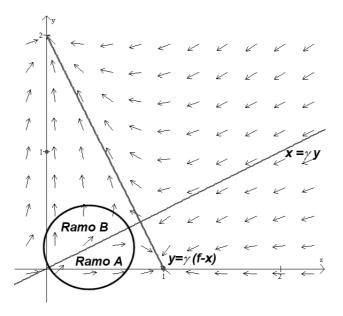


Figura 3: Plano de fase para o sistema 2.3 com  $\gamma=2$  e f=1. No início do processo o fator aleatório predomina sobre a escolha dos ramos, fazendo com que a condição inicial para o sistema seja representada por uma região.

Dessa forma, como durante o início do processo de distribuição do tráfego o fator aleatório ainda predomina sobre a marcação com feromônio, o tamanho da região atratora determina a probabilidade de escolha de cada ramo. Para representar matematicamente essa idéia, poderíamos adotar uma condição inicial estocástica e analisar a evolução dessa condição inicial, resultando em probabilidades de convergência para os ramos.

Essa abordagem fica reservada para trabalhos futuros, e indicamos a possibil-

42 Assis

idade de utilizarmos também uma modelagem de condições iniciais fuzzy.

## 3 Removendo a singularidade

A função utilizada pelos autores no experimento original da ponte binária Denebourg et al. (1989) para modelar a probabilidade de escolha do ramo A pelo agente, dadas as quantidades  $f_A$  e  $f_B$  nos ramos A e B, respectivamente, foi:

$$P_A = \frac{(f_A + k)^n}{(f_A + k)^n + f_B + k)^n}$$

Dessa forma, podemos modelar o fluxo médio de agentes em cada ramo por  $fP_A$  e  $fP_B$ , resultando no sistema:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{(x+k)^2}{(x+k)^2 + (y+k)^2} f - x$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{(x+k)^2}{(x+k)^2 + (y+k)^2} \gamma f - y$$
(3.6)

observe que, quando k=0, obtemos o sistema 2.2. O que sesejamos mostrar é que o comportamento do sistema 3.6 é qualitativamente idêntico ao do sistema 2.3 quando  $k\approx 0$ . Isto é, para remover a singularidade do sistema original, basta realizar uma pequena perturbação.

Para perceber isso, observamos, em primeiro lugar, que se  $(x^*, y^*)$  é um ponto estacionário, então (multiplicando a primeira equação por  $\gamma$  e somando-se a segunda)  $y^* = \gamma(f - x^*)$ . Logo, a existência de pontos estacionários está restrita à essa reta. Observe que o ponto de singularidade do sistema original está removido e não é ponto estacionário.

Além disso, temos que se  $y = \gamma(f - x)$ , então  $\frac{dy}{dx} = \frac{\dot{y}}{\dot{x}} = -\gamma$ , de onde a trajetória que tenha como ponto inicial qualquer ponto sobre essa reta permanece sobre ela. Dessa forma, obtemos uma equação diferencial somente em x:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{(x+k)^2 f}{(\gamma (f-x) + k)^2 + (x+k)^2} - x$$

e essa equação pode ser escrita como  $\dot{x} = h(x)/s(x)$ , onde:

$$h(x) = -x(F - x)(\gamma^2 f - x\gamma^2 - x) - 2x(\gamma - 1)(f - x) k + (f - 2x) k^2$$
 (3.7)

e

$$s(x) = (\gamma(f - x) + k)^{2} + (x + k)^{2}; \tag{3.8}$$

Como s(x) > 0,  $\forall x \in \mathbb{R}$ , os pontos estacionários sobre a reta  $y = \gamma(f - x)$  são definidos pelos zeros da função h(x). Sabemos que, para k = 0, temos as seguintes raízes:  $x_0 = 0, x_1 = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + 1}$  e  $x_2 = f$ . Na verdade, como k é um parâmetro variável, podemos olhar a função k como uma função de duas variáveis k0, contínua, pois é polinomial em ambas variáveis.

Na verdade, a continuidade de p(x,k) já nos dá a idéia de que as raízes de p(x,k)=0 dependerão continuamente dos parâmetros dessa função, de forma que uma pequena perturbação em k leva a uma pequena perturbação na localização das raízes (supondo que as mesmas existam para um certo valor de k). Entretanto, como existem bifurcações, surgimento de raízes e desaparecimento de raízes conforme k ultrapassa certos valores críticos, a seguir demonstramos rigorosamente a existência de um k para o qual os pontos estacionários do sistema original estão tão próximos quanto o do sistema 3.6 quanto se queira. Na figura 4 esboçamos a idéia da demonstração.

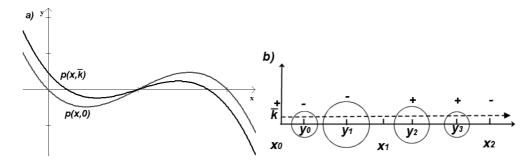


Figura 4: a) Gráfico dos polinômios p(x,0) e  $p(x,\bar{k})$ . Uma pequena perturbação em k leva a um pequeno deslocamento dos pontos estacionários, sem alterar sua estabilidade.b) Esquema para a construção da demonstração, toma-se o menor dos raios para a construção de  $\bar{k}$ .

A função p(x,k) é contínua em ambas variáveis e sabemos que:

$$\begin{cases}
 p(x_0, 0) = p(x_1, 0) = p(x_2, 0) = 0 \\
 p(x, 0) < 0 \text{ se } x \in (x_0, x_1) \\
 p(x, 0) > 0 \text{ se } x \in (x_1, x_2)
\end{cases}$$
(3.9)

Assis

Logo, dado  $\epsilon > 0$ , sejam  $y_0 \in (x_0, x_1)$  t.q.  $|x_0 - y_0| < \epsilon$ ,  $y_1 \in (x_0, x_1)$  t.q.  $/|x_1 - y_1| < \epsilon$ ,  $y_2 \in (x_1, x_2)$  t.q.  $|x_1 - y_2| < \epsilon$  e  $y_3 \in (x_1, x_2)$  t.q.  $|x_2 - y_3| < \epsilon$ . Por 3.9 e pela continuidade de p(x, k), temos que existem  $\delta_0, \delta_1, \delta_2, \delta_3$  positivos tais que:

$$\begin{cases} \|(x,k) - (y_0,0)\| < \delta_0 \Rightarrow p(x,k) < 0 \\ \|(x,k) - (y_1,0)\| < \delta_1 \Rightarrow p(x,k) < 0 \\ \|(x,k) - (y_2,0)\| < \delta_2 \Rightarrow p(x,k) > 0 \\ \|(x,k) - (y_3,0)\| < \delta_3 \Rightarrow p(x,k) > 0 \end{cases}$$

Assim, tomando  $\bar{k} < \delta = \min\{\delta_0, \delta_1, \delta_2, \delta_3\}$ , temos que:

1. 
$$p(x_0, \bar{k}) > 0$$
, pois  $\frac{\partial p}{\partial k}\Big|_{(x_0, 0)} = 0$  e  $\frac{\partial^2 p}{\partial k^2}\Big|_{(x_0, 0)} = f > 0$ 

2. 
$$p(y_i, \bar{k}) < 0$$
, pois  $||(y_i, \bar{k}) - (y_i, 0)|| < \delta$ ,  $i = 0, 1, 2, 3$ 

$$3. \ p(x_2,\bar{k})<0, \ \text{pois pois} \ \frac{\partial p}{\partial k}\bigg|_{(x_2,0)}=0 \ \text{e} \ \left.\frac{\partial^2 p}{\partial k^2}\right|_{(x_2,0)}=-f<0.$$

Logo, pelo Teorema do Valor Intermediário, concluímos que, para, para  $k = \bar{k}$ , existem três pontos estacionários para h(x),  $x_0^* \in (x_0, y_0)$ ,  $x_1^* \in (y_1, y_2)$  e  $x_2^* \in (y_3, x_2)$ . Pela preservação de sinal, a estabilidade dos pontos de é mesma que do sistema original, isto é,  $x_0^*$  e  $x_2^*$  são estáveis e  $x_1^*$  é instável. Dessa forma, o sistema é qualitativamente idêntico ao sistema 2.3 original.

# 4 Modelando Comprimentos distintos

Na seção 2, nos referimos à situação em que temos ramos de comprimento distintos, afirmando que poderíamos adotar o mesmo modelo variando-se os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  para representar a diferença de comprimento.

Como vamos levar em conta o comprimento de cada ramo, a quantidade absoluta de feromônio em cada ramo já não é adequada para modelar as probabilidades de escolha do caminho pelos agentes, uma vez que a mesma quantidade em uma ramo mais comprido, representa uma densidade menor. Assim, as variáveis x e y representam agora a densidade de feromônio em cada ramo.

As taxas de variação  $\dot{x},\dot{y}$  são dadas pelo fator de evaporação e pelo acréscimo de feromônio no ramo, dado por:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x^2}{x^2 + y^2} F(\alpha/C_A) - \lambda x$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y^2}{x^2 + y^2} F(\beta/C_B) - \lambda y$$
(4.10)

onde F é o fluxo constante de agentes,  $\alpha$  a quantidade de feronônio depositada por agente no ramo A e  $C_A$  o comprimento do ramo A. Fazendo  $a = \alpha/C_A$  e  $b = \beta/C_B$ , temos que o sistema adimensionalizado resultante será exatamente do tipo 2.3.

Dessa forma, podemos encarar o parâmetro  $\gamma$  como um "medida" da qualidade do ramo, que leva tanto em conta a qualidade da fonte quanto o comprimento do ramo.

## 5 Agradecimentos

Agradecemos a Geraldo Lúcio Diniz, pelo incentivo à publicação e a Rodney Carlos Bassanezi pela fecunda troca de idéias.

#### Referências

Assis, R. A. (2003). Modelos em estratégias de forrageamento de formigas. Master's thesis, IMECC – Unicamp.

Assis, R. A. e Jr., W. C. F. (2003). Um modelo computaional de recrutamento de formigas. *Biomatemática*, 13:21–31.

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

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.

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

46 Assis

Sudd, J. H. e Franks, N. R. (1987). *The Behavioural Ecology of Ants.* Chapman and Hall, Cambridge, Massachusetts, USA.

# Sobre incertezas em modelos epidemiológicos do tipo SIS

Laécio Carvalho de Barros,<sup>1</sup>

DMA – IMECC – UNICAMP, 13.083-970, Campinas/SP.

Maria Beatriz Ferreira Leite,<sup>2</sup>

Fac. de Matemática – CEATEC – PUC-Campinas, 13.086-900, Campinas/SP. Renata Zotin G. de Oliveira,

Depto de Matemática – IGCE – UNESP, 13.500-230, Rio Claro/SP.

Rodney C. Bassanezi,

Depto de Matemática – UFABC, 09.210-170, Santo André/SP.

Resumo. Neste trabalho consideramos um modelo do tipo SIS (suscetíveis-infectadossuscetíveis) com dinâmica vital, baseado em regras fuzzy. A solução é obtida a partir da Teoria de Controladores Fuzzy aliada à métodos de Análise Numérica.

Palavras-chave: Epidemiologia; Lógica Fuzzy; Controlador fuzzy;

## 1 Introdução

Tradicionalmente, grande parte dos modelos matemáticos que descrevem a dinâmica de doenças de transmissão direta são dados por um sistema de equações diferenciais, desconsiderando aspectos de incertezas.

Mais recentemente, com o avanço da teoria estocástica, toda e qualquer imprecisão ou subjetividade fenomenológica é traduzida para o modelo por meio de métodos estatísticos. No entanto, incertezas oriundas de conhecimentos parciais, não necessariamente aleatórias, são bastante freqüentes em fenômenos biológicos (Barros et al., 2004). Nestes casos, acreditamos que a lógica fuzzy seja uma ferramenta adequada, uma vez que pode representar, matematicamente, o fenômeno estudado sem o auxílio de "equações" para representar sua dinâmica. É necessário apenas um conjunto de regras coerentes baseadas no conhecimento de especialistas.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>laeciocb@ime.unicamp.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>biaemiti@sigmanet.com.br

 $<sup>^3</sup>$ rzotin@rc.unesp.br

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>rodney@ime.unicamp.br

Neste trabalho consideramos um modelo do tipo SIS (Suscetíveis-Infectados-Suscetíveis) com dinâmica vital, de acordo com o esquema compartimental apresentado na figura 1 (Edelstein-Keshet, 1988).

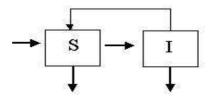


Figura 1: Modelo compartimental SIS.

No sistema baseado em regras fuzzy, tratado aqui, a solução (trajetória) é obtida a partir da Teoria dos Controladores Fuzzy (Amêndola et al., 2004; Barros e Bassanezi, 2006; Pedrycz e Gomide, 1998) aliada à métodos da Análise Numérica (Runge-Kutta).

#### 2 O Modelo

No modelo estamos admitindo que ambas as classes de indivíduos suscetíveis e infectados são homogêneas. Isto é, a chance de cada indivíduo suscetível encontrar um indivíduo infectado e se infectar é a mesma para todos os indivíduos suscetíveis. Além disso, o poder de contaminação de cada indivíduo infeccioso é o mesmo. Em outras palavras, não estamos considerando diferentes graus de infecciosidade na população de infectados.

As regras que definem a dinâmica do modelo são baseadas nas taxas de crescimento específicas em ambas as classes. Dessa maneira, independentemente do tamanho absoluto das populações, consideramos as densidades de indivíduos sadios (S) que se tornam infectados e as densidades de indivíduos infectados (I) que se recuperam.

As variáveis de saída são as taxas de crescimento específico para ambas as classes,  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$ , que por sua vez, dependem apenas de cada estado para S e I, de forma que o sistema é do tipo autônomo. O esquema a seguir (Figura 2) representa a estrutura do sistema considerado, o qual não exige equação para

representar a dependência de  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  com relação a S e I.

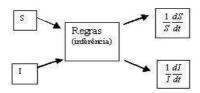


Figura 2: Controlador de Mamdani.

O modelo proposto considera dinâmica vital, visto que os tamanhos das populações envolvidas não é constante. Esta dinâmica ocorre devido às taxas de natalidade e mortalidade (natural e/ou devido à doença).

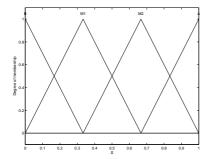
Os comentários seguintes servem para fornecer as principais hipóteses do modelo.

Para os indivíduos infectados o crescimento específico é tanto maior quanto maior for a população de suscetíveis, podendo ser negativo para pequenas quantidades de suscetíveis e também para grandes quantidades de infectados. Isto ocorre porque consideramos que, ao trabalhar com a taxa de crescimento específico, supomos que, proporcionalmente, as variações na classe dos infectados podem ocorrer basicamente de duas maneiras: cresce quando há suscetíveis suficientes para que a doença continue se propagando (alimentando dessa forma a classe de infectados) e decresce de acordo com a recuperação e/ou morte dos infectados. Assim, nas regras formuladas admitimos, que para cada população fixa de suscetíveis, a variação específica dos infectados segue um modelo Malthusiano.

Para os indivíduos suscetíveis admitimos que esta população nunca se extingue. Ou seja, supomos que a população possui um poder de reação de tal forma que, quando a quantidade de suscetíveis é muito baixa, o crescimento específico dos suscetíveis é bastante alto. A taxa de crescimento específico dos suscetíveis aumenta com o número de infectados, podendo ser negativa para grandes populações de suscetíveis. Isto é razoável devido ao fato de considerarmos que, quanto mais infectados, mais indivíduos se recuperam e isso contribui para aumentar o acréscimo na classe dos suscetíveis. Por outro lado, quanto maior o número de suscetíveis, mais indivíduos podem tornar-se infectados. A partir destas considerações podemos

concluir que o crescimento específico dos suscetíveis depende tanto do número de infectados quanto do número de suscetíveis. A não extinção dos suscetíveis nos leva a admitir que o sinal da variação específica de S seja positiva para S pequeno e negativa para S grande. Os termos considerados para ambas as populações foram: baixo (B), médio baixo (M1), médio alto (M2) e alto (A). Para as saídas, consideramos baixo (B) e alto (A) para a variação específica dos infectados e bastante baixo (BB), baixo (B), médio (M) e alto (A) para a variação específica dos suscetíveis, quando positiva. Quando a variação for negativa, acrescentamos "N" para indicar tal fato.

Nas figuras seguintes apresentamos as funções de pertinência para os conjuntos fuzzy considerados.



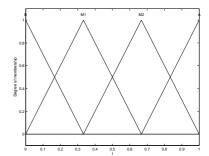


Figura 3: Funções de pertinência para S.

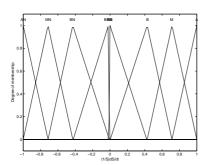


Figura 4: Funções de pertinência para I.

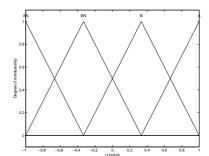


Figura 5: Funções de pertinência para  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$ . Figura 6: Funções de pertinência para  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$ .

As regras utilizadas foram:

- 1. Se S é B e I é B então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é B e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é AN.
- 2. Se S é B e I é M1 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é M e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é AN.

- 3. Se S é B e I é M2 então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é M e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é AN.
- 4. Se S é B e I é A então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é A e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é AN.
- 5. Se S é M1 e I é B então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é BB e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é BN.
- 6. Se S é M1 e I é M1 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é B e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é BN.
- 7. Se S é M1 e I é M2 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é M e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é BN.
- 8. Se S é M1 e I é A então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é A e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é BN.
- 9. Se S é M2 e I é B então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é BBN e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é B.
- 10. Se S é M2 e I é M1 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é BN e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é B.
- 11. Se S é M2 e I é M2 então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é MN e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é B.
- 12. Se S é M2 e I é A então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é AN e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é B.
- 13. Se S é A e I é B então  $\frac{1}{S} \frac{dS}{dt}$  é BN e  $\frac{1}{I} \frac{dI}{dt}$  é A.
- 14. Se S é A e I é M1 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é MN e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é A.
- 15. Se S é A e I é M2 então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é MN e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é A.
- 16. Se S é A e I é A então  $\frac{1}{S}\frac{dS}{dt}$  é AN e  $\frac{1}{I}\frac{dI}{dt}$  é A.

Apresentamos a seguir o campo de direções (figura 7) obtido a partir das regras acima aliadas ao controlador de Mamdani (figura 8) (Barros e Bassanezi, 2006; Amêndola et al., 2004).

# 3 Simulações

As simulações são obtidas, como dissemos, a partir da combinação dos controladores fuzzy com métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias, como Runge-Kutta. O esquema abaixo ilustra nossa metodologia.

A seguir apresentamos algumas simulações realizadas com diferentes condições iniciais, conforme figuras 9, 10, 11 e 12,.

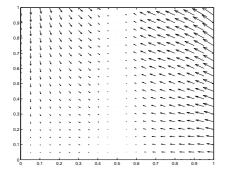


Figura 7: Campo de direções.

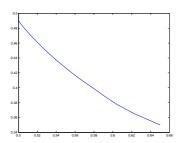


Figura 9: Plano de fase  $S \times I$ , com S(0)=0.65 e I(0)=0.35.

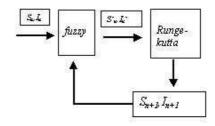


Figura 8: Método iterativo

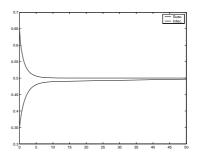
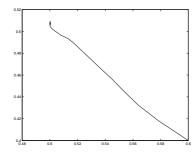


Figura 10: Trajetórias S(t) e I(t), com S(0)=0.65 e I(0)=0.35.

#### 4 Comentários finais

Um dos principais objetivos da epidemiologia matemática é obter, através dos modelos matemáticos propostos, informações sobre como a doença se espalha numa população, visando, essencialmente, definir ações para previnir e/ou conter tal propagação (Yang, 2001). Nos modelos compartimentais determinísticos essa análise depende diretamente dos parâmetros que definem as taxas com as quais os indivíduos se movimentam entre compartimentos, passando de um estágio para outro, como as taxas de recuperação, de contato, de mortalidade e de natalidade.

A partir dos resultados obtidos no modelo proposto neste trabalho, é possível a obtenção de muitas informações relevantes, que podem auxiliar no estudo de modelos determinísticos clássicos. Em particular, para o modelo clássico SIS, com dinâmica vital é sabido que a população de suscetíveis se estabiliza em  $s^* = (\gamma + \mu)/\beta$  onde  $\gamma$ 



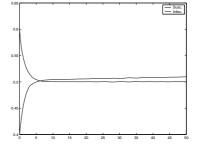


Figura 11: Plano de fase  $I \times S$ , com S(0)=0,6 e I(0)=0,4.

Figura 12: Trajetórias S(t) e I(t), com S(0) = 0.6 e I(0) = 0.4.

é a taxa de recuperação,  $\beta$  é a taxa de contato e  $\mu$  é a taxa de natalidade, neste caso igual à de mortalidade. Considerando a figura 11, verificamos que  $s^* = (\gamma + \mu)/\beta$  ocorre em, aproximadamente, 0,5 o que significa que a taxa de recuperação vale em torno de 50% da taxa de contato. Esta estimativa seria útil para avaliar a Taxa de Reprodutibilidade Basal,  $R_o$  (número de infecções secundárias provocadas por um único indivíduo infectado introduzido numa população inteiramente suscetível) que no modelo SIS é igual a  $\beta/(\gamma + \mu)$ . Para o exemplo acima, teríamos  $R_o = 2$ , ou seja, um indivíduo infectado produz dois novos casos da doença, indicando que esta se estabelece na população ( $R_o > 1$ ). Outra possibilidade para estimar os parâmetros é ajustar a trajetória obtida à solução teórica esperada do modelo determinístico (Pedrycz e Gomide, 1998).

A estimativa dos parâmetros, nos modelos clássicos, requer a coleta de dados e métodos estatísticos para suas obtenções. O que propomos aqui é uma outra possibilidade de estimar parâmetros, que pode corroborar com a anterior, considerando que o a trajetória produzida pelo sistema fuzzy seja razoável, tanto do ponto de vista qualitativo (existência de equilíbrios, estabilidade dos mesmos) quanto quantitativos.

Finalmente, além da possibilidade de se modelar matematicamente variáveis exatas, como as que aparecem nesse trabalho, os sistemas fuzzy têm se mostrado bastante eficientes no manuseio de fenômenos cujas variáveis de estado são inexatas. Este é o caso da variável "potencial de predação" apresentada num modelo do tipo presa-predador estudado por Peixoto et al. (2007) na Morte Súbita dos Citros no

Estado de São Paulo.

### Referências

- Amêndola, M., Souza, A. L., e Barros, L. C. (2004). Manual do uso da teoria dos conjuntos fuzzy no matlab 6.5. Versão 2005 do manual apresentado no Ciclo de Palestras/2004, realizado na FEAGRI-UNICAMP. Disponível em http://www.ime.unicamp.br/~laeciocb.
- Barros, L. C. e Bassanezi, R. C. (2006). Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática. IMECC-UNICAMP, Campinas.
- Barros, L. C., Bassanezi, R. C., e Oliveira, R. Z. G. (2004). Fuzzy differential inclusion: An application to epidemiology. *Soft Methodology and Random Information Systems*, I:631–637.
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology*. Random-House, N. York.
- Pedrycz, W. e Gomide, F. (1998). An introduction to fuzzy sets: analysis and design. The MIT Press, Massachusets.
- Peixoto, M. S., Barros, L. C., e Bassanezi, R. C. (2007). Predator–prey fuzzy model. aceito para publicação no Bulletin of Mathematical Biology.
- Yang, H. M. (2001). Epidemiologia matemática. Ed. Unicamp, Campinas.

## Curvas Padrões de Tratamento do HIV

Rosana Motta Jafelice<sup>1</sup>,
Faculdade de Matemática, UFU, 38.408-100 – Uberlândia/MG.
Rodney Carlos Bassanezi<sup>2</sup>,
Centro de Matemática, Computação e Cognição, UFABC,
09.210-170 – Santo André/SP.

Resumo. Neste artigo determinamos curvas padrões para os dados de exames laboratoriais do linfócito T, do tipo CD4+ e da carga viral de indivíduos HIV positivos, que recebem tratamento com anti-retrovirais. A ferramenta matemática que fornece uma faixa padrão para os dados de exames laboratoriais é a Teoria dos Conjuntos Fuzzy. Assim, utilizamos um sistema de equações diferenciais ordinárias com condição inicial fuzzy para descrever de forma mais adequada o comportamento destes dados, podendo auxiliar os especialistas da área da saúde para futuras previsões dos exames laboratoriais de seus pacientes.

Palavras-chave: Conjuntos Fuzzy, AIDS, Equações Diferenciais Ordinárias, Curva Padrão.

## 1. Introdução

A AIDS (Síndrome da Imunodeficiência Adquirida) tornou-se um problema mundial de saúde. Países onde o controle da AIDS é pequeno, ou inexistente, como alguns da África, a população HIV-positivo apresenta alta taxa de mortalidade. No Brasil, após o uso da terapia anti-retroviral, a queda da mortalidade foi de aproximadamente 50% segundo o Ministério da Saúde.

O objetivo deste trabalho é estudar curvas padrões para o comportamento dos dados dos exames laboratoriais do linfócito T, do tipo CD4+ e da carga viral de indivíduos HIV positivos, que recebem tratamento com anti-retrovirais. Sendo linfócito T, do tipo CD4+ o principal linfócito que o retrovírus HIV ataca ao atingir a corrente sangüínea.

 $<sup>^{1}</sup>$ rmotta@ufu.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>rodney@ime.unicamp.br

56 Jafelice & Bassanezi

Os especialistas da área da saúde têm dificuldades em fazer previsões para os indivíduos HIV positivos, devido as incertezas da dinâmica do HIV ao receber terapia anti-retroviral. Utilizando a Teoria dos Conjuntos Fuzzy determinamos uma faixa padrão que contém a maioria dos dados dos exames laboratoriais de nível de CD4+e carga viral de indivíduos HIV positivos. A Teoria da Lógica Fuzzy introduzida por Zadeh em 1965 (Zadeh, 1965) é utilizada em sistemas dinâmicos (Hüllermeier, 1997), (Jafelice, 2003), (Jafelice et al., 2002), (Mizukoshi et al., 2003) e (Oberguggenberger e Pittschmann, 1999) fornece condições básicas para modelar fenômenos empregnados de incertezas, como os epidemiológicos. Os resultados de exames laboratoriais de indivíduo que recebem tratamento com anti-retrovirais apresentam uma variabilidade muito grande o que dificulta sua padronização.

Apresentamos a seguir uma primeira aproximação para dados de exames laboratoriais do linfócito T, do tipo CD4+e da carga viral de dez indivíduos HIV positivos, que aderiram regularmente ao tratamento com anti-retrovirais.

## 2. Regressão - Uma Primeira Aproximação

A partir de dados de exames laboratoriais do linfócito T, do tipo CD4+ e da carga viral de dez pacientes do Ambulatório Herbert de Souza em Uberlândia-MG, com quantidades e datas de exames diferentes, realizamos nosso estudo.

Consideramos o primeiro exame do linfócito T, do tipo CD4+ e da carga viral, de cada paciente, como sendo o tempo inicial t=0 e em seguida, somamos o número de meses para o próximo exame, e assim sucessivamente. Assim, construímos um vetor para os exames laboratoriais do nível de CD4+ e outro vetor, para os exames da carga viral para cada paciente.

Em seguida, construímos novos vetores para os exames da carga viral e do linfócito T, do tipo CD4+, um vetor para todos os exames de carga viral e outro vetor para todos os exames do linfócito T, do tipo CD4+ dos indivíduos HIV no tempo igual a zero. Em outros vetores, todos os exames do linfócito T, do tipo CD4+ e da carga viral, com o mesmo intervalo de tempo do primeiro exame para o segundo exame, e assim, sucessivamente.

Depois construímos, dois vetores com os valores dos exames laboratoriais do nível de CD4+, tomando em um destes vetores, os valores mínimos e no outro, os valores

máximos de cada um dos vetores construídos anterirmente. O mesmo procedimento foi realizado para os exames laboratoriais da carga viral.

Utilizamos a Média Móvel, que é um dos indicadores de tendências mais antigos a ser utilizados em análise técnica. A média móvel é calculada por ciclos, no trabalho calculamos a média móvel com ciclos de seis valores de exames laboratoriais, para os valores máximos e para os valores mínimos exames laboratoriais do nível de CD4+. Os primeiros dois valores de média móvel foram calculados pelas equações:

$$\bullet \ \frac{\sum_{i=1}^{6} E_i}{6} \qquad \bullet \ \frac{\sum_{i=2}^{7} E_i}{6}$$

O cálculo prossegue até que toda a série seja percorrida. O efeito da média móvel é remover variações sazonais, cíclicas e irregulares e o que restar é considerado tendência. O problema é que na prática é impossível remover completamente as variações cíclicas e irregulares. O ideal é escolher um período bastante longo para a média móvel a fim de permitir a remoção das variações cíclicas e irregulares.

Em seguida, calculamos a média aritmética para a média móvel dos valores de máximo e mínimo dos exames laboratoriais do nível de CD4+. O mesmo procedimento foi realizado para os valores dos exames laboratoriais da carga viral.

As Figuras 1 e 2 mostram os valores encontrados para o nível de CD4+ e a carga viral após os cálculos anteriores.

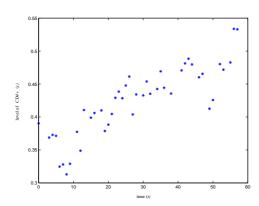


Figura 1: Os valores dos exames laboratoriais do nível de CD4+ após o cálculo de médias.

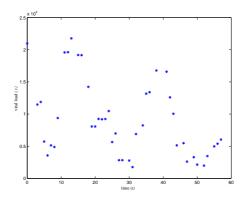


Figura 2: Os valores dos exames laboratoriais da carga viral, após o cálculo de médias.

58 Jafelice & Bassanezi

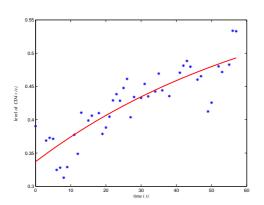
A partir dos valores obtidos, calculamos um ajuste exponencial, para os exames laboratoriais do nível de CD4+ (c) e carga viral (v), devido ao comportamento destes dados. Assim, obtivemos

$$c(t) = 0.618 - 0.2811e^{-0.0141t} (2.1)$$

$$v(t) = 12224.4e^{-9.4111t} (2.2)$$

que são as curvas padrões determínisticas para os exames laboratoriais do nível do CD4+ e da carga viral dos indivíduos HIV, Figuras 3 e 4.

Como podemos observar para os dados das Figuras 1 e 2, tal regressão é um pouco grosseira, motivo pelo qual procuramos novas aproximações com comportamento periódico.



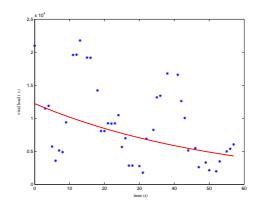


Figura 3: Curva padrão determinística para o nível de *CD4+*.

Figura 4: Curva padrão determínística para a carga viral.

Na próxima seção apresentamos o modelo clássico da dinâmica do HIV, segundo Novak e Bangham (1996) e o modelo deterministico periódico que obtivemos a partir dos dados dos exames laboratoriais de pacientes do Ambulatório Herbert de Souza localizado em Uberlândia-MG.

#### Dinâmica do HIV com Tratamento - Modelos Deter-3 minísticos

Novak e Bangham apresentam modelos da dinâmica de infecção do HIV, sem tratamento com anti-retrovirais. O modelo contém três variáveis dependentes do tempo: células não infectadas, células infectadas e partículas de vírus livres, representadas por n, i e v, respectivamente. Partículas de vírus invadem células não infectadas, infectando-as a uma taxa proporcional ao produto nv. Células infectadas produzem novos vírus livres a uma taxa dada por ki. No modelo supõe que células não infectadas são continuamente produzidas pelo organismo a uma taxa constante r. O seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias (Novak e Bangham, 1996), descreve este modelo.

$$\frac{dn}{dt} = r - an - \beta nv \tag{3.3}$$

$$\frac{dn}{dt} = r - an - \beta nv$$

$$\frac{di}{dt} = \beta nv - bi$$
(3.3)

$$\frac{dv}{dt} = ki - sv$$

(3.5)

onde: n células não infectadas; i células infectadas e v carga viral.

Como os exames laboratoriais para os indivíduos HIV positivos são para carga viral e nível de CD4+, então consideramos um modelo alternativo onde o nível de CD4+ é igual à soma das células não infectadas com as células infectas do linfócito T, do tipo CD4+, isto é, c=n+i. Desta forma, obtemos um novo sistema de equações diferenciais ordinárias (3.8), onde a primeira equação deste sistema é obtida pela soma de (3.3) com (3.4). A segunda equação é obtida da morte do vírus e da reprodução do mesmo, que decorre do encontro do linfócito T, do tipo CD4+ e do HIV, ou seja,

$$\frac{dc}{dt} = r - k_1 c \tag{3.6}$$

$$\frac{dv}{dt} = -sv + k_2 cv \tag{3.7}$$

(3.8)

60 Jafelice & Bassanezi

onde  $c_0 = c(0)$  e  $v_0 = v(0)$  são as condições iniciais.

Resolvendo a equação (3.6) do sistema (3.8), obtemos:

$$c(t) = \frac{r}{k_1} + c_1 e^{-k_1 t}. (3.9)$$

onde  $c_1 = c_0 - \frac{r}{k_1}$ .

Substituindo a equação (3.9) na equação (3.7), obtemos:

$$v(t) = e^{\left(-s + \frac{k_2 r}{k_1}\right)t - \frac{k_2 c_1}{k_1}e^{-k_1 t} + A_1}$$
(3.10)

O novo passo é determinar os valores dos parâmetros do sistema de equações diferenciais (3.8). Comparando as equações (2.1) e (3.9), obtemos os valores dos parâmetros:  $c_1 = -0.2811$ ,  $k_1 = 0.0141$  e  $\frac{r}{k_1} = 0.618$ . Assim, r = 0.00871.

Os pontos de equilíbrio estáveis do sistema de equações diferenciais (3.8) são  $(\overline{c}, \overline{v}) = (\frac{r}{k_1}, 0)$  se  $-s + \frac{rk_2}{k_1} < 0$  e  $(\overline{c}, \overline{v}) = (\frac{s}{k_2}, e^{A_1})$  se  $\frac{s}{k_2} = \frac{r}{k_1}$ . Na Figura 2, observamos que quando  $t \to \infty$  os dados se aproximam de 4000

cópias de RNA/ml. Assim,  $e^{A_1} \cong 4000$ , logo  $A_1 \cong ln(4000) \cong 8.29$ .

Quando t = 0 na equação (3.10), obtemos:

$$v_0 = e^{-\frac{k_2 c_1}{k_1} + A_1} = \overline{v}e^{-\frac{k_2 c_1}{k_1}}.$$
(3.11)

Fazendo t=0 na equação (2.2), obtemos:  $v_0=12224.4$ . A partir de  $v_0=12224.4$ e da equação (3.11), determinamos  $k_2 = 0.05603$ .

Para determinarmos curvas periódicas para os dados de exames laboratoriais do nível de CD4+ e da carga viral, observamos os dados do nível de CD4+ na Figura 1 e concluímos que os períodos ocorrem a aproximadamente cada 13 unidades de tempo. Assim, somamos a equação (3.9) o ruído

$$0.04\cos\left(\frac{2\pi t}{13}\right). \tag{3.12}$$

e obtemos

$$c(t) = \frac{r}{k_1} + c_1 e^{-k_1 t} + 0.04 \cos\left(\frac{2\pi t}{13}\right).$$
(3.13)

Substituíndo a equação (3.13) na equação (3.7), obtemos:

$$v(t) = \left(e^{\left(-s + \frac{k_2 r}{k_1}\right)t - \frac{k_2 c_1}{k_1}e^{-k_1 t} + A_1}\right) \left(e^{0.04k_2 sen\left(\frac{2\pi t}{13}\right)\frac{13}{2\pi}}\right). \quad (3.14)$$

A equação (3.14) é a solução da equação diferencial (3.7) multiplicada por

$$e^{0.04k_2sen\left(\frac{2\pi t}{13}\right)\frac{13}{2\pi}}.$$

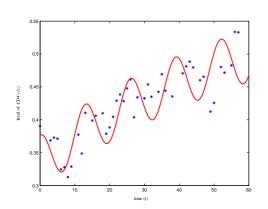
Para que a curva v(t) melhor se adeque aos dados da Figura 1, utilizamos o ruído igual a

$$\frac{2.5k_2sen}{e} \left(\frac{2\pi t}{13}\right) \frac{13}{2\pi}.$$
(3.15)

Assim,

$$v(t) = \left(e^{\left(-s + \frac{k_2 r}{k_1}\right)t - \frac{k_2 c_1}{k_1}}e^{-k_1 t} + A_1 + 2.5k_2 sen\left(\frac{2\pi t}{13}\right)\frac{13}{2\pi}\right). \tag{3.16}$$

As Figuras 5 e 6 mostram as curvas determinísticas periódicas para o nível de CD4+ e para a carga viral.



2.5 x 10<sup>4</sup>

2.5 x

Figura 5: Curva determinística periódica para o nível de CD4+.

Figura 6: Curva determínística periódica para a carga viral.

Na próxima seção, apresentamos o modelo de equações diferenciais ordinárias períodica, com condição inicial fuzzy triangular.

62 Jafelice & Bassanezi

## 4 Dinâmica do HIV - Modelo com Condição Inicial Fuzzy

O modelo que vamos propor pressupõe que a condição inicial (nível de CD4+ e carga viral no instante inicial) tenha características subjetivas ou sejam difíceis de uma avaliação exata. Por contemplar tal subjetividade usamos o conceito de número fuzzy para avaliar  $c_0$  e  $v_0$ . Um número fuzzy tem a conotação de "em torno de" e é definido por uma função de pertinência u que a cada elemento x de  $\mathcal{U}$  associa um número u(x), entre zero e um chamado de grau de pertinência de x.

Nesta seção, assumimos que o nível de CD4+ é inicialmente caracterizado por uma função de pertinência triangular  $u_{C_0}$  para  $C_0$ , Figura 7:

$$u_{C_0}(c) = \begin{cases} 0 & \text{se } c \leq \underline{c} - \delta \\ \frac{1}{\delta}(c - \underline{c} + \delta) & \underline{c} - \delta < c \leq \underline{c} \\ \frac{-1}{\delta}(c - \underline{c} - \delta) & \underline{c} < c \leq \underline{c} + \delta \\ 0 & \text{se } c > \underline{c} + \delta \end{cases}$$
(4.17)

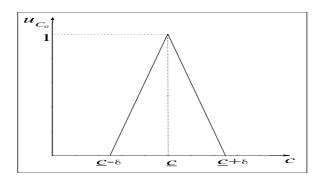


Figura 7: Função de pertinência para  $C_0$ .

O parâmetro  $\underline{c}$  é o valor modal e  $\delta$  a dispersão do número fuzzy  $C_0$ .

Como sugerido em (Hüllermeier, 1997), (Oberguggenberger e Pittschmann, 1999) e (Mizukoshi et al., 2003), resolvemos o sistema de equações diferenciais não-linear (3.8) para cada valor de  $c_0$  no suporte de  $C_0$ , isto é, para cada  $c_0 \in supp(C_0)$ . Via Princípio da Extensão de Zadeh podemos assumir que a solução correspondente c(t) tem o mesmo grau de pertinência de  $c_0$ . A Figura 8 ilustra a solução obtida para condição inicial fuzzy  $C_0$  (da Figura 7) com  $\underline{c} = 0.3369$  e  $\delta = 0.1$ . O mesmo

procedimento é realizado para a carga viral tomando como condição inicial o número fuzzy triangular  $V_0$  com  $\underline{v}=12500$  e  $\delta=10500$ , como mostra Figura 9.

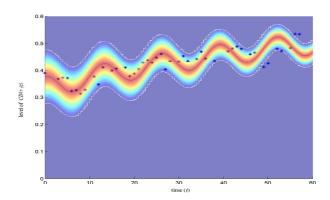


Figura 8: Solução da equação do nível de CD4+(3.6) com condição inicial fuzzy triangular.

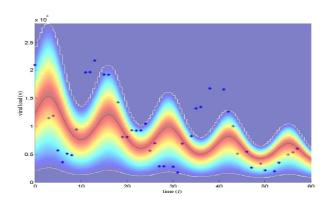


Figura 9: Solução da equação da carga viral (3.7) com condição inicial fuzzy triangular.

Assim, como mostram as Figuras 8 e 9 a solução do sistema de equações de diferenciais (3.8) com condição inicial fuzzy, fornece como solução uma "faixa" que contém a maioria dos dados dos exames laboratoriais do nível de CD4+ e de carga viral de indivíduos HIV positivos.

54 Jafelice & Bassanezi

#### 5 Conclusão

Neste trabalho, introduzimos um modelo que apresenta como solução uma faixa para previsão dos exames laboratoriais do nível de CD4+ e da carga viral dos indivíduos HIV positivos. Esta faixa pode ajudar o especialista da área médica a verificar se os pacientes estão aderindo regularmente ao tratamento com antiretrovirais.

A teoria dos conjuntos fuzzy é importante neste contexto devido à incerteza e imprecisão deste fenômeno biológico. Quando introduzimos a condição inicial fuzzy, estamos modelando a condição, que os individuos HIV tem diferentes valores de exames laboratoriais no instante inicial, fato que é constatado na realidade.

#### Referências

- Hüllermeier, E. (1997). An approach to modelling and simulation of uncertain dynamical systems. *International Journal of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*, 5(2):117–137.
- Jafelice, R. (2003). Modelagem Fuzzy para Dinâmica de Transferência de Soropositivos para HIV em Doença Plenamente Manifesta. PhD thesis, FEEC, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil.
- Jafelice, R., Barros, L., Bassanezi, R., e Gomide, F. (2002). Fuzzy rules in asymptomatic HIV virus infected individuals model. In *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, 85, páginas 208–215. IOS Press Ohmsha.
- Mizukoshi, M., Y.Chaco-Cano, Barros, L., e Bassanezi, R. (2003). Equação diferencial com parâmetro fuzzy. Technical Report 09, IMECC-UNICAMP.
- Novak, M. e Bangham, C. (1996). Population dynamics of immune responses to persistene viruses. *Science*, 272.
- Oberguggenberger, M. e Pittschmann, S. (1999). Differential equations with fuzzy parameters. *Math. and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 5:181–202.
- Zadeh, L. (1965). Fuzzy sets. Information and Control, 8:338–353.

# Padrões de Turing em um Sistema Presa-Predador

Luiz Alberto D. Rodrigues, Denilson J. Seidel<sup>2</sup> & Diomar C. Mistro<sup>3</sup> Depto. de Matemática, CCNE – UFSM, Santa Maria/RS.

Resumo. Neste trabalho formulamos um modelo discreto espacialmente estruturado para um sistema presa-predador com efeito Allee fraco para as presas e competição intra-específica para os predadores. O modelo proposto utiliza Redes de Mapas Acoplados, onde o tempo e o espaço são considerados discretos e a variável de estado é contínua. Através de simulações verificamos que o modelo produz padrões espaciais heterogêneos estáveis quando o estado de equilíbrio homogêneo é perturbado.

Palavras-chave: Formação de Padrões; Redes de Mapas Acoplados; Efeito Allee.

## 1. Introdução

O problema de formação de estruturas espaciais heterogêneas a partir de um sistema inicialmente homogêneo, sem qualquer interferência do meio ambiente, foi estudado na década de 50 por Alan Turing (Turing, 1952). Embora o trabalho de Turing tenha sido apresentado no contexto da morfogênese, sua aplicabilidade e implicações são amplamente difundidas (Murray, 1993). Em sistemas ecológicos, estruturas regulares de diferentes tipos podem ser identificadas pois, em geral, as distribuições espaciais de indivíduos tendem a ser altamente heterogêneas. Os ingredientes essenciais considerados por Turing na formação de padrões são as interações entre as espécies e a difusão. Concluiu que, sob certas condições bem definidas, interações não lineares junto com difusão podem gerar estruturas espaciais complexas.

L. A. Segel e J. L. Jackson (Segel e Jackson, 1972) foram os primeiros a demonstrar que padrões podem ocorrer em Ecologia via instabilidade difusiva, estabelecendo uma analogia entre substâncias químicas que reagem e espécies que interagem em certos sistemas presa-predador.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>luizdiaz@smail.ufsm.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>denilsonjose@zipmail.com.br

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>dcmistro@gmail.com

Em 1931, o ecologista Warder Clyde Allee chamou a atenção para o fato de algumas populações serem afetadas por uma relação positiva entre a taxa de crescimento e a densidade populacional. Em outras palavras, à medida que a densidade populacional aumenta, a sobrevivência e a taxa de reprodução também crescem (Wang e Kot, 2001).

Os modelos em dinâmica populacional, em geral, consideram o fator de crescimento como uma função decrescente da densidade da população. Esta dependência negativa da densidade justifica-se pela competição intra-específica. No entanto, esta hipótese pode não ser adequada em determinados casos. Se a população é muito pequena não há razão para que ocorra a competição por espaço e nutrientes. Assim, é razoável considerar, para densidades populacionais muito pequenas, o fator de crescimento como uma função crescente da densidade populacional. Este mecanismo é conhecido como efeito Allee (Wang e Kot, 2001).

Rodrigues et al. (2006) analisaram a formação de padrões espaciais em um sistema presa-predador com efeito Allee forte para as presas. Padrões espaciais heterogêneos foram obtidos para perturbações abaixo da densidade limiar do efeito Allee, o que indica que os padrões obtidos neste modelo não são gerados pelo mecanismo de Turing.

Neste trabalho propomos um modelo discreto equivalente ao modelo contínuo analisado por Segel e Jackson (1972). Consideramos um sistema presa-predador com efeito Allee fraco para as presas e mortalidade devido à competição intra-específica para os predadores.

## 2. Modelo presa-predador espacialmente estruturado

O modelo proposto é um reticulado de mapas acoplados ("Coupled Map Lattice"). O estado do sistema é descrito por uma matriz ou, de maneira equivalente, atribuindo valores para a densidade populacional em cada vértice de um reticulado plano. A dinâmica do modelo é composta por dois estágios distintos: uma fase de dispersão e uma fase de interação.

A cada geração, uma fração  $\mu_N$  da população de presas e uma fração  $\mu_P$  da população de predadores abandona seu sítio para colonizar equitativamente os quatro sítios mais próximos. As equações para a migração são expressas por:

$$N'_{i,j} = (1 - \mu_N)N^t_{i,j} + \sum_{(s,w)\in V_{i,j}} \frac{\mu_N}{4} N^t_{s,w}, \tag{2.1}$$

$$P'_{i,j} = (1 - \mu_P)P^t_{i,j} + \sum_{(s,w)\in V_{i,j}} \frac{\mu_P}{4} P^t_{s,w}, \tag{2.2}$$

onde  $N_{i,j}^t$  e  $P_{i,j}^t$  são as densidades populacionais das presas e predadores, respectivamente, no sítio (i,j) e no instante t,  $N_{i,j}^{'}$  e  $P_{i,j}^{'}$  representam as densidades populacionais após a movimentação e  $V_{i,j} = \{(i-1,j), (i+1,j), (i,j-1), (i,j+1)\}$  é a vizinhança do sítio (i,j).

As equações que descrevem o processo de interação entre as espécies dentro de cada sítio são dadas pelo seguinte sistema de equações a diferenças adimensional:

$$N_{i,j}^{t+1} = \frac{(N'_{i,j})^2 + rN'_{i,j}}{1 + b(N'_{i,j})^2} \exp(-P'_{i,j}), \tag{2.3}$$

$$P_{i,j}^{t+1} = P'_{i,j} \exp \left[ cN'_{i,j} - m(P'_{i,j})^2 \right].$$
 (2.4)

A dinâmica vital das presas no sistema (2.3) e (2.4), exibe um Efeito Allee fraco (r>1) na ausência de predadores (P=0), a qual é descrita pela função  $f(N)=\frac{N^2+rN}{1+bN^2}$ . O Efeito Allee forte (r<1) introduz um limiar populacional: a população de presas precisa ultrapassar este limiar para crescer; abaixo dele, a população irá à extinção. Para o efeito Allee fraco não há limiar de extinção. A população mostra um fator de crescimento pequeno para baixas densidades populacionais. Este efeito pode surgir de uma baixa eficiência em procurar alimentos ou parceiros em baixas densidades (Wang e Kot, 2001). A dinâmica dos predadores inclui, além de crescimento dependente da densidade de presas representado pelo fator  $\exp(cN)$ , um fator de combate, isto é, competição intra-específica descrito por  $\exp(-mP^2)$ . Observamos que a competição é pequena para densidades baixas de predadores.

A solução de equilíbrio não trivial do modelo presa-predador sem dispersão, é dada implicitamente por

$$(N^*, P^*) = \left(\frac{m}{c}(P^*)^2, \ln\left[\frac{N^* + r}{1 + b(N^*)^2}\right]\right). \tag{2.5}$$

A idéia de Turing é simples: na ausência da difusão, N e P apresentam um estado de equilíbrio uniforme linearmente estável a pequenas perturbações. Quando a difusão está presente, o estado de equilíbrio uniforme torna-se instável a pequenas perturbações espaciais que podem conduzir a padrões espaciais heterogêneos fixos. Este mecanismo é conhecido como instabilidade difusiva.

## 3. Simulações

Com o intuito de verificar se há formação de padrões espaciais, consideramos um habitat de  $50 \times 50$  sítios, com condições de fronteira reflexivas. A configuração inicial constitui-se de uma pequena perturbação na distribuição uniforme de ambas as populações correspondente ao valor de equilíbrio não-trivial sem dispersão  $(N^*, P^*)$ , obtido numericamente para cada conjunto de parâmetros escolhido. Além disso, para todas as simulações realizadas, o número de iterações é escolhido de forma a garantir que um novo estado de equilíbrio estável seja alcançado.

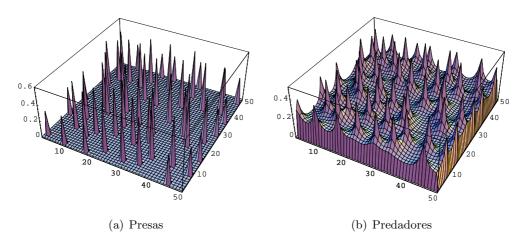


Figura 1: Densidade Populacional (a) de presas e (b) de predadores.

As figuras 1-3 ilustram os resultados da simulação com os parâmetros r=1,15, b=0,8, c=1 e m=0,5. As taxas de movimentação, neste caso, foram  $\mu_N=0,01$  e  $\mu_P=0,95$ , de modo que a movimentação do predador seja muito mais rápida do que a da presa (Holmes et al., 1994). A figura 1 mostra a densidade de presas e predadores após o novo equilíbrio ter sido alcançado, podemos observar que presas

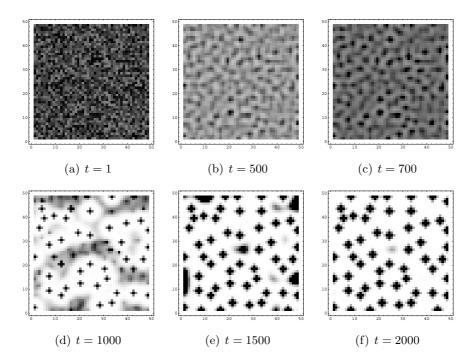


Figura 2: Distribuição espacial de presas em diferentes instantes de tempo.

concentram-se em determinadas regiões do habitat enquanto os predadores estão distribuídos por todo o domínio, apresentando picos de concentração nas regiões de maior densidade das presas. Na figura 2, estão ilustradas a distribuição espacial das presas em diferentes tempos e, na figura 3 a população total de presas e predadores. Há um aumento na população total de predadores enquanto que a população total de presas permanece aproximadamente no valor de equilíbrio.

A figura 4 ilustra o padrão espacial heterogêneo atingido por presas e predadores após a distribuição homogênea ter sido perturbada, para os parâmetros r=1,2, b=0,5, c=0,2, m=0,5 sendo, (a) com  $\mu_N=0,1$  e  $\mu_P=0,95$  e, (b)  $\mu_N=0$  e  $\mu_P=0,95$ . O padrão final depende, além dos parâmetros dinâmicos, das taxas de movimentação dos indivíduos. Taxas de movimentação muito baixas para as presas podem promover sua exclusão de determinadas regiões, como observado em Fig. 4(c).

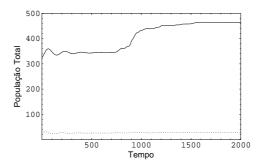


Figura 3: População total de presas (curva pontilhada) e de predadores (curva contínua).

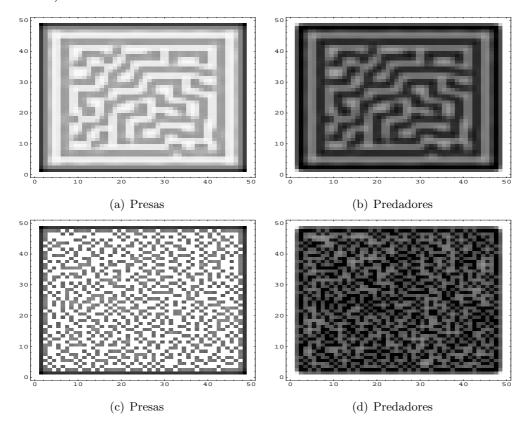


Figura 4: Distribuição espacial heterogênea de presas ((a) e (c)) e de predadores((b) e (d)).

#### 4. Conclusões

Neste trabalho foi construído um modelo presa-predador, espacialmente estruturado, com Efeito Allee fraco para as presas e competição intra-específica para os predadores, utilizando Redes de Mapas Acoplados.

Os resultados obtidos sugerem que pequenas perturbações locais nas populações de presas e predadores podem ocasionar formação de diferentes padrões espaciais heterogêneos fixos do tipo Turing. O padrão resultante depende dos parâmetros dinâmicos e das taxas de movimentação. As duas espécies podem coexistir formando regiões de alta concentração de ambas espécies alternadas com regiões de baixas concentrações e pode ocorrer também a extinção das presas em determinadas regiões do habitat onde apenas os predadores persistem. Observamos que os picos de concentração das presas são mais pronunciados que dos predadores. Estes resultados alertam para o perigo de extinção de espécies que apresentam efeito Allee fraco. Uma pequena redução da população de presas, pode confiná-las a determinadas regiões. Neste cenário, sua mobilidade é um fator determinante. Taxas de movimentação suficientemente altas para as presas permitem que as regiões com baixas densidades possam ser recolonizadas havendo ou não formação de padrões heterogêneos. Estes resultados estão de acordo com os resultados obtidos com modelos contínuos análogos (Okubo e Levin, 2001).

Em trabalhos futuros, pretendemos obter condições analíticas para formação de padrões heterogêneos fixos.

#### Referências

Holmes, E. E., Lewis, M. A., Banks, J. E., e Veit, R. R. (1994). Partial differential equations in ecology: Spatial interactions and population dynamics. *Ecology*, 75:17–29.

Murray, J. D. (1993). Mathematical Biology. Springer-Verlag, Berlin, 2 edition.

Okubo, A. e Levin, S. (2001). Diffusion and Ecological Problems: Modern Perspectives. Springer-Verlag, New York.

- Rodrigues, L. A. D., Seidel, D. J., e Mistro, D. C. (2006). Formação de padrões em um modelo presa-predador discreto. *BIOMATEMÁTICA*, 16:1–13.
- Segel, L. A. e Jackson, J. L. (1972). Dissipative structure: An explanation and an ecological example. *Journal of Theoretical Biology*, 37:545–559.
- Turing, A. M. (1952). The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, 237(B):37–72.
- Wang, M. H. e Kot, M. (2001). Speeds of invasion in a model with strong or weak allee effects. *Math. Biosci.*, 171:83–97.

## Estudo da poluição por esgoto num trecho urbano de rio

Geraldo L. Diniz<sup>1</sup>

DMAT, ICET-UFMT, 78.060-900 – Cuiabá/MT.

Suely A. F. Alegria<sup>2</sup>

Mestrado em Física e Meio Ambiente, ICET-UFMT, 78.060-900 - Cuiabá/MT.

Resumo. Neste trabalho é apresentado um problema de contaminação num trecho de rio, através do esgoto lançado no rio. Para tanto, é proposto um modelo matemático unidimensional, no sentido de descrever a dispersão do poluente neste trecho do rio, em função dos fenômenos físicos considerados. É verificada a existência de solução do ponto de vista fraco e são utilizados métodos de aproximação numérica para as simulações dos cenários. Nas simulações foram consideradas velocidades médias da correnteza do rio em duas estações, seca e chuvosa, para um intervalo de tempo previamente escolhido.

Palavras-chave: Poluição por esgoto; Modelo matemático; Simulação da dispersão; Método dos elementos finitos;

## 1 Introdução

Uma das principais causas da poluição das águas é a matéria orgânica presente no esgoto, uma vez que, a solução "imediata" adotada pelos órgãos responsáveis pelo saneamento básico, é o lançamento nos corpos d'água, na maioria das vezes sem nenhum tratamento prévio, comprometendo a qualidade da água não apenas no local onde o esgoto é despejado, mas em toda a sua bacia hidrográfica.

Assim, este estudo foi realizado no rio Coxipó, que é um integrante da área turística de Chapada dos Guimarães, bem como uma sub-bacia do rio Cuiabá, um dos principais rios formadores do Pantanal Matogrossense, e nele são despejados esgoto doméstico, grande parte in natura, implicando em consequências ao pantanal, a saúde da população e acarretando a descaracterização ao meio ambiente.

 $<sup>^{1}\</sup>mathrm{geraldo@ufmt.br}$ 

 $<sup>^2</sup>$ jalegria@terra.com.br

No Brasil, apenas 20% do esgoto passa por tratamento. O restante é despejado nos cursos d'água, contribuindo para aumentar a sujeira, as enchentes e as doenças (Cunha e Ferreira, 2006). De acordo com Cunha e Ferreira (2006), o controle da poluição de recursos hídricos pode ser um importante aliado para a implementação de ações de prevenções da saúde e do meio ambiente, tendo em vista a importância desses sistemas para a vida.

Nesse aspecto, modelos matemáticos, adaptados a realidade podem contribuir no sentido de tomada de decisão para medidas que resguardem a qualidade da água. O aprimoramento de modelos matemáticos, em hidrologia urbana, contribui para a redução de incertezas em estudos de diagnóstico de sistemas existentes, de concepção e de dimensionamento de soluções de poluição Nascimento e Heller (2005).

## 2 Descrição do problema

O rio Coxipó tem sua nascente na Área de Proteção Ambiental e Chapada dos Guimarães, próxima à estrada que vai para localidade de Água Fria, com altitude aproximada de 868 metros, a noroeste da cidade de Chapada dos Guimarães – MT, junto a Serra de Atmã. Apresenta duas características hidráulicas: rio de planalto e de planície pantaneira Rocha (2003).

No município de Cuiabá drena vários bairros e finalmente, deságua no rio Cuiabá (ver Figura 1).

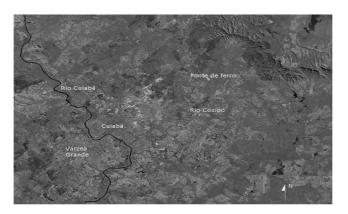


Figura 1: Localização da área de estudo, fonte: EMBRAPA (2007).

Com base nas condições hidrológicas e de descargas de efluentes no trecho do rio, que vai desde a Ponte de Ferro até a foz no Rio Cuiabá, foi construído o modelo matemático que descreve o processo de contaminação nesta parte do rio Coxipó/MT. O presente estudo corresponde a um trecho do rio numa região de concentração urbana, onde o rio recebe esgoto doméstico, em parte sem nenhum tratamento prévio, com um percurso total de aproximadamente 35 km, em que drena vários bairros.

No sentido de avaliar a qualidade da água no rio Coxipó, Almeida Filho (2002) analisou as variáveis: precipitação, cor aparente, turbidez, pH, alcalinidade e coliformes totais. A variável coliforme total, no perímetro urbano, apresentou em 87,5% dos valores, acima do estabelecido pela resolução CONAMA 20/86 (Conselho Nacional do Meio Ambiente).

De acordo com Melo e Cunha (2006), constatou-se uma carência de estudos específicos dos recursos hídricos neste local, bem como de investimentos para recuperação e monitoramento dos mananciais dessa região.

Cunha e Ferreira (2006), defende que o restabelecimento do equilíbrio do meio aquático por mecanismos essencialmente naturais, passa pela predominância do tipo de transporte, no meio aquático, como e quando, a carga poluidora é lançada.

Com base neste contexto é que se propõe o presente estudo, que envolve a construção de um modelo matemático, para descrever o processo de dispersão de poluentes neste trecho do rio.

#### 2.1 O modelo matemático

O modelo matemático foi desenvolvido para estudar a dispersão de poluentes no trecho do rio descrito anteriormente. No modelo, consideraremos os fenômenos de difusão efetiva, transporte advectivo, os fenômenos de decaimento global e as fontes poluidoras.

Chamando de C(x,y,t) a concentração de esgoto (em ppm) no ponto (x,y) para o instante t, com  $(x,y,t) \in \Omega \times (0,T]$ , o modelo pode ser descrito genericamente por:

```
\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{difusão} - \text{advecção} - \text{decaimento} + \text{fonte, onde:}

\text{difusão} = \text{div} [-\alpha \nabla C], \text{ (cf. Okubo (1980))};

\text{transporte} = \text{div} [\vec{V}C], \text{ (cf. Edelstein-Keshet (2005))};
```

decaimento =  $\sigma$  C, (cf. Bassanezi e Jr. (1988)); e fonte =  $f_i(x_i, y_i)$ , (cf. Carreras e Menéndez (1990)).

Dessa forma, a equação evolutiva que modela a concentração de esgoto, denominada equação de transporte, é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -div(-\alpha \nabla C) - div(\vec{V}C) - \sigma C + f. \tag{1}$$

onde,

α = é a constante de difusibilidade efetiva no meio aquático;

 $\overrightarrow{V}$  =é o campo de velocidades do meio aquático;

 $\sigma$  = é a taxa de decaimento global no meio aquático e

f será dada pelas condições de contorno, através das descargas de efluentes.

Nesta primeira abordagem vamos considerar fontes pontuais em apenas três pontos de descarga que são os córregos: Tijuca (A), aproximadamente a 20 km do ponto inicial do trecho do rio em estudo, Castelhano (B), aproximadamente a 24 km e Moinho (C), aproximadamente a 28 km, conforme a Figura 2, a seguir.

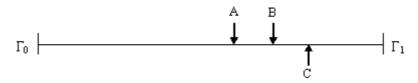


Figura 2: Descrição do domínio do modelo unidimensional.

Na fronteira  $\Gamma_0$  (x = 0), vamos considerar que no ponto inicial do trecho do rio em estudo o nível de poluentes é zero, representada pela condição (2) a seguir; em  $\Gamma_1$  (x = 35 km), indicando a foz do rio Coxipó, a passagem de poluente é representada pela condição (3).

Assim, as condições de contorno para o domínio  $\Omega$  (onde,  $\partial\Omega=\Gamma_0~\cup~\Gamma_1$ ), serão:

$$C|_{\Gamma_0} = 0 \tag{2}$$

e

$$-\alpha \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = \beta \ C_f \tag{3}$$

sendo  $\beta$  a permeabilidade na jusante e  $C_f$ a concentração de poluente no nó final.

Desta forma, as equações (1–3) representam o modelo unidimensional para o fenômeno de dispersão de esgoto neste trecho do rio Coxipó, em sua formulação clássica. A seguir, passaremos à formulação variacional para este modelo.

#### 2.2 Formulação variacional

O objetivo da formulação variacional da formulação clássica é conseguir uma outra formulação das equações (1-3), propondo uma solução denominada solução fraca, introduzindo as derivadas no sentido de distribuições, que no campo variacional, hilbertiano, possibilita obter com maior simplicidade os resultados de existência e unicidade de solução, a ser procurada num espaço de funções conveniente.

O processo para obtenção da formulação variacional é desenvolvido da seguinte forma:

- Considerar as derivadas de (1) no sentido das distribuições;
- Efetuar o produto interno de cada termo das equações por uma funçãov, denominada função teste, sendo esta pertencente a um subespaço conveniente de

 $\mathrm{H}^1(\Omega) = \left\{ v \; (x) \in \mathrm{L}^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x} \in \mathrm{L}^2(\Omega) \right\}$ , que será denotado por A, onde  $L^2$  é o espaço das funções de quadrado integrável, no sentido de Lebesgue.

Em A, o produto interno é definido da seguinte forma:

$$(f|g)_{\Omega} := \int_{\Omega} f g d\mu \tag{4}$$

$$\left(\overrightarrow{f} \middle\| \overrightarrow{g}\right)_{\Omega} := \int_{\Omega} \overrightarrow{f} \cdot \overrightarrow{g} d\mu \tag{5}$$

As soluções C(x,t), serão procuradas em V dado por:

$$\mathbf{V} \ = \ \left\{ \ v \ \in \ \mathbf{L}^2 \ \left[ (0,T] \ \times \mathbf{A} \right] \ : \ \frac{\partial v}{\partial t} \ \in \ \mathbf{L}^2 \ \left[ (0,T] \ \times \mathbf{A} \right] \right\}$$

Na equação (1) considera-se  $f = f_p$ , já que as fontes poluidoras serão consideradas através das descargas em alguns dos pontos do domínio.

Multiplicando os termos de (1) por uma função teste não-nula e integrando no sentido de Lebesgue, obtemos a formulação variacional de (1), dada por:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \nu d\mu = \int_{\Omega} -div(-\alpha \nabla C) \nu d\mu - \int_{\Omega} div \ (\overrightarrow{V}C) \nu d\mu 
- \int_{\Omega} \sigma C \nu d\mu + \int_{\Omega} f_p \nu d\mu$$
(6)

No meio aquático o coeficiente de difusão tem sido considerado como constante Carreras e Menéndez (1990). Assim, a equação (6) torna-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \nu d\mu = \alpha \int_{\Omega} \Delta C \nu d\mu - \int_{\Omega} div(\overrightarrow{V}C) \nu d\mu$$

$$- \int_{\Omega} \sigma C \nu d\mu + \int_{\Omega} f_p \nu d\mu \tag{7}$$

Considerando que o campo vetorial que descreve a velocidade de transporte no meio aquático, o campo  $\overrightarrow{V}$  é dado por  $\overrightarrow{V}=V_x$  (constante), onde  $V_x$  é a velocidade da correnteza do rio na direção longitudinal. Daí, a equação (7) resulta em:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \nu d\mu - \alpha \int_{\Omega} \Delta C \nu d\mu + V_x \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \nu d\mu + \sigma \int_{\Omega} C \nu d\mu = \int_{\Omega} f_p \nu d\mu \tag{8}$$

Agora, usando a primeira identidade de Green Iório Jr. e Iório (1988), no segundo termo do lado esquerdo de (8), vem:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \nu d\mu + \alpha \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla \nu d\mu - \alpha \int_{\partial \Omega} \frac{\partial C}{\partial \eta} \nu d\mu + V_x \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \nu d\mu + \sigma \int_{\Omega} C \nu d\mu = \int_{\Omega} f_p \nu d\mu$$
(9)

Lembrando que as condições de contorno são dadas por (2) e (3), que levadas em (9), resulta em:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \nu d\mu + \alpha \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla \nu d\mu + \beta \int_{\partial \Omega} C_f \nu d\mu + V_x \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \nu d\mu + \sigma \int_{\Omega} C \nu d\mu = \int_{\Omega} f_p \nu d\mu$$
(10)

Por fim, usando as notações de produto interno dadas por (4) e (5), a equação (10) pode ser escrita na forma:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\middle|v\right)_{0;\Omega} + \alpha \left(\nabla C \|\nabla v\right)_{0;\Omega} + V_x \left(\frac{\partial C}{\partial x}\middle|v\right)_{0;\Omega} + \sigma \left(C|v\right)_{0;\Omega} 
= -\beta \left\langle C|v\right\rangle_{0,\Gamma_i} + (f_p|v)_{0;\Omega}$$
(11)

Na equação (1) aparecem derivadas de segunda ordem no sentido clássico, enquanto na equação (10) tem apenas derivadas de primeira ordem, no sentido de distribuições, da solução deC(x,t).

Desta forma, passando da formulação clássica (1–3) para a formulação variacional (11), tornam-se fracas as hipóteses de regularidade da solução, o que proporciona um aumento da classe de funções possíveis para a solução do problema.

Foi verificada a condição de existência e unicidade de solução para a formulação variacional de acordo com o Teorema de Lions Lions (1961).

#### 2.3 Discretização do modelo

Garantida a existência e unicidade da solução do problema variacional (11), foi feita a discretização espacial, via método de Galerkin, que é uma técnica geral para construção de aproximações da solução de um problema de valor de contorno, que envolve a divisão do domínio da solução num número finito de subdomínios simples (os Elementos Finitos) e usando conceitos variacionais, se constrói uma aproximação da solução sobre a coleção de Elementos Finitos Becker et al. (1981).

Para a discretização da variável temporal, optou-se por um método implícito com diferenças centradas (no caso, Crank-Nicolson), de modo a transformar a equação diferencial que modela o fenômeno em estudo, num sistema de equações algébricas, implicitamente definido, como em Ervin e Heuer (2003).

Denotando por  $V_h$ o subespaço de V<br/>gerado pelas  $N_h$  funções de  $\varphi_i$  (chamadas de funções base), <br/>e  $\forall \ v_h \in V_h$  temos:

$$v_h = \sum_{i=1}^{N_h} v_i(t) \, \varphi_i(x)$$

Deste modo, considerando o subespaço V  $_h$  de V e a notação usada em Lions (1961), a equação diferencial parcial (11) pode ser reescrita na forma da seguinte EDO:

$$\left(\hat{A}\left(t;C_{h}\right)\left|v_{h}\right\rangle\right)_{0;\Omega} + \left(\left|\frac{\partial C_{h}}{\partial t}\right|v_{h}\right)_{0;\Omega} = -\beta \left\langle C_{f}\left|v_{h}\right\rangle_{0;\Gamma_{0}} + \left(f\left|v_{h}\right\rangle\right)_{0;\Omega}$$
(12)

$$\forall v_h \in V_h, \forall t \in (0,T]$$

o que, mediante as escolhas de  $A_{ij}$ ,  $A_i$  e  $A_0$ , dadas por:

$$A_{ij} = \begin{cases} \alpha, \ se \ i = j; \\ 0, \ se \ i \neq j; \end{cases}$$
  $A_i = \{V_x, \ se \ i = 1; \ A_0 = \sigma. \}$ 

nos fornece a seguinte equação:

$$\left(\frac{dC}{dt} \varphi_{j} | \varphi_{i}\right)_{0;\Omega} + \alpha \sum_{j=1}^{N_{h}} C_{j} \left(\nabla \varphi_{j} | \nabla \varphi_{i}\right)_{0;\Omega} + V_{x} \sum_{j=1}^{N_{h}} C_{j} \left(\frac{\partial \varphi_{j}}{\partial x} | \varphi_{i}\right)_{0;\Omega} + \sigma \sum_{j=1}^{N_{h}} C_{j} \left(\varphi_{j} | \varphi_{i}\right)_{0;\Omega} = (f | \nu)_{0;\Omega} - \beta \left(C_{N_{h}} | \varphi_{i}\right)_{\Gamma_{1}} \tag{13}$$

O passo seguinte é o da discretização da variável temporal, pelo método de Crank-Nicolson, com diferenças centradas em  $t_n + \frac{\Delta t}{2}$ , fazendo as seguintes aproximações:

$$\frac{dC_j}{dt}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) \cong \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t}, \text{ onde } C_j^{n+1} = C_j\left(t_{n+1}\right)$$
(14)

e

$$C_j\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) \cong \frac{C_j^{n+1} + C_j^n}{2} \tag{15}$$

Daí, levando (14) e (15) em (13), obtemos um sistema de equações lineares algébricas, que multiplicando por  $\Delta t$  e separando em relação aos coeficientes  $C_j^{n+1}$  e  $C_j^n$ , resulta em:

$$AC^{(n+1)} = BC^{(n)} + d^{n+\frac{1}{2}}$$
 (16)

dado  $C^0$ , onde

$$a_{ij} = \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega} + \frac{\alpha \Delta t}{2} \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i\right)_{0;\Omega} + \frac{V_x \Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i\right)_{0;\Omega}$$

$$b_{ij} = \left(1 - \frac{\sigma \Delta t}{2}\right) \left(\varphi_j \middle| \varphi_i\right)_{0:\Omega} - \frac{\alpha \Delta t}{2} \left(\nabla \varphi_j \middle| \nabla \varphi_i\right)_{0:\Omega} - \frac{V_x \Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \middle| \varphi_i\right)_{0:\Omega}$$

e

$$d_i^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \ (f|\varphi_i)_{0:\Omega} - \beta \ \Delta t \ \langle C_N|\varphi_i\rangle_{0:\Gamma_1}$$

A ordem das aproximações temporais é, localmente,  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ .

A escolha das funções teste  $\varphi_i$  será a de elementos finitos, com funções base  $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x), ..., \varphi_{N_h}(x)\}$  definidas globalmente, lineares por partes, satisfazendo a seguinte condição:

$$\varphi_{i}(x_{j}) = \begin{cases} 1 \text{ se } i = j \\ 0 \text{ se } i \neq j \end{cases}$$

onde  $x_i$  são as coordenadas do j-ésimo nó na malha.

#### 3 Resultados e discussão

Para o coeficiente de difusão, em Carreras e Menéndez (1990) encontramos para esgoto o valor de 0,23 km²/h. Esse dado foi obtido através de um arremesso gerado por uma descarga de esgoto, na cidade de Buenos Aires, no rio da Prata, utilizando uma técnica executada no sistema computacional MANCHAS.

Além disso, na dissertação de mestrado Rocha (2003), foi possível encontrar a média das velocidades entre dois pontos intermediários do trecho considerado,  $P_1$  e  $P_2$ , onde  $P_1$  está localizado a aproximadamente 18 km do ponto inicial e  $P_2$  a aproximadamente 31 km do ponto inicial.

Nos dados apresentados para a velocidade em Rocha (2003), a média anual das velocidades para os pontos  $P_1$  e  $P_2$ , durante o ano de 2001, no mês de julho, mês considerado de estação seca, foi obtida a menor média das velocidades entre os dois pontos 1,7 km/h e no mês de dezembro a maior média das velocidades entre os dois pontos, que foi de 3,0 km/h.

Os parâmetros de decaimento global  $(\sigma)$  e permeabilidade na fronteira  $(\beta)$ , foram estimados aleatoriamente, já que não foram encontrados na literatura.

Os pontos de descarga considerados para as simulações estavam entre os pontos  $P_1$  e  $P_2$ . Foram feitas simulações de cenários apresentadas nos gráficos adiante, para funções lineares, nesta primeira abordagem.

Nas simulações foi considerado o mesmo nível de descarga de esgoto para os córregos Tijuca (A) e Castelhano (B). Para o córrego do Moinho (C) foi considerado um nível maior de descarga, pois seu curso atravessa uma concentração urbana mais densa e drena um número significativo de bairros.

Os valores atribuídos aos parâmetros para as simulações estão na Tabela 1, a seguir. onde  $\alpha$  é o coeficiente de difusão,  $\sigma$  é o coeficiente de decaimento global, V

Tabela 1: Parâmetros utilizados na simulação dos cenários.

Parâmetro	Estação seca	Estação chuvosa	Unidades	
	Valores	Valores	Official	
$\alpha$	0,23	$0,\!23$	${ m Km^2/h}$	
$\sigma$	0,15	0,15	$h^{-1}$	
V	1,7	3,0	Km/h	
eta	0,1	0,1	Km/h	

é a velocidade do rio e  $\beta$  é a permeabilide na foz do rio.

Para a discretização, os valores dos parâmetros utilizados foram  $\Delta x=0.0219$  Km e  $\Delta t=0.005$  horas, tanto para a estação seca quanto chuvosa.

Nas simulações dos cenários 1 e 2 (estação seca e estação chuvosa, respectivamente), para a distribuição de concentração de esgoto ao longo do rio, em quatro instantes de tempo (Figuras 3 e 4), na estação chuvosa observa-se uma dispersão mais rápida e um menor nível de concentração de esgoto, durante os tempos considerados. Este resultado é compatível com o esperado, tendo em vista que a velocidade da correnteza é maior nesse período, levando a um processo de autodepuração pelo rio.

Considerando o tempo t=1 hora, tanto para estação seca como para a estação chuvosa, a concentração maior ainda está localizada nas proximidades dos pontos de descarga. A partir do tempo t=2 horas há uma dispersão mais significativa, com um nível de concentração de esgoto crescente no decorrer do tempo.

Para as estações seca e chuvosa, os cenários nas simulações que descrevem o processo evolutivo da concentração de esgoto, em quatro nós distintos ao longo do

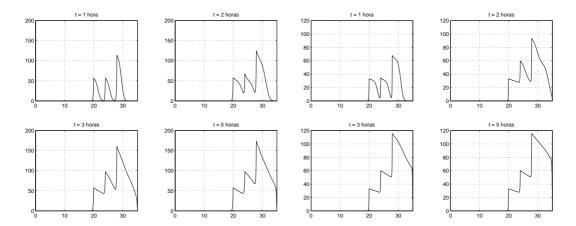


Figura 3: Simulação do cenário 1 – distribuição da concentração de esgoto ao longo do rio, para quatro instantes de tempo (estação seca).

Figura 4: Simulação do cenário 2 – distribuição da concentração de esgoto ao longo do rio, para quatro instantes de tempo (estação chuvosa).

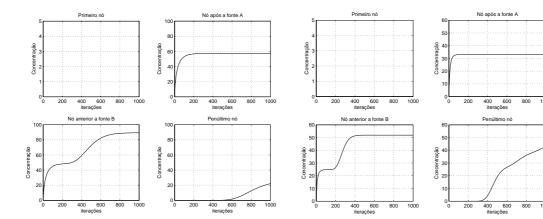


Figura 5: Simulação do cenário 1 – processo evolutivo da concentração de esgoto, ao longo do tempo, para quatro nós distintos (estação seca).

Figura 6: Simulação do cenário 2 – processo evolutivo da concentração de esgoto, ao longo do tempo, para quatro nós distintos (estação chuvosa).

tempo, observa-se que no primeiro ponto o nível de concentração é praticamente nulo. Nos pontos antes da fonte B, tanto para estação seca (Figura 5) como para

estação chuvosa (6), nas primeiras iterações o nível de concentração é crescente, estabilizando em seguida. Nos pontos posteriores à fonte B o nível de concentração de esgoto é crescente no decorrer das iterações. No último nó, o nível de concentração foi nulo para as primeiras iterações, tornando-se crescente em seguida (ver Figuras 5 e 6). Porém, o nível de concentração para as iterações consideradas, para todos os nós, foi menor na estação chuvosa.

### 4 Conclusões

Nas simulações dos cenários descritos a velocidade da correnteza do rio influenciou no processo de dispersão de esgoto para o trecho em estudo. No estudo apresentado em Becker et al. (1981) sobre o rio Coxipó, foram analisadas algumas variáveis que influenciam na qualidade da água, onde o autor concluiu que na estação chuvosa, em que a velocidade da correnteza do rio é maior, predominou uma tendência decrescente das variáveis analisadas, destacando decréscimos de 12,91% na variável cor aparente, 23% na turbidez e de 65,58% para os coliformes totais, o mostra uma boa aproximação com os resultados obtidos nas simulações, para os coliformes totais.

Com base nos resultados obtidos nas simulações dos diferentes cenários, podese concluir que o código elaborado se mostrou eficaz para os parâmetros de velocidade encontrados na literatura e o coeficiente de difusão considerado, de modo a simular o transporte de poluentes no trecho do rio.

Desta forma, acreditamos que o modelo e o código numérico sejam ferramentas úteis, no sentido de permitir um diagnóstico do processo de dispersão de esgoto, auxiliando os órgãos de gestão ambiental na tomada de decisão para a adoção de políticas preventivas ou saneadoras, que minimizem o processo de contaminação das águas do rio através de esgoto.

## 5 Agradecimentos

Ao Ms. José Pedro Garcia Rocha, Departamento de Engenharia Sanitária da Universidade Federal de Mato Grosso, pela contribuição dos dados utilizados para a realização do presente estudo. Aos professores Dra. Rosane <sup>o</sup> Ferreira e Dr. Sérgio

R. Paulo, pelas valiosas sugestões na finalização deste estudo.

## Referências

- Almeida Filho, J. M. (2002). A relação do uso da ocupação do solo na qualidade superficial na bacia do rio coxipó. Dissertação de Mestrado, Mestrado em Planejamento Ambiental, COPPE-UFRJ, R. Janeiro.
- Bassanezi, R. C. e Jr., W. C. F. (1988). Equações diferenciais com aplicações. Ed. Harbra, São Paulo.
- Becker, E. B., Carey, G. F., e Oden, J. T. (1981). Finite elements: an introduction, volume 1. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- Carreras, P. E. e Menéndez, A. N. (1990). Mathematical simulation of pollutant dispersion. *Ecological Modelling*, 52:29–40.
- Cunha, C. L. N. e Ferreira, A. P. (2006). Modelagem matemática para avaliação dos efeitos dos despejos orgânicos nas condições sanitárias de águas ambientais. Cadernos de Saúde Pública, 22(8):1715–1725.
- Edelstein-Keshet, L. (2005). Mathematical models in biology. SIAM, Philadelphia.
- EMBRAPA (2007). O Brasil visto do espaço, Carta sd-21-z-c-v, Mapas mt27-27, mt\_37-28, mt38-27 e mt38-28. Disponível em: http://www.cdbrasil.cnpm.embrapa.br/mt/htm1/mt19\_13.htm, Acesso em: 10/05/2007.
- Ervin, V. J. e Heuer, N. (2003). Approximation of time-dependent, viscoelastic fluid flow: Crank-nicolson, finite element approximation. *Numer. Methods for Partial Differential Equations*, 20:248–283.
- Iório Jr., R. J. e Iório, V. (1988). Equações diferenciais parciais: Uma introdução. IMPA, CNPq, Rio de Janeiro.
- Lions, J. L. (1961). Equations differentelles operationnelles. Springer, N. York.

Melo, D. C. R. e Cunha, M. A. C. (2006). Estudos hidrológicos informação do meio físico região de cuiabá, várzea para na grande е entorno. Disponível www.cprm.gov.br/rehi/simem: posio/go/ESTUDOS%20HIDROLOGICOS%20PARA%20INFORMACAO%20-DO%20MEIO%20FISICO%20NA%20R, Acesso em: 15/11/2006.

- Nascimento, N. O. e Heller, L. (2005). Ciência, tecnologia e inovação na interface entre áreas de recursos hídricos e saneamento. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, 10(1):36–48.
- Okubo, A. (1980). Diffusion and ecological problems: Mathematical models. Springer, Berlin.
- Rocha, J. P. (2003). Avaliação das ações antró-picas no meio físico a partir dos impactos sedimentológicos na bacia do rio coxipó. Dissertação de Mestrado, Mestrado em Engenharia Ambiental, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro.

## Aplicação de Redes MLP na Predição de Estrutura Secundária de Proteínas - PREDCASA

Luis Paulo B. Scott;

CMCC – UFABC, 09.090-400 – Santo André/SP.

Jorge Chahine², José R. Ruggiero³,

Depto. de Física, IBILCE, UNESP, 15.054-000 – S. J. do Rio Preto/SP.

Abstract. The prediction of secondary structure of proteins can contribute to elucidate the protein folding problem. In order to predict these structures we used methods of Artificial Neural Networks (ANN) starting form the primary sequences of amino acids. In this present work we use ANNs in the prediction of the secondary structures of proteins, taking as patterns the structures in helix form (H), beta sheet (E) and coil (C). The ANNs were trained with the Simulator of MATLAB. The obtained data are compared with predictors described: PSA, PSIPRED and PHD in order to have an idea of the quality of the prediction. The present work is composed of 3 networks level. The output form all levels 1 ANNs are then fed a single second level ANNs. The third level is composed of jury decision.

Palavras-chave: Predição; Proteinas; Redes MLP.

## 1 Introdução

Entre as várias classes de moléculas biológicas de grande importância para os seres vivos, encontram-se as proteínas. O termo proteína provém do grego (proteios) que significa "de primeira magnitude". As proteínas são moléculas complexas que possuem uma estrutura terciária (tridimensional) específica. Estas macromoléculas realizam tarefas de extrema importância para o organismo, como a catálise de reações químicas, transporte, reconhecimento e transmissão de sinal. A função das proteínas conhecidas está determinada pela sua estrutura espacial. Portanto é importante conhecermos a estrutura 3D dessas moléculas. O número de seqüências de proteínas

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Luis.scott@ufabc.edu.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>chahine@ibilce.unesp.br

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>zerug@ibilce.unesp.br

(estruturas primárias) conhecidas e depositadas em bancos de dados (swissprot) está crescendo muito mais rápido do que a nossa habilidade de resolver as estruturas terciárias experimentalmente Rost (1998); Rost et al. (1993). Portanto, técnicas eficazes para predição de estruturas são importantes para diminuir a diferença entre o número de seqüências depositadas e de estruturas 3D determinadas (Protein Data Bank – PDB).

Um método tradicionalmente, utilizado na predição de estruturas, é a modelagem por homologia. Porém, pode-se predizer a estrutura 3D de, aproximadamente, apenas 25% a 30% das seqüências de proteínas depositadas nos bancos de dados primários através desta técnica. A investigação e o desenvolvimento de softwares de predição de estruturas protéicas é importante: **para os estudos conformacionais**; **para auxiliar no estudo do enovelamento protéico e para experimentos tanto in silico como in vitro.** Esse artigo descreve os resultados da utilização de redes neurais do tipo Multi Layer Perceptron como processos de otimização na predição de estruturas secundárias de peptídeos e proteínas. O trabalho possui como objetivo principal desenvolver um software para **predição 1D Web.** 

O trabalho, descrito nesse artigo, consiste na investigação de diferentes arquiteturas de redes neurais do tipo Multi Layer Perceptron para realizar a predição 1D fazendo uso de diversas informações físico-químicas da proteína. Já foram testadas diferentes arquiteturas de redes neurais, inclusive a combinação de duas redes neurais e de diferentes propriedades físico-químicas. As redes foram criadas, treinadas e testadas utilizando o MATLAB. O preditor de estrutura secundária desenvolvido atinge uma média de 70 a 78% de acerto e para algumas proteínas, em particulares, a taxa de acerto chega a 98% dos aminoácidos (posições da estrutura primária).

Nesse momento, pretende-se migrar o preditor da plataforma Windows para plataforma Linux. Além disso, pretende-se mudar de simulador de redes neurais e permitir que a comunidade acesse o preditor através de uma interface para Web. Dessa forma, pretende-se fornecer um serviço de predição de estrutura secundária para a comunidade científica. Foram implementadas e testadas 18 arquiteturas de redes neurais MLP distintas, cada uma contendo uma codificação de entrada (camada de entrada). Os resultados obtidos forma comparados com três preditores descritos na literatura: PHD, PSA e PSIPRED.

## 2 Contextualização

As proteínas são moléculas complexas que possuem uma estrutura terciária (tridimensional) específica e que realizam tarefas de extrema importância para o organismo, como a catálise de reações químicas, transporte, reconhecimento e transmissão de sinal. A função das proteínas conhecidas está determinada pela sua estrutura espacial. Dessa forma, obter a estrutura tridimensional da proteína no seu estado nativo, e compreender as forças que a estabilizam são um dos problemas fundamentais da Biofísica de proteínas. Numerosos trabalhos utilizando redes neurais artificiais para estudar estruturas protéicas (primária, secundária e terciária) têm sido realizados e descritos na literatura. A predição de estruturas secundárias é um passo útil e importante para compreender como a seqüência de aminoácidos de umas proteínas determina o seu estado nativo.

Os algoritmos de predição de estruturas secundárias com melhores resultados, no momento, são baseados em redes neurais. A maioria dos métodos, aplicando RNAs, correntemente disponíveis possuem três estados de predição e alcançam uma performance de 72% a 78% de forma geral, podendo ser melhor dependendo da base de dados e das informações de entrada da rede neural. Entre as possíveis aplicações de RNAs no estudo de estruturas de moléculas como proteínas estão:

- predição de estruturas secundárias através classificação/reconhecimento de padrões;
- predição de estruturas terciárias de proteínas através de otimização de uma função potencial de energia;
- predição de possíveis sequências de aminoácidos para uma dada proteína de forma a obter as conformações de mais baixa energia.

Outros aspectos de estruturas de proteínas, tal como a classe estrutural, também pode ser predita utilizando redes neurais. Podem-se utilizar redes neurais para associar as proteínas a uma das grande quatro classes (toda  $\alpha$ , toda  $\beta$ ,  $\alpha/\beta$  e outras) com uma precisão que pode chegar a 78% em alguns trabalhos.

Um dos trabalhos pioneiros de aplicação de RNA na predição de estrutura é devido a Holley and Karplus Holley e Karplus (1991). Eles usaram uma rede

MLP, não recorrente para predizer elementos de estrutura secundária de proteínas a partir da seqüência de resíduo. Eles codificam os dados de entrada em janelas de resíduos adjacentes e para cada resíduo, usaram 21 entradas binárias (ou seja, assumiram apenas zero e um), sendo que apenas uma das 20 entradas estava ativada (cada entrada representa um tipo de aminoácido) e uma codificada quando a janela sobrepunha o fim da cadeia.

A rede utilizada possuía uma camada intermediária com duas unidades e uma camada de saída também com duas unidades, que representava/codificava uma estrutura secundária associada ao resíduo central na janela. Para facilitar a comparação com outros métodos de predição, Holley & Karplus adotaram três tipos de estrutura secundária: hélice, folha e coil Holley e Karplus (1991). O conjunto de dados utilizados para treinar e testar a rede era composto de 62 proteínas, sendo que o conjunto de treinamento formado por 48 proteínas e o conjunto de teste (para predição) por 14 proteínas. Holley & Karplus testaram vários tamanhos de janela e, nesse caso, a janela de tamanho 17 mostrou os melhores resultados. Também foram testadas redes neurais com diferentes tamanhos de cadeia intermediária (variando de 2 a 20). Apesar da rede com 20 unidades (neurônios) na camada intermediária ter apresentado o melhor resultado para o conjunto de treinamento; a rede com duas unidades na camada intermediária mostrou o melhor resultado para o conjunto de teste. A precisão obtida para janelas de tamanho 17 e redes com dois neurônios em sua camada escondida foi de 63.2% para o conjunto de teste e 68.5% para o conjunto de treinamento.

Qian and Sejnowski também utilizaram redes neurais não lineares para predizer estrutura secundária de proteína globulares e avaliaram o efeito de ruído nos dados de treinamento em relação à curva de aprendizado da rede e sua performance nos teste Qian e Sejnowski (1996).

Chandonia and Karplus aplicaram duas redes neurais denominadas primária e secundária para predizer estruturas secundárias e classes estruturais ou classes de estrutura Chandonia e Karplus (1996). Nesse estudo foi utilizado um conjunto de 681 proteínas com estruturas disponíveis no *Protein Data Bank(PDB)*. A rede neural primária utilizada para predizer a estrutura secundária era similar a várias descritas por Karplus em trabalhos anteriores Chandonia e Karplus (1999).

Kono et. al Kono e Doi (1993) descreveram o uso de uma rede de autômatos

para a predição de seqüência e a conformação de cadeias laterais a partir da geometria da cadeia principal. A Biblioteca de rotâmeros utilizada por Kono et al. foi definida por Ponder e Richards para reduzir o grau de liberdade dos rotâmeros Ponder e Richards (1999). Nesse método, um autômato é associado para cada posição do rotâmero, semelhante a associar um rotâmero para cada neurônio em uma rede de Hopfield e minimizar a função de energia da rede neural. As cadeias laterais possuem um papel fundamental na estrutura da proteína, o que torna importante investigar o estudo de técnicas como redes neurais utilizando bibliotecas de rotâmeros na predição de estruturas de proteínas.

Recentemente Cuff e Barton avaliaram de forma mais detalhada como o uso de tipos diferentes de perfis (profiles) de alinhamentos múltiplos, a partir das mesmas seqüências, pode melhorar a performance das redes neurais [9]. Nesse trabalho, Cuff e Barton exploraram e avaliaram como o uso, mais sofisticado, do alinhamento múltiplo e das informações podem ser importantes para melhorar o rendimento das redes neurais na predição de estrutura secundárias e propuseram um novo método baseado em redes neurais. Nesse novo método, as informações de alinhamento são mais exploradas do que na maioria dos métodos de 3a geração Cuff e Barton (1999, 2000).

Cuff and Barton projetaram uma base de dados de 369 proteínas para avaliar o rendimento dos algoritmos de predição propostos na literatura: DSC, PHD, NNSSP e PREDATOR, avaliando a taxa de acerto desses métodos Rabow e Scheraga (1993). Rabow and Scheraga descreveram uma aplicação de redes neurais para predição de estruturas dentro de uma rede cúbica. Define-se uma função potencial e a rede neural faz uma busca por conformações de mais baixa energia dentro da rede cúbica. Rabow e Scheraga compararam os resultados obtidos com os resultados obtidos pelo método de Monte Carlo Muskal e Kim (1992). Nesse trabalho, Scherega e Rabow obtiveram resultados melhores com as redes neurais comparado com o método de Monte Carlo. Muskal e Kim também investigaram o uso de redes neurais do tipo MLP na predição de estruturas secundárias Bohr e Bohr (1998). Bohr utilizou redes do tipo MLP para predizer o estado conformacional (predição3D) de pequenos peptídeos a partir de informações sobre a estrutura eletrônica da molécula Rost e Sander (1994).

As Redes Neurais Artificiais são ótimas ferramentas para classificação e reconhecimento de padrões Haykin (1994). Portanto são boas ferramentas para predição

1D. Nesse projeto de pesquisa, são explorados os efeitos do projeto da arquitetura e o uso de várias propriedades físico-químicas (isoladas e combinadas) no desempenho das redes neurais na predição 1D. Procurando aperfeiçoar o desempenho do preditor já existente. Também será desenvolvido um software para disponibilizar o preditor via Web.

## 3 Materiais e Métodos

#### 3.1 Base de Dados

O primeiro passo, no desenvolvimento do trabalho, foi a coleta e seleção de três conjuntos de dados (seqüências primárias de proteínas). O primeiro conjunto foi selecionado a partir do Protein Data Bank através de alinhamento múltiplo, obtendo 389 proteínas com baixa identidade na seqüência primária. Esse conjunto de treinamento foi dividido em 4 subconjuntos: **Todas** (389 proteínas), o qual possui todas as proteínas coletadas; **Hélice**, que contém proteínas cujo número de resíduos em estrutura hélice é maior que a soma de resíduos em estrutura folha e resíduos em estrutura folha é maior que a soma de resíduos em estrutura hélice e resíduos em estrutura coil (56 proteínas); **Folha**, que possui proteínas cujo número de resíduos em estrutura folha é maior que a soma de resíduos em estrutura hélice e resíduos em estrutura hélice e resíduos em estrutura folha é superior a 30% e inferior a 50% e a porcentagem de resíduos em estrutura folha é superior a 30% e inferior a 50% (115 proteínas).

As diferentes redes neurais projetadas foram treinadas com as quatro bases de dados diferentes e os testes mostraram que as RNA treinadas com a base hélicefolha, constituída de 115 proteínas não homólogas, obteve o melhor desempenho na predição de estruturas secundárias. Portanto, os resultados apresentados nesse artigo são das redes neurais treinadas com o subconjunto hélice-folha. Para validação foi utilizado um conjunto de 75 proteínas descritas em Holley e Karplus (1991).

O conjunto de dados (base de dados) utilizado para testar as redes foi extraído do CASP. Essas proteínas são usadas, como padrão, pelo *Critical Assessment of Structure Prediction* (CASP) na avalição dos métodos de predição de estrutura secundária decsritos na literatura mundial. Para verificar se as proteínas não possuíam um grau alto de identidade na seqüência foi realizado alinhamento múltiplo através do software Clustal-X.

## 3.2 Arquiteturas Projetadas

Até o momento, não possuímos habilidade suficiente para predizer a estrutura terciária de uma proteína, a partir de sua seqüência. Mas podemos predizer aspectos mais simplificados da estrutura Bohr e Bohr (1998); Rost e Sander (1994). Uma simplificação para o problema é a predição de estruturas de proteínas em uma dimensão (1D), ou seja, a estrutura secundária e/ou a área acessível ao solvente. O nome 1D vem do fato de associarmos a cada aminoácido uma estrutura secundária.

O objetivo usual dos métodos de predição 1D é associar a cada resíduo um padrão estrutural H ( $\alpha$ -hélice), E ( $\beta$ -folha) ou L (volta, isto é, uma estrutura não regular), dependente do conjunto de resíduos que lhe são adjacentes, ou seja, de uma janela da seqüência. A principal idéia por trás da maioria dos métodos de predição de estrutura secundária é o fato de que segmentos de resíduos consecutivos possuem uma preferência para certos estados de estrutura secundária. Dessa forma, o problema de predição de estrutura torna-se um problema clássico de classificações de padrões tratável por algoritmos de reconhecimento de padrões. Foram projetadas e implementadas duas arquiteturas diferentes : uma contendo apenas uma rede neural com uma camada intermediária e outra contendo duas redes neurais cada uma com uma camada intermediária. Sendo que, nesse caso, a saída da primeira rede alimenta a entrada da segunda rede neural (ver Figuras 1 e 2). Para o caso da arquitetura com duas redes neurais, a informação de saída da primeira rede neural é adicionada na janela de dados de entrada.

Para cada arquitetura foram implementadas 9 redes MLP com a camada de entrada variando. Todas as redes foram projetadas de maneira a predizer a estrutura secundária do aminoácido que se encontra no meio da janela de entrada. Foram testadas redes com os seguintes tamanhos de janela de entrada (7,9,11,13,15,17,19,21 e 23). Pelos resultados obtidos pode-se perceber que tamanhos diferenciados de janelas de entrada estão diretamente relacionados com a performance da rede na predição da estrutura . Dessa forma, para uma rede neural com uma janela de tamanho 7, temos 154 neurônios na camada de entrada (22 X 7). Foram desenvolvidos dois softwares em C++ para realizar o pré-processamento e o pós processamento da rede neural.

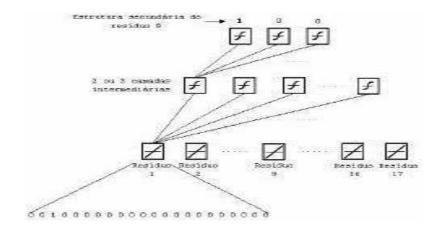


Figura 1: Arquitetura com uma rede neural artificial

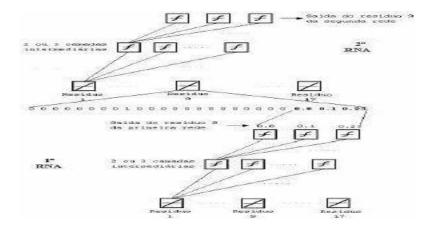


Figura 2: Arquitetura com duas redes neurais artificiais em cascata.

#### 3.3 Coeficientes

Existem alguns coeficientes para verificar o desempenho de uma RNA na predição de estruturas secundárias. Dentre estes, o mais utilizado pelos pesquisadores é conhecido como Q3, que fornece a porcentagem dos resíduos preditos corretamente considerando os três tipos de estruturas secundárias: hélice, folha e coil [5]. O Coeficiente Q3 é dado por :

Onde i = {hélice, folha, coil}, TOTi é o número de "i" existentes nas proteínas de teste, PREDi é número total de "i" que a RNA predisse e CORRi = número de "i" que a RNA predito corretamente. Outros coeficientes importantes e também utilizados no projeto para ajudar na avaliação dos testes são o Q[obs] e Q[pred]. O primeiro dá a porcentagem do número de resíduos preditos corretamente em relação ao número real observado, em um estado particular. Já o Q[prd] dá a porcentagem do número de resíduos preditos corretamente em relação ao número que a RNA predisse em um estado particular. Onde

Para a implementação destes coeficientes que avaliam o desempenho da rede, foi desenvolvido um software, em C<sup>++</sup> Builder 5, chamado de Comparar.

#### 3.4 Implementação do júri

A inclusão do júri de decisão destina-se a fazer uma leitura da predição final. Na literatura, encontra-se o trabalho de Rost et al. (1993) que utilizam o júri como um 8 filtro, ou seja, que executa uma média aritmética sobre resultados gerados por 12 redes neurais distintas. A partir dessa motivação, desenvolveu-se um *software* chamado 'júri', com a função de realizar a média aritmética sobre os resultados da predição das 18 redes.

#### 4 Resultados

Para efeito de avaliar a qualidade do preditor desenvolvido, batizado com o nome de PREDCASA Foram selecionadas 15 proteínas do CASP para testar o preditor desenvolvido e comparar seu desempenho com 3 preditores disponíveis na literatura e bastante utilizados por pesquisadores da área. Na Tabela 1 é apresentada a comparação do preditor PREDCASA com o PSIPRED, o PHD e o PSA. Percebe-se

uma certa regularidade de percentual de acerto de 47% até 84% para o PREDCASA em relação aos outros. Os resultados apresentados são apenas da arquitetura com duas redes neurais em cascata e utilizando-se o coeficiente Q3.

Tabela 1: Análise das médias de acerto						
Proteína	PREDCASA	PHD (% de	PSA (% de	PSIPRED (%		
	(% de acerto)	acerto)	acerto)	de acerto)		
1QLQ	84	91	51	87		
1EIG	73	86	75	91		
1C56	47	67	37	50		
1DAQ	85	70	66	78		
1EHD	52	55	58	59		
1E5B	60	65	63	72		
1EJG	80	50	58	67		
1ES1	70	74	56	78		
1DT4	64	71	63	78		
1EDS	61	29	41	38		
1G6X	84	91	53	91		
1DO1	61	60	54	66		
1FD8	79	79	27	84		
1FE5	63	66	67	86		
MÉDIA	69.13	67,13	55,66	73,4		

## 5 Conclusões

Os resultados comprovam a eficiência do preditor com janelas distintas. A média do acerto do PREDCASA é de 69,13%, esse valor é superior ao do PHD que obteve uma média de acerto de 67,13%, perdendo apenas para o PSIPRED com 73,4%. A regularidade de acerto do PREDCASA é de 50 a 85% enquanto o PSIPRED obteve uma regularidade de 38 a 91%. Portanto a média atingida pelo preditor PREDCASA comprova a importância de redes treinadas com janelas diferentes e a implementação de um júri é extremamente importante para a performance das redes neurais.

Pode-se notar portanto que o projeto bem elaborado de uma base de dados para treinamento das redes e das arquiteturas das redes neurais é de extrema importância para o problema de predição de estrutura secundária de proteínas. É importante ressaltar que se deve estudar, de maneira mais profunda, a influência dos diferentes tamanhos de janela de entrada para esse tipo de problema. Devese enfatizar que o PREDCASA é o primeiro preditor de estrutura secundária de proteínas desenvolvido no Brasil.

## 6 Contribuições e Trabalhos Futuros

Esse trabalho teve como objetivo utilizar redes neurais como processos de otimização na predição de estruturas secundárias de peptídeos e proteínas. Como contribuições desse trabalho pode-se mencionar:

- estudo de como diferentes bases de dados ( toda- $\alpha$ , toda - $\beta$ ,  $\alpha/\beta \mathfrak{g}$  mistas) podem auxiliar e melhorar a performance de redes neurais artificiais.
- observação que a arquitetura da rede e principalmente a codificação problema são fatores limitantes na performance da predição 1D através de redes neurais do tipo MLP. E a observação que o fato de incluir mais informações para a rede MLP não implica em um acréscimo na performance da mesma.
- confirmação de que a performance das redes neurais, nesse tipo de problema, depende do tamanho da janela de entrada.

Como futuros trabalhos podemos citar: O aperfeiçoamento do sistema de júri, informações evolutivas, projeto e teste de novas bases de dados, testes de novas arquiteturas de redes neurais e o uso de algoritmos genéticos em conjunto com as redes neurais, investigar a influência do tamanho da janela de entrada e o tipo de proteína.

## Agradecimentos

A Fapesp pelo apoio financeiro.

#### Referências

- Bohr, H. e Bohr, J. (1998). Protein secondary structure and hology by neural networks. *FEBS Letters*, 241:223–228.
- Chandonia, J. M. e Karplus, M. (1996). The importance of larger data sets for protein secondary structure prediction with neural networks. *Protein Science*, 5:768–774.
- Chandonia, J. M. e Karplus, M. (1999). New methods for accurate prediction of protein secondary structure. *PROTEINS:Structure, Function and Genetics*, 35:293–306.
- Cuff, J. A. e Barton, J. G. (1999). Evaluation and improvement of multiple sequence methods for protein secondary structure prediction. *PROTEINS: Structure, Function and Genetics*, 34:508–519.
- Cuff, J. A. e Barton, J. G. (2000). Application of multiple sequence alignment profiles to improve protein secondary structure preditor. *PROTEINS: Structure, Function and Genetics*, 40:502–511.
- Haykin, S. (1994). Neural Networks: a comprehensive foundation. IEEE Press, New York.
- Holley, L. H. e Karplus, M. (1991). Neural networks for protein structure prediction. *Methods in Enzymology*, 202:204–224.
- Kono, H. e Doi, J. (1993). Energy minimization method using automata network for sequence and side-chain conformation prediction from given backbone geometry. *Protein Science*, 19:244–255.
- Muskal, M. S. e Kim, H. S. (1992). Predicting protein secondary structure content a tandem neural network approach. *Journal of Molecular Biology*, 225:713–727.
- Ponder, J. W. e Richards, F. M. (1999). Tertiary templates for protein use packing criteria in the enumeration of allowed sequences for different structural classes. *Journal of Molecular Biology*, 193:775–791.

- Qian, H. e Sejnowski, M. (1996). Prediction of helix in proteins based on thermodynamic parameters from solution chemistr. *Journal of Molecular Biology*, 256:663–666.
- Rabow, A. A. e Scheraga, A. H. (1993). Lattice neural network minimization:application of neural network optimization for locating the global-minimum conformations of proteins. *Journal of Molecular Biology*, 232:1157–1168.
- Rost, B. (1998). Protein structure prediction in 1d, 2d and 3d. *The Encyclopedia of Computational Chemistry*, 3:2242–2255.
- Rost, B. e Sander, C. (1994). Combining evolutionary information and neural networks to predict protein secondary structure. *PROTEINS: Structure, Functions and Genetics*, 19:55–72.
- Rost, B., Schneider, R., e Sander, C. (1993). Progress in protein structure prediction? *TIBS*, 18:120–123.

# Modelo de von Bertalanffy generalizado aplicado ao crescimento de suínos de corte

Lucas de Oliveira<sup>1</sup>
Centro Federal de Educação Tecnológica - CEFET-MG
Belo Horizonte-MG, Brasil
Adilson J. V. Brandão<sup>2</sup> e Rodney C. Bassanezi<sup>3</sup>
Universidade Federal do ABC - UFABC
Centro de Matemática, Computação e Cognição - CMCC
Santo André-SP, Brasil

Resumo. Neste trabalho estudamos a evolução do peso de suínos de corte utilizando o modelo de von Bertalanffy generalizado onde a taxa de catabolismo é dependente do tempo. Este modelo matemático, utilizado para o estudo do crescimento em peso de aves apresenta uma taxa de catabolismo variável, na forma de uma função exponencial assintótica. No caso de suínos obtivemos como taxa de catabolismo uma função logística, tanto para machos quanto para fêmeas. Este resultado nos levou a conjecturar que a taxa de catabolismo é característica da classe dos animais. Para a obtenção dos parâmetros utilizamos dados experimentais do AGROCERES PIC de Ponte Nova (MG), referentes ao desempenho previsto da progênie Camborough 22 e AGPIC 412 TG, em boas condições de manejo e nutrição, separada por sexo e destinada à produção de cevados com peso elevado.

Palavras-chave: Modelagem matemática; Modelo de von Bertallanfy generalizado; Modelo logístico.

## 1. Introdução

No início dos anos setenta von Bertalanffy propôs o seguinte modelo para o estudo de crescimento em peso de peixes (veja [rodney1]):

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>lucasdeoliveira1@gmail.com

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>adilson.brandao@ufabc.edu.br

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>rodney.bassanezi@ufabc.edu.br

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \alpha P^{2/3} - \beta P, \\ P(0) = P_0, \end{cases}$$

onde P=P(t) é a massa do peixe em função do tempo t,  $P_0$  é a massa inicial,  $\alpha$  é a constante de anabolismo (representando a taxa de síntese de massa por unidade de superfície do animal) e  $\beta$  é a constante de catabolismo (que representa a taxa de diminuição da massa por unidade de massa). Notemos que, o termo 2/3 é proveniente de uma relação alométrica do peso com a área corporal do peixe.

Em Bassanezi (2002) é apresentada a seguinte generalização para estudo do crescimento em peso de um animal qualquer:

$$\begin{cases}
\frac{dP}{dt} = \alpha P^{\gamma} - \beta P, \\
P(0) = P_0,
\end{cases}$$
(1.1)

onde agora P = P(t) é a massa do animal em função do tempo t,  $P_0$  é a massa inicial,  $\alpha$  e  $\beta$  são as constantes de anabolismo e catabolismo respectivamente e  $\gamma$  é um parâmetro alométrico a ser estimado.

Esta generalização do Modelo de Bertalanffy foi aplicada no estudo de crescimento em peso de perús (Bassanezi, 2002) e frangos (Leite, 2003).

Nosso objetivo neste trabalho é aplicar o modelo de von Bertalanffy generalizado ao estudo do crescimento em peso de suínos de corte e obter uma expressão para a taxa de catabolismo  $\beta = \beta(t)$  dependente do tempo, a partir de dados experimentais. Além disso fazemos uma comparação entre este modelo e alguns modelos clássicos (Logístico e Gompertz), que usam a taxa  $\beta$  constante.

## 2. Aplicação do Modelo

O parâmetro alométrico de  $\gamma=2/3$ , obtido por von Bertalanffy para peixes (Bassanezi e Ferreira Jr., 1988), foi estimado como sendo igual a 3/4 no caso de mamíferos (West et al., 2002). Consideramos então para o crescimento em peso de suínos  $\gamma=3/4$ .

A equação (1.1) é do tipo Bernoulli e pode ser facilmente resolvida:

$$P(t) = P_{\infty} \left\{ 1 + \left[ \left( \left( \frac{P_0}{P_{\infty}} \right)^{1/4} - 1 \right) e^{-\frac{\beta}{4}t} \right] \right\}^4, \tag{2.2}$$

onde  $P_{\infty}$  é o peso máximo do animal, satisfazendo a relação  $P_{\infty} = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^4$ .

Visando obter um modelo mais realista, consideramos a taxa de catabolismo  $\beta$  como sendo variável em relação ao tempo. Esta hipótese é razoável se considerarmos que, quando o animal envelhece, sua perda de energia tende a ser mais elevada.

Um forma mais simples de modelar tal situção é considerar diretamenta na equação (2.2) a taxa  $\beta$  variável, ou seja,

$$P(t) = P_{\infty} \left\{ 1 + \left[ \left( \left( \frac{P_0}{P_{\infty}} \right)^{1/4} - 1 \right) e^{-\frac{\beta(t)}{4}t} \right] \right\}^4, \tag{2.3}$$

Consideramos, para verificação do modelo, a tabela de dados da Agroceres PIC de Ponte Nova-MG ?? dada pela tabela 1.

A partir destes dados vamos estimar o parâmetros  $P_{\infty}$  e a função  $\beta(t)$  no caso dos suínos machos.

**Peso Máximo:** Calcularemos  $P_{\infty}$  pelo método de Ford-Walford [rodney1] considerando os últimos nove dados da tabela, quando o peso do animal está se estabilizando.

Ajustando estes dados linearmente obtemos a seguinte reta:

$$P(t+1) = 17,9718 + 0,906458P(t)$$

Como P(t+1)=P(t) no equilíbrio, obtemos o peso limite para machos  $P_{\infty}=192,125~{\rm Kg}.$ 

Cálculo da função beta: A partir de (2.3) obtemos formalmente

$$\ln \left[ \frac{\left( \frac{P(t)}{P_{\infty}} \right)^{1/4} - 1}{\left( \frac{P_0}{P_{\infty}} \right)^{1/4} - 1} \right]$$

$$\beta[P(t), t] = -4 \frac{1}{t} \tag{2.4}$$

Através dos dados da tabela 1 e de (2.3) calculamos uma tabela para  $\beta(t)$  (veja tabela 2) e seu diagrama de dispersão (veja figura 1).

Tabela 1: Tabela de peso dos suínos. Fonte: Agroceres PIC de Ponte Nova/MG

Idade (em dias)	Peso do macho (em Kg)	Peso da fêmea (em Kg)		
0	1,50	1,50		
7	2,80	2,80		
14	4,23	4,23		
21	6,18	6,18		
28	8,37	8,37		
35	10,94	10,94		
42	13,92	13,89		
49	17,36	17,26		
56	21,28	21,07		
63	25,70	25,33		
70	30,42	29,83		
77	35,52	34,67		
84	41,05	39,89		
91	46,98	45,47		
98	53,29	51,40		
105	59,94	57,65		
112	66,87	64,16		
119	73,96	70,81		
126	81,18	77,59		
133	88,48	84,42		
140	95,81	91,29		
147	103,16	98,17		
154	110,47	105,00		
161	117,65	111,71		
168	124,59	118,18		
175	131,15	124,29		
182	137,22	129,92		
189	142,68	134,97		
196	147,48	139,38		
203	151,54	143,07		
210	154,83	146,02		

Tabela 2: Tabela para a função beta.

Tabela 2. Tabela para a função beta.						
Idade (em dias)	Peso do macho (em Kg)	beta (macho)				
1	1,50	0,0000				
7	2,80	0,03499				
14	4,23	0,03452				
21	6,18	0,03526				
28	8,37	0,03496				
35	10,94	0,03483				
42	13,92	0,03484				
49	17,36	0,03502				
56	21,28	0,03532				
63	25,70	0,03572				
70	30,42	0,03605				
77	35,52	0,03640				
84	41,05	0,03683				
91	46,98	0,03732				
98	53,29	0,03788				
105	59,94	0,03848				
112	66,87	0,03914				
119	73,96	0,03980				
126	81,18	0,04049				
133	88,48	0,04122				
140	95,81	0,04197				
147	103,16	0,04279				
154	110,47	0,04366				
161	117,65	0,04457				
168	124,59	0,04550				
175	131,15	0,04642				
182	137,22	0,04729				
189	142,68	0,04804				
196	147,48	0,04865				
203	151,54	0,04904				
210	154,83	0,04916				
-						

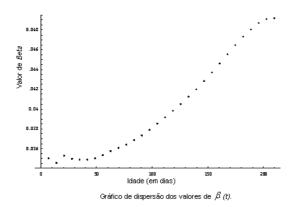


Figura 1: Diagrama de dispersão de  $\beta$  para o crescimento em peso de suínos

Observando a figura 1 notamos que a curva  $\beta(t)$  tem as mesmas características de uma curva Logística. Fazendo o ajuste dos dados de  $\beta$  para a curva Logística obtemos:

$$\beta(t) = \frac{0.014343}{338.289e^{-0.0440671t} + 1} + 0.03484. \tag{2.5}$$

Substituindo  $P_{\infty}$  e  $\beta(t)$  na equação (2.3) obtemos:

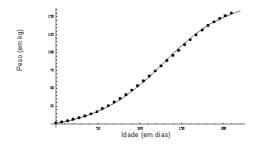
$$P(t) = 192.125 \left\{ 1 - 0,69375 \exp\left[ -\frac{1}{4} \left( \frac{0,014343}{338,289e^{-0.0440671t} + 1} + 0,03484 \right) t \right] \right\}^{4}.$$
(2.6)

O gráfico da função P(t), dada pelo modelo (2.6) para os suínos machos comparada com os dados da tabela 1 pode ser visto na figura 2.

De modo análogo ao caso dos suínos machos, calculamos P(t) para os suínos fêmeas:

$$P(t) = 165.698 \left\{ 1 - 0.682208 \exp\left[ -\frac{1}{4} \left( \frac{0.0217369}{311.746e^{-0.00367647t} + 1} + 0.037 \right) t \right] \right\}^{4}.$$
(2.7)

O gráfico correspondente ao modelo (2.7) pode ser visto na figura 3.



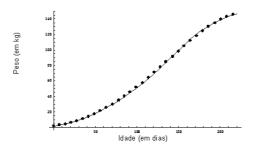


Figura 2: A curva P(t) do modelo (2.6) para suínos machos

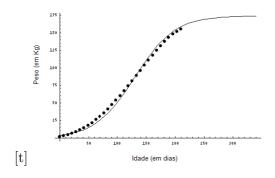
Figura 3: A curva P(t) do modelo (2.7) para suínos fêmeas

# 3. Comparação com outros modelos e conclusões

A função P(t) para o modelo Logístico com os dados da tabela 1, no caso dos suínos machos é dada por:

$$P(t) = \frac{173.922}{31.770e^{-0.026793t} + 1}$$

e o gráfico comparativo está na figura 4.



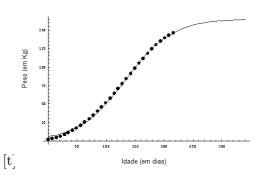


Figura 4: Modelo Logístico dos machos comparado com os dados

Figura 5: Modelo Logístico das fêmeas comparado com os dados

De forma análoga temos a função peso para os suínos Fêmeas:

$$P(t) = \frac{165.698}{47.7711e^{-0.0281433t} + 1}$$

O gráfico correspondente está na figura 5.

A função P(t) para o modelo de Gompertz com os dados da tabela 1, no caso dos suínos machos é dada por:

$$P(t) = 191.643 \left(\frac{1.5}{191.643}\right)^{e^{-0.026793t}}$$

e seu gráfico comparativo com os dados está na figura 6.

No caso das fêmeas:

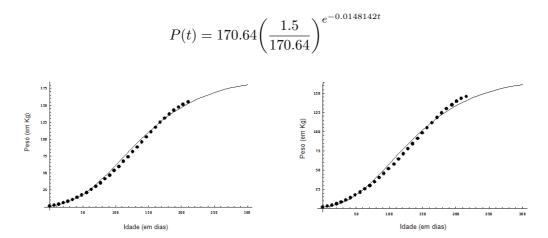


Figura 6: Modelo de Gompertz dos machos comparado com os dados

Figura 7: Modelo de Gompertz das fêmeas comparado com os dados

Verificamos, por meio de testes estatísticos (de Oliveira, 2006), que o modelo de von Bertalanffy generalizado foi o que melhor se ajustou aos dados em relação aos modelos logístico e de Gompertz.

É fato notável que, ao aplicarmos o modelo de von Bertalanffy generalizado aos dados da tabela de suínos com a função  $\beta(t)$  ajustada pela função logística, obtemos melhores resultados do que se aplicarmos diretamente o modelo logístico à função peso P(t).

Observamos que, no caso do crescimento em peso de suínos, a função  $\beta(t)$  logística ajustou muito bem os dados. No caso do crescimento em peso de aves a função mais adequada para  $\beta(t)$  mostrou ser a exponencial assintótica (Bassanezi, 2002; Leite, 2003). Seria sempre assim para mamíferos e aves? E para peixes e insetos?

### Referências

- Bassanezi, R. C. (2002). Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: Uma nova estratégia. Contexto, São Paulo.
- Bassanezi, R. C. e Ferreira Jr., W. C. (1988). Equações Diferenciais com Aplicações. Harbra, São Paulo.
- de Oliveira, L. (2006). Modelagem matemática no crescimento de suínos de corte. Relatório de iniciação científica PIBIC. Departamento de Matemática, UFOP, Ouro Preto/MG.
- Leite, A. L. F. (2003). Modelagem matemática aplicada ao crescimento em peso de aves de corte. Monografia (Graduação) Curso de Matemática, Departamento de Matemática, UFOP, Ouro Preto/MG.
- West, G. B., Woodruff, W. H., e Brown, J. H. (2002). Allometric scaling of metabolic rate from molecules and mitochondria to cells and mammals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 99:2473–2478.

# Estimativa do coeficiente de difusão da Influenza Aviária (H5N1)

Juliana M. Rodrigues<sup>1</sup>, João Frederico C. A. Meyer<sup>2</sup>, IMECC – UNICAMP, C.P. 6065, 13.083-970, Campinas/SP.

Resumo. Neste trabalho se relata como foram obtidas algumas estimativas de coeficientes de difusão da influenza aviária, comentam-se tais resultados além de se averiguar o grau de confiança que tais estimativas possam ter com vistas a uma futura possibilidade de uso em modelagens que combinem resultados clássicos de tipo SIR/SIRS com sistemas de EDP de dispersão e transporte.

Palavras-chave: Sistemas de EDP; Infecção por vírus H5N1; Gripe aviária.

## 1 Introdução:

Já se pode considerar como usual o uso de equações a derivadas parciais ou sistemas de EDPs de difusão e advecção no estudo de fenômenos de dispersão e transporte em fenômenos biológicos. Com vistas ao uso de tais equações ou sistemas para o caso geral de risco de infecção pelo vírus H5N1, este trabalho apresenta os esforços para, em diferentes situações, efetuar o cálculo de coeficientes de dispersão de risco, para situações já documentadas de tal dispersão em várias regiões do mundo. A técnica adotada (cf. Edelstein-Keshet, 2005) é a seguinte: Considerando-se como (em primeira aproximação) a EDP para  $R = R(x, y, t), (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$  e  $t \in (0, T]$ :

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla R) - \nabla \cdot (R \cdot \vec{V}) - \mu \cdot R + f, \tag{1}$$

onde, do lado direito, figuram respectivamente a dispersão, o transporte, uma mortalidade induzida (na qual se pode incluir – matematicamente – uma dinâmica Malthusiana) e, finalmente, uma fonte de infecção ou de risco. As condições de contorno para a região considerada podem ser (devido à distância ou a barreiras

 $<sup>^1</sup>$ jumarta@gmail.com

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>joni@ime.unicamp.br

geofísicas, de Dirichlet homogêneas, de von Neumann homogêneas ou, ainda, no caso de entrada ou saída de risco pelas bordas de  $\Omega$ , condições ditas de Robin.

Assim, sendo, portanto, D o coeficiente de difusão, verificamos (Meyer e Souza, 2006) que uma possível aproximação para D é dada por:

$$D = \frac{(R - r_0)}{\tau 2\pi} \left( 1 + \ln(r_0) - c_0 \frac{\ln\left(\frac{R}{r_0}\right)}{c_R - c_0} \right) + \frac{1}{\tau 2\pi} (r_0 \ln(r_0) - R \ln(R))$$
 (2)

onde  $r_0$  é o raio dentro do qual havia  $c_0$  aves infectadas a princípio, e R é o perímetro no qual existem  $c_R$  aves infectadas.

Aqui tomaremos  $c_R = 0$  e assim se obtém:

$$D = \frac{(R - r_0)}{\tau 2\pi} \left( 1 + \ln(r_0) + \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \right) + \frac{1}{\tau 2\pi} (r_0 \ln(r_0) - R \ln(R)).$$
 (3)

Uma simplificação algébrica leva a

$$D = \frac{R - r_0 \left(1 - \ln\left(\frac{r_0}{R}\right)\right)}{\tau 2\pi},\tag{4}$$

ou seja, a primeira estimativa para D, neste caso, independe da concentração inicial de animais e é função apenas dos raios considerados e do tempo de espalhamento de risco – ou de aves infectadas.

Pode-se então ver um tanto além daquilo que a equação anterior permitia, observando que, para valores de  $r_0$  (lembrando que  $r_0 < R$ ) em que R é bem próximo de  $r_0$  (são os casos em que  $r_0/R \approx 0,9$ ), pode-se usar a aproximação  $D \approx \frac{R-r_0}{\tau 2\pi}$  e, para  $r_0 \ll R$ , tem-se:  $D \approx \frac{R_0}{\tau 2\pi}$ .

Por outro lado, uma vez de posse desse valor para D, pode-se continuar a estimar o tempo que o risco (ou a infecção) leva para abranger uma região circular de determinado R, dado esse tempo por:  $\tau = \frac{R - r_0 \left(1 - \ln\left(\frac{r_0}{R}\right)\right)}{2\pi D}$ .

# 2 Procedimento do cálculo de diferentes dispersões:

Na estimativa dos diferentes valores de D e T para algumas regiões geográficas descritas pela organização Mundial de Saúde, foram usados os seguintes procedimentos:

- 1. De acordo com a disponibilidade e manuseabilidade dos dados no(s) site(s) usado(s) como fonte, escolhem-se o(s) país(es).
- 2. Os dados são organizados por ordem cronológica.
- 3. Opta-se por um mapa com escala do(s) país(es) que contenha o maior número possível de cidades onde os surtos ocorreram.
- 4. Enumeram-se no mapa o primeiro surto de cada localidade de modo a, se possível for, observar o caminho percorrido pela doença.
- 5. Pode-se agora escolher dois pontos dos marcados no mapa para estimar o D para aquele país. Os critérios para tal escolha são a observação, de acordo com os pontos enumerados de que provavelmente a doença se alastrou de um ponto escolhido para o outro ao invés de ser proveniente de uma outra localidade, o que pode ocorrer se, por exemplo, dois animais infectados chegarem ao mesmo país no mesmo dia mas em locais razoavelmente distantes. Neste caso teríamos dois focos iniciais que se dispersariam independentemente, até que, talvez, se encontrassem. Assim, a proximidade entre pontos que tiveram surtos subseqüentes faz com que tais pontos pareçam bons candidatos para nossos cálculos.
- 6. Uma vez selecionados os pontos, estimam-se os raios e tomam-se nas tabelas 2 e 2 o tempo que a doença levou para se dispersar da primeira localidade à segunda.
- 7. Calcula-se a estimativa de D com os parâmetros obtidos.
- 8. E também o erro da estimativa de D de acordo com:
- 9.  $Erro(D) = \sum_{i} \left| \frac{\partial D}{\partial p_{i}} \right|_{p_{i} = p_{i0}} \Delta p_{i}$  onde  $p_{i}$ , i = 1, 2, 3 são os parâmetros R,  $r_{0}$  e  $\tau$ ;  $p_{i0}$  é o valor do parâmetro que utilizamos para avaliar D e  $\Delta p_{i}$  i = 1, 2, 3 os respectivos erros de cada variável, a saber:
- 10.  $\Delta r_0 = 0.1 * r_0$
- 11.  $\Delta R = 0.1 * R$

12. 
$$\Delta \tau = 0.5$$

- 13. Sendo os dois primeiros provenientes das medidas feitas nos mapas, da própria estimativa de cada raio que é tomada unicamente por observação do mapa muitas vezes e, em alguns casos, da necessidade de, a partir de outros mapas, supor a localização de determinada cidade no mapa com escala. O erro de  $\tau$  é proveniente do tipo de dados disponíveis.
- 14. De acordo com os critérios mencionados acima, escolhem-se os outros dois pontos no mapa para conferir se o tempo obtido usando o valor que estimado para D aliado aos outros parâmetros aproxima bem o tempo que a doença de fato levou para se dispersar de uma localidade à outra.
- 15. Repete-se o passo 6.
- 16. Calcula-se a estimativa de T com os parâmetros obtidos.
- 17. Calcula-se também o erro da estimativa de T de acordo com:

 $Erro(T) = \sum_{i} \left| \frac{\partial T}{\partial q_i} \right|_{q_i = q_{i0}} \Delta q_i$  onde  $q_i$ , i = 1, 2, 3 são os parâmetros R,  $r_0$  e D;  $q_{i0}$  é o valor do parâmetro utilizado para avaliar T e  $\Delta q_i$  i = 1, 2, 3 os respectivos erros de cada variável , a saber:

18. 
$$\Delta r_0 = 0.1 * r_0$$
,  $\Delta R = 0.1 * R$ ,  $\Delta D = \text{erro estimado em 9}$ .

Por exemplo, usando a Tabela 2 que diz respeito à evolução da doença no interior da Turquia, conseguida em OIE (2006) e organizada por ordem de surtos; tomando  $\tau$  em dias, após conseguir um mapa com escala e mapear o primeiro surto de cada localidades, decidimos que um bom representante para o comportamento da doença seria o de como a partir de Agri ela se alastrou até Erzurum, sendo assim tomamos R=200 Km, distância aproximada de Agri a Erzurum;  $r_0=50$  Km, raio aproximado de Agri;  $\tau=35$  dias, tempo que a doença levou para chegar a Erzurum.

Substituindo esses valores em (4) obtemos:  $D \approx 0,3669 \, \mathrm{Km^2/dia} \, \mathrm{com} \, Erro(D) \approx 0,1769.$ 

Seguindo com nossa idéia, podemos agora testar o valor que acabamos de obter. Novamente, com  $r_0 = 50$  Km, raio aproximado de Agri, mas agora com

R=300 Km, distância aproximada de Agri a Elazig e com  $D\approx 0,3669,\,\tau$ esperado é 39 dias e o obtido é  $\tau_0\approx 69,58.$ 

Este valor não corresponde ao tempo que a doença levou para atingir Elazig, tempo esse que, como afirmamos pouco antes, é de 39 dias.

Mas este valor representa apenas 0,58 dias a menos do que a doença levou para atingir Sinark que está no mesmo raio que Elazig, ou seja a mesma distância de Agri que Elazig.

Por fim, após repetir tal procedimento algumas vezes, de acordo com o enunciado, pudemos montar a seguinte tabela:

Fabela 1: D's, Erro(D)'s, T's e Erro(T)'s estimados para Alemanha, China, Egito, França, Nigéria, Polônia, Romênia e Turquia

Ostvorpommern-Rostock Sandrans-Marlieux Joyeux-Lapeyrouse Konstanz-Lindau Xiaogan-Huainan Joyeux-Monthiex Ningxia-Sichuan Tulcea-Ialomita Kaduna-Jigawa Locais Kano-Katsina Quna-Sohag Quna-Luxor 0,5 0,2 0,2 0,5 0,5 0,2 0,5 0,2 0,5 0,5 Erro rado Testando Tesbe-35 12 48 23 29 69 9  $_{\rm rado}$ Lde 0,943752 0,437648 1,01787 1,22082 1,259460,52059 0,650503 1,66689 0,536981,47042,12101 erro T obtido 2,23806 2,09005 3,20346 8,85168 13,1196 4,94691 16,9238 68,1845 26,6734 3,909 5,43 \* No Graf. 10 14 11 1213 Ю 7 27,8  $r_0$ 10 100 125 20 10 10 30 10 20 72 25 20 Parâmetros para obtenção de  ${\cal T}$ 1000 100 100 R15030020 20 30 300 200 125 40 Erro(D)1,15760,36780,21710,0682 0,49720,1711D obtido 0,4493580,2869215,10607 3,66899 Parâmetros para obtenção de D  $r_0$ 100 10 10 40 15 20 25 20 400 200 200 R200 100 09 30 50  $\vdash$ Н 7 n 46 26 6 35 Alemanha Romênia Nigéria Turquia França Polônia China País Egito

(\*)1

 $^1\mathrm{Devido}$ à falta de dados não foi possível obter Tpara a Polônia.

A título de facilitar o entendimento do significado de tais dados, usando INFOPLEASE (2007):

Tabela 2: Latitudes aproximadas dos locais abordados	Tabela 2:	Latitudes	aproximadas	dos	locais	abordados.
--	-----------	-----------	-------------	-----	--------	------------

País	Latitude aproximada		
Alemanha	52,3		
China	$39,\!55$		
Egito	30,2		
França	48		
Nigéria	9,05		
Polônia	52,14		
Romênia	44,3		
Turquia	39		

Puderam ser obtidos os seguintes gráficos:

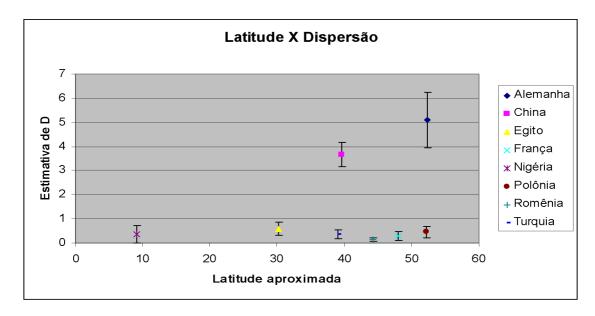


Figura 1: Dispersões da Tabela 2 pelas Latitudes da Tabela 2.

Já à primeira vista os coeficientes estimados para a Alemanha e a China destoam dos outros. Creditamos essa diferença a dois problemas razoavelmente

graves que tivemos com a estimativa dos raios para esses países:

- por falta de mapas completos com escala fomos obrigados a reunir diversos mapas menores para estimar a localização dos pontos no mapa incompleto com escala, digamos assim,
- a dificuldade de entender as subdivisões políticas, suas siglas e o fato de haver nomes levemente diferentes em inglês e em português para uma mesma localidade ou nomes muito parecidos para lugares diferentes.

Assim sendo, apesar dos Erro(D)'s serem razoavelmente pequenos, acreditamos que os valores de D nesses dois casos não estão corretos. Ainda assim, encontram-se no Apêndice 2 todos os mapas que foram usados para estimar os parâmetros necessários, assim como as tabelas de dados.

Já no caso da Polônia, ainda que impossibilitados de estimar T devido à falta de quantidade de dados, a qualidade dos dados e do mapa que conseguimos permitiunos obter um valor que parece razoável se comparado aos outros.

O par de dificuldades nome da localidade /mapa completo com escala ressurgiu, ainda que com menor intensidade, no caso do Egito e da França.

No caso da Nigéria acreditamos que a má qualidade dos dados, desorganizados e muitas vezes estranhos ao bom-senso foi a grande fonte de problemas.

Sobram assim os que consideramos os melhores resultados: a Romênia e a Turquia em que nenhum dos problemas supracitados ocorreu e isso se reflete no Erro(D) pequeno, principalmente no caso da Romênia e no razoável acerto para o T testado em ambos os casos.

Colocando de outro modo, podemos dividir os resultados em três tipos:

- os muito bons: Turquia e Romênia;
- os razoáveis: Egito França Nigéria e Polônia, cada um obtido com algumas dificuldades pequenas e peculiares; e
- os ruins: China e Alemanha, em que os problemas peculiares acabaram sendo intransponíveis.

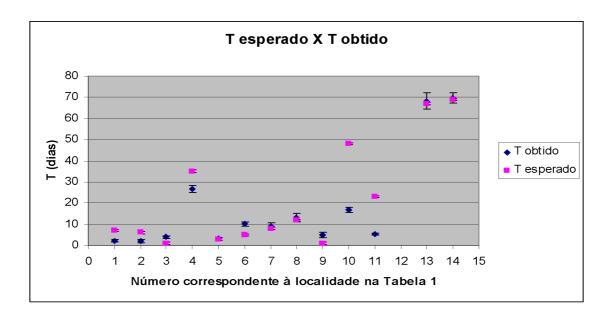


Figura 2: Comparação entre T's esperados e obtidos em cada um dos testes.

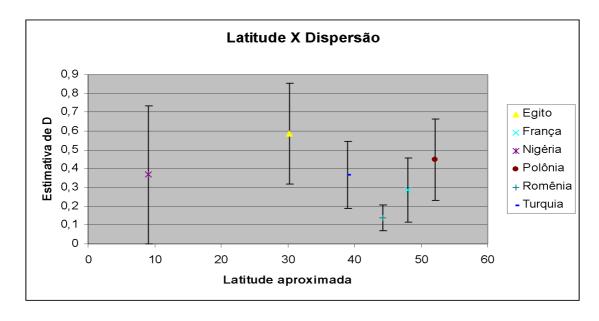


Figura 3: Semelhante ao gráfico sem as estimativas consideradas ruins.

Observando mais de perto a disposição dos dados que consideramos melhores, fica mais clara a possibilidade de, no futuro, se encontrar uma relação entre D e alguma característica natural, principalmente se coeficientes de outros lugares forem estimados e os já obtidos refinados por meio de melhores fontes.

#### Referências

Edelstein-Keshet, L. (2005). Mathematical models in biology. SIAM, Philadelphia.

- INFOPLEASE All the knowledge you need (2007). Latitude and longitude of world cities. URL: http://www.infoplease.com/ipa/A0001769.html. Acesso em: 25/06/2007.
- Meyer, J. F. C. A. e Souza, J. M. R. (2006). Estimativa do coeficiente de difusão da influenza aviária (H5N1). Relatório de MS777 segundo semestre de 2006.
- OIE World Organisation for Animal Health (2006).Update on avian influenza in animals (type H5). URL: http://www.oie.int/downld/AVIAN%20INFLUENZA/Turkey%20Followup%20report%2020060117.pdf. Acesso em: 20/11/2006.