

Avaliação da toxicidade de misturas utilizando números *fuzzy*

Magda S. Peixoto,
Claudio M. Jonsson, Lourival C. Paraíba, e
Laécio C. Barros

DFQM, CCTS, UFSCar, Sorocaba/SP, Brasil
Embrapa Meio Ambiente, Jaguariuna/SP, Brasil
DMA, IMECC, UNICAMP, Campinas/SP, Brasil
{magda@ufscar.br,
claudio.jonsson@embrapa.br, lourival.paraiba@embrapa.br,
laeciocb@ime.unicamp.br}

Resumo. Práticas agrícolas que usam vários agrotóxicos podem contaminar águas superficiais e subterrâneas com concentrações de misturas de agrotóxicos que podem acarretar sérios riscos à qualidade das águas e à saúde dos organismos aquáticos que nelas habitam. Concentrações de misturas de agrotóxicos na água podem agravar os efeitos tóxicos em organismos aquáticos, quando comparadas com os efeitos tóxicos de concentrações individuais de cada agrotóxico componente da mistura. O objetivo deste trabalho é desenvolver um método matemático que utiliza números *fuzzy* para classificar efeitos ecotoxicológicos em organismos aquáticos de concentrações de misturas de agrotóxicos ocorrendo na água, classificando-os em antagonísticos, aditivos ou sinérgicos e também para estabelecer a magnitude dos efeitos das concentrações das misturas. O método proposto utilizando números *fuzzy* pode ser sugerido em protocolos estabelecidos por agências reguladoras para classificar efeitos ecotoxicológicos de misturas de agrotóxicos na água.

Palavras-chave: número *fuzzy*, sinergismo, antagonismo, aditividade.

1 Introdução

A prática intensiva da agricultura pode acarretar riscos à qualidade das águas e dos organismos que nelas habitam, devido à deriva de agrotóxicos por escoamento superficial e lixiviação. Tais fenômenos podem proporcionar a presença simultânea de dois ou mais compostos químicos na água podendo ocasionar a potencialização dos efeitos tóxicos. A interação entre as moléculas pode aumentar (sinergismo) ou diminuir (antagonismo) o efeito total, resultando em uma ação maior ou menor que simplesmente a somatória (aditiva) dos efeitos. A toxicidade de um composto pode ser expressa pelo seu valor de “concentração letal média (CE50)” ou concentração que afeta 50% de indivíduos de uma população, num determinado intervalo de tempo. Portanto, quanto menor esse valor, mais

tóxico é o composto. Conhecendo-se valores de CE50 referentes aos compostos individuais e valores de CE50 referentes a esses compostos na mistura, com seus intervalos de confiança, é necessário classificar a magnitude do efeito de misturas nos organismos, quando comparada com as concentrações individuais dos componentes da mistura. É necessário também estabelecer intervalos de confiança para a magnitude do efeito [2].

O objetivo deste trabalho é desenvolver um método que utiliza números *fuzzy* para classificar efeitos ecotoxicológicos em antagonico, aditivo ou sinérgico em organismos aquáticos de concentrações de misturas de agrotóxicos na água, estabelecendo a magnitude do efeito de concentrações de misturas. Em seguida, comparar os resultados obtidos pelo nosso método com os resultados gerados pelo método clássico [2]. O método desenvolvido com números *fuzzy* pode ser sugerido para compor protocolos estabelecidos por agências reguladoras para classificar efeitos ecotoxicológicos de misturas de agrotóxicos na água.

2 Metodologia

A Teoria dos Conjuntos *Fuzzy* foi desenvolvida por Zadeh [5], em meados da década de 1960 para representar o conhecimento incerto e impreciso, tornaram-se uma das áreas emergentes no domínio das tecnologias contemporâneas de processamento de informações. Ele fornece um meio aproximado, mas eficaz, de descrever o comportamento do sistema que é muito complexo, mal definido, com poucos dados [4].

Variáveis linguísticas (ou *fuzzy*) são variáveis cujos valores assumidos são conjuntos *fuzzy* [4].

Definição 1: Seja A um subconjunto *fuzzy* de X e $\alpha \in [0, 1]$. O α -nível de A é um subconjunto de X definido por $[A]^\alpha = \{x \in X / \psi_A(x) \geq \alpha\}$, onde valor de $\psi_A(x)$ fornece o grau de pertinência de x em A .

Definição 2: Um conjunto *fuzzy* A é um número *fuzzy* quando o conjunto universo no qual ψ_A está definida é o conjunto dos números reais \mathbb{R} e satisfaz as seguintes condições: (i) todos os α -níveis de A são intervalos fechados não vazios de \mathbb{R} ; e (ii) $suppA = \{x \in \mathbb{R} / \psi_A(x) > 0\}$ é limitado.

Observamos que todo número real é um número *fuzzy* particular cuja função de pertinência é a função característica. As operações aritméticas envolvendo números *fuzzy* estão estritamente ligadas às operações aritméticas intervalares. Utilizando a definição de α -nível teremos um “método prático” para se obter os resultados de cada operação entre números *fuzzy*. Tal método está apresentado em [1].

2.1 O método proposto

Toxicidade de um composto é definida pelo seu valor de concentração letal média – CE50, isto é, a concentração que causa 50% de mortalidade em organismos.

Para determinar esse valor e seu intervalo de confiança de 95% utiliza-se o método clássico de Litchfield and Wilcoxon (ver [2]). A toxicidade de misturas de duas ou mais substâncias é comumente chamada de sinérgica, aditiva ou antagônica, dependendo da relação de toxicidade da mistura. Sempre que intervalo de confiança de 95% do índice de aditividade se sobrepõe ao zero, isto é, 0 pertence ao intervalo de confiança de 95% encontrado, a toxicidade é dita aditiva [2].

Propomos usar números fuzzy para classificar a mistura em antagônica, aditiva ou sinérgica. Para este método foram considerados os valores da EC50 misturados e separados das substâncias A e B como sendo números fuzzy e os intervalos de confiança de $\alpha\%$ como sendo o α -nível, respectivamente. Para cada substância X definimos um número *fuzzy* triangular correspondente ao seu EC50 individualmente ou na mistura igual a $X = (X_-; \bar{X}; X_+)$, onde X_- é o limite inferior do intervalo confiança de $\alpha\%$, \bar{X} é o valor EC50 e X_+ é o limite superior do intervalo confiança de $\alpha\%$. Sejam A_- o limite inferior e A_+ o limite superior do α -nível de A , ou seja, da substância A individualmente; A_{m-} o limite inferior e A_{m+} , o limite superior do α -nível de A_m , ou seja da substância A na mistura; B_- o limite inferior e B_+ o limite superior do α -nível de B , ou seja, da substância B individualmente; B_{m-} o limite inferior e B_{m+} , o limite superior do α -nível de B_m , ou seja da substância B na mistura; então definimos

$$\frac{[A_{m-}, A_{m+}]}{[A_-, A_+]} + \frac{[B_{m-}, B_{m+}]}{[B_-, B_+]} = SI.$$

$$IAF = \begin{cases} ([1, 1]/SI) - [1, 1] & \text{se } SM \leq 1 \\ SI(-[1, 1]) + [1, 1] & \text{se } SM \geq 1 \end{cases} \quad (1)$$

onde SM é a média aritmética entre os limites inferior e superior de SI .

3 Resultados

Na tabela 1, as colunas 2, 3 e 4 trazem dados disponveis em Marking [3]. Na última coluna temos o índice de atividade *fuzzy* correspondente fornecido pelo nosso método, considerando $\alpha = 0,95$. Ressaltamos que poderíamos adotar qualquer α , mas escolhemos $\alpha = 0,95$, para compararmos os resultados obtidos pelo método clássico [2] e os gerados pelo nosso método.

4 Conclusões

A toxicidade de um composto pode ser expressa pelo seu valor de “concentração letal média (CE50)” ou concentração que afeta 50% de indivíduos de uma população, num determinado intervalo de tempo, ou seja, quanto menor esse valor, mais tóxico é o composto. É necessário também estabelecer intervalos de confiança para a magnitude do efeito [2].

Neste trabalho foi desenvolvido um método que utiliza números *fuzzy*, ou seja, o índice de atividade *fuzzy* (1), para classificar efeitos ecotoxicológicos em

Tabela 1. Exemplo

Substância	CE50 e intervalo de confiança de 95% Individualmente	CE50 e intervalo de confiança de 95% na combinação	Índice e intervalo de confiança	Índice de aditividade <i>fuzzy</i>
A	0,0312 [0,0266; 0,0366]	0,03 [0,272; 0,0331]	-0,574	[-1,4307; -0,1729] Antagonismo
B	0,049 [0,0279; 0,0633]	0,03 [0,272; 0,0331]	[-1,43; -0,173]	
A	70 [59,2; 82,7]	3,44 [2,92; 4,06]	7,20	[5,0851; 10,0106] Sinergismo
B	47,2 [42,4; 52,6]	3,44 [2,92; 4,06]	[5,09; 10,0]	

antagônico, aditivo ou sinérgico em organismos aquáticos de concentrações de misturas de pesticidas na água, estabelecendo a magnitude do efeito de concentrações de misturas. Pode-se observar que os valores obtidos pelo método utilizando números *fuzzy* estão muito próximos aos valores presentes na literatura [2], porém com um número menor de contas e com mais simplicidade de cálculos.

O método desenvolvido com números *fuzzy* pode ser utilizado em protocolos estabelecidos por agências reguladoras para classificar efeitos ecotoxicológicos de misturas de pesticidas na água.

Agradecimentos. A primeira autora agradece à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), PNPd/CAPES, e o quarto autor agradece ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), projeto número 305862/2013–8, pelo apoio financeiro.

References

1. Barros, L.C., Bassanezi, R.C.: Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática, 2 ed., IMECC, UNICAMP, Campinas/SP (2010).
2. Litchfield, J.T., Wilcoxon, F.: A simplified method of evaluating dose-effect experiments, *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 96, 338–353 (1949).
3. Marking, L.L.: Toxicity of chemical mixtures. In: Rang, G.M. and Petrocelli, S.R. *Fundamentals of aquatic toxicology: Methods and application*. Hemisphere Publishing Corporation, Washington, p.164-176 (1985).
4. Pedrycs, W., Gomide, F.: *An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design*, Massachusetts Institute of Technology (1998).
5. Zadeh, L.A.: *Fuzzy Sets*, *Informat. Control*, 8, 338–353 (1965).