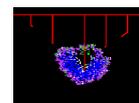
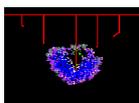


SOLABIMA2015

CONGRESSO LATINOAMERICANO DE BIOMATEMÁTICA

13 a 17 de Julho 2015

Unesp, Botucatu – Brasil



Modelagem do efeito ecotoxicológico de misturas de agrotóxicos em organismos aquáticos utilizando números fuzzy

Magda da Silva Peixoto

Renato Fernandes Cantão,

DFQM, CCTS, UFSCar

18052-780, Sorocaba, Brasil

E-mail: magda@ufscar.br, rfcantao@ufscar.br

Claudio M. Jonsson

Lourival C. Paraíba

EMBRAPA

13820-000, Jaguariuna, Brasil

E-mail: claudio.jonsson@embrapa.br, lourival.paraiba@embrapa.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 foi desenvolver um modelo 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 modelo 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, toxicidade, sinergismo, antagonismo, aditividade

Introdução

Devido a prática intensiva da agricultura, podem ocorrer riscos ao comprometimento da qualidade das águas e dos organismos que nelas habitam decorrente da 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. Essa presença simultânea de substâncias num dado compartimento ambiental pode também ser proveniente das próprias formulações comerciais que contém mais de um ingrediente ativo, ou da mistura dos produtos nos tanques de pulverização. Pois, o uso de mais de um componente é visto como vantagem devido à redução do custo de pulverização e da dose recomendada, além de aumentar o número de espécies pragas a serem quimicamente controladas.

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.

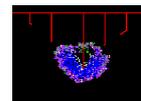
Assim, o objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo (método) que utiliza números fuzzy para classificar efeitos ecotoxicológicos em antagonístico, aditivo ou sinérgico em organismos aquáticos de concentrações de misturas de agrotóxicos na água, estabelecendo a magnitude do efeito de concentrações de misturas. O método clássico utilizado para classificar e definir efeitos ecotoxicológicos de misturas

SOLABIMA2015

CONGRESSO LATINOAMERICANO DE BIOMATEMÁTICA

13 a 17 de Julho 2015

Unesp, Botucatu – Brasil



não permite estabelecer intervalos de confiança da magnitude dos efeitos. 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.

1 Material e métodos

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 [2].

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

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 [1].

2 Resultados

A toxicidade de misturas de dois ou mais substâncias é comumente chamada de sinérgica, aditiva ou antagonista, dependendo da relação de toxicidade da mistura.

Nas tabelas abaixo, as colunas 2, 3 e 4 trazem dados fornecidos por Marking [3]. Na última coluna temos o número fuzzy correspondente, obtido por meio das operações aritméticas intervalares [1].

Tabela 1: Exemplo 1.

Substância	CE50 e intervalo de de confiança de 95% Individualmente	CE50 e intervalo de confiança de 95% na combinação	Índice de aditividade e intervalo confiança	Índice de aditividade fuzzy
A	0.0312	0.03		
B	0.0266 a 0.0366	0.272 to 0.0331	-0.574	[-1.4307, -0.1729]
	0.0279 a 0.0633	0.272 a 0.0331	-1.43 a -0.173	Antagonismo

Tabela 2: Exemplo 2

Substância	CE50 e intervalo de de confiança de 95% Individualmente	CE50 e intervalo de confiança de 95% na combinação	Índice de aditividade e intervalo confiança	Índice de aditividade fuzzy
A	1.81	1.16		
B	1.53 a 2.14	0.998 a 1.35	-0.326	[-0.8083, 0.0287]
	0.0346	0.0237	-0.808 a 0.0295	Aditivo
	0.0204 a 0.0275	0.0204 a 0.0275		

Tabela 3: Exemplo 3

Substância	CE50 e intervalo de de confiança de 95% Individualmente	CE50 e intervalo de confiança de 95% na combinação	Índice de aditividade e intervalo confiança	Índice de aditividade fuzzy
A	70	3.44		
B	59.2 a 82.7	2.92 a 4.06	7.20	[5.0851, 10.0106]
	47.2	3.44	5.09 a 10.0	Sinergismo
	42.4 a 52.6	02.92 a 4.06		

SOLABIMA2015

CONGRESSO LATINOAMERICANO DE BIOMATEMÁTICA

13 a 17 de Julho 2015

Unesp, Botucatu – Brasil

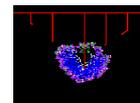


Tabela 4: Exemplo 4

Substância	CE50 e intervalo de de confiança de 95% Individualmente	CE50 e intervalo de confiança de 95% na combinação	Índice de aditividade e intervalo confiança	Índice de aditividade fuzzy
A	17.3 13.5 a 22.2	7.6 5.74 a 10.1	0.51	[-1.5291, 0.0972] Aditivo
B	0.296 0.244 a 0.359	0.152 0.115 a 0.201	-1.53 a 0.108	
C	27.3 21.0 a 35.5	15.2 11.5 a 20.1		

A Figura 1 apresenta o isoblograma referente a cada tabela acima com condição inicial fuzzy, ou seja, com condição inicial dada pelo intervalo de confiança.

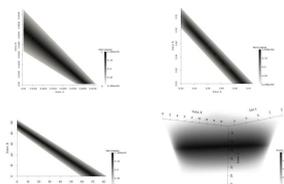


Figura 1: Isoblogramas com condição inicial fuzzy

3 Conclusões

A presença simultânea de dois ou mais compostos pode ocasionar uma potencialização dos efeitos tóxicos de uma substância. 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.

Neste trabalho foi desenvolvido um método que utiliza números fuzzy para classificar efeitos ecotoxicológicos em antagonístico, 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 modelo fuzzy estão muito próximos aos valores presentes na literatura, 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.

Referências

- [1] L. C. Barros e R. C. Bassanezi, *Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática*, 2ª ed., IMECC, UNICAMP, Campinas/SP, 2010.
- [2] G. J. Klir e B. Yuan, *Fuzzy Sets and Fuzzy Logic: Theory and Applications*, Prentice Hall, N. Jersey, 1995.
- [3] L. L. Marking, *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] W. Pedrycs e F. Gomide, *An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design*, Massachusetts Institute of Technology, 1998.
- [5] L. A. Zadeh, *Fuzzy Sets*, *Informat. Control*, 8:338-353, 1965.