

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE MATEMÁTICA
CURSO DE LICENCIATURA EM MATEMÁTICA

RICARDO NAZAR RODRIGUES

**EXPLORAÇÃO NUMÉRICA E ANALÍTICA DE UM PROBLEMA DE
CONTROLE ÓTIMO DA CONCENTRAÇÃO/QUANTIDADE DE
ÁLCOOL NO SANGUE**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

CURITIBA

2015

RICARDO NAZAR RODRIGUES

**EXPLORAÇÃO NUMÉRICA E ANALÍTICA DE UM PROBLEMA DE
CONTROLE ÓTIMO DA CONCENTRAÇÃO/QUANTIDADE DE
ÁLCOOL NO SANGUE**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento Acadêmico de Matemática da Universidade Tecnológica Federal do Paraná como requisito parcial para obtenção do título de “Licenciado em Matemática”.

Orientador: Prof. Dr. Andres David Báez Sanchez

CURITIBA

2015



Ministério da Educação
UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
Câmpus Curitiba
Diretoria de Graduação e Educação Profissional
Departamento Acadêmico de Matemática
Coordenação do Curso de Licenciatura em Matemática



TERMO DE APROVAÇÃO

“EXPLORAÇÃO NUMÉRICA E ANALÍTICA DE UM PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO DA CONCENTRAÇÃO/QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE”

por

“RICARDO NAZAR RODRIGUES”

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi apresentado às 14:30 do dia 15 de Julho de 2015 na sala LIMAT como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciado em Matemática na Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR - Câmpus Curitiba. O(a) aluno(a) foi arguido pela Banca de Avaliação abaixo assinados. Após deliberação, de acordo com o parágrafo 1º do art. 37 do Regulamento Específico do trabalho de Conclusão de Curso para o Curso de Licenciatura em Matemática da UTFPR do Câmpus Curitiba, a Banca de Avaliação considerou o trabalho **APROVADO** (aprovado ou reprovado).

<hr/> <p>Prof. Dr. Andres David Baez Sanchez (Presidente - UTFPR/Curitiba)</p>	<hr/> <p>Prof. Dr. João Luis Gonçalves (Avaliador 1 - UTFPR/Curitiba)</p>
<hr/> <p>Prof. Dr. Mateus Bernardes (Avaliador 2 - UTFPR/Curitiba)</p>	<hr/> <p>Prof. Dr. Rubens Robles Ortega Junior (Avaliador 3 - UTFPR/Curitiba)</p>
<hr/> <p>Profa. Dra. Neusa Nogas Tocha (Coordenador do curso de Licenciatura em Matemática – UTFPR/Curitiba)</p>	<hr/> <p>Prof. Dr. Marco Aurélio Kalinke (Professor Responsável pelo TCC – UTFPR/Curitiba)</p>

“A Folha de Aprovação assinada encontra-se na Coordenação do Curso.”

RESUMO

RODRIGUES, Ricardo Nazar. EXPLORAÇÃO NUMÉRICA E ANALÍTICA DE UM PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO DA CONCENTRAÇÃO/QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE. 69 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Licenciatura em Matemática, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2015.

Inspirado em estudos da cinética enzimática e trabalhos já elaborados sobre a modelagem matemática da quantidade de álcool no sangue, elaboramos e estudamos um modelo baseado em equações diferenciais para um problema de controle ótimo associado ao consumo de álcool, considerando a eliminação do álcool do organismo durante a ingestão. Com uma abordagem numérica e analítica, analisamos o modelo proposto buscando determinar a forma de ingestão de uma quantidade fixa de álcool em um tempo determinado que reduza o impacto do consumo dessa substância. Além disso foram feitas implementações nos softwares GeoGebra e MatLab.

Palavras-chave: equações diferenciais, controle ótimo, consumo de álcool, métodos numéricos

ABSTRACT

RODRIGUES, Ricardo Nazar. . 69 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Licenciatura em Matemática, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Curitiba, 2015.

Inspired by studies on enzyme kinetics and previous works on mathematical modelling of blood alcohol concentration, we proposed and studied a model based on differential equations for an optimal control problema associated with alcohol consumption, considering alcohol elimination during consumption. Using a numerical and analytical approach, we analyze the model trying to determine how ingest a fixed amount of alcohol in a determined time to reduce the impact of the consumption of this substance. In addition, several implementations were made in GeoGebra and MatLab software.

Keywords: differential equations , optimal control , numerical methods, alcohol consumption

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1	– Método de Euler	20
FIGURA 2	– Simulações	24
FIGURA 3	– Simulador:Determinação dos parâmetros	26
FIGURA 4	– Tempos de recuperação em função do tempo de consumo.	28
FIGURA 5	– Ilustração do uso de variáveis booleanas para definição do intervalo.	32
FIGURA 6	– Parâmetros válidos do teste afim	35
FIGURA 7	– Impacto para funções de ingestão do tipo $I(x)=ax+b$ como função de a ...	35
FIGURA 8	– Ilustração de funções factíveis.	37
FIGURA 9	– Ilustração da região factível.	38
FIGURA 10	– Impacto do consumo exponencial.	38
FIGURA 11	– Parâmetros válidos do teste periódico	39
FIGURA 12	– Resultados do teste periódico	40
FIGURA 13	– Região factível parcial do consumo polinomial de grau dois	43
FIGURA 14	– Região factível para o teste quadrático.	44
FIGURA 15	– Impacto do teste quadrático.	45
FIGURA 16	– Funções de ingestão que minimizam o impacto	47
FIGURA 17	– Funções de ingestão que maximizam o impacto	47

LISTA DE TABELAS

TABELA 1	– Efeitos do álcool. Fonte: http://www.ufrj.br/institutos/it/de/acidentes/etanol2.htm . . .	14
TABELA 2	– Dados da concentração de álcool pelo tempo Fonte: <i>BLOOD ÁLCOOL CONTENT</i>	25
TABELA 3	– Resultados numéricos para o tempo de recuperação.	29
TABELA 4	– Dados obtidos nas simulações do impacto	46

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	CONSTRUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO	10
2.1	ALGUNS MODELOS PARA A QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE	10
2.2	MODELAGEM MATEMÁTICA DAS REAÇÕES QUÍMICAS	11
2.3	O CONSUMO DE ÁLCOOL COMO UM PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO	14
3	ANÁLISE DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	16
3.1	EQUAÇÃO DA QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO ESTÔMAGO	16
3.2	ANÁLISE DA EQUAÇÃO DO ÁLCOOL NO ESTÔMAGO	16
3.3	ANÁLISE QUALITATIVA DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	17
4	SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS, APLICADO AO PROBLEMA DA QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE	19
4.1	MÉTODO DE EULER	19
4.2	MÉTODO DE TAYLOR	20
4.3	MÉTODO DE RUNGE-KUTTA	21
4.4	IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO	23
4.5	ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS	24
4.5.1	Método adotado para a estimação dos parâmetros do sistema de equações diferenciais proposto	25
4.6	TEMPO DE RECUPERAÇÃO	26
4.6.1	Testes numéricos	28
5	INTEGRAÇÃO NUMÉRICA APLICADA À DETERMINAÇÃO DO IMPACTO	30
5.1	INTERVALOS DE INTEGRAÇÃO	31
6	ANÁLISE E SIMULAÇÕES PARA DIFERENTES FAMÍLIAS FUNÇÕES REPRESENTADAS PELA TAXA DE INGESTÃO	33
6.1	TAXA DE INGESTÃO AFIM	34
6.2	TAXA DE INGESTÃO EXPONENCIAL	35
6.3	TAXA DE INGESTÃO PERIÓDICA	38
6.4	TAXA DE INGESTÃO QUADRÁTICA	41
6.5	CONCLUSÕES	45
7	COMENTÁRIO FINAIS	48
	REFERÊNCIAS	50
8	ANEXOS	51
8.1	CÓDIGOS ESSENCIAIS	51
8.1.1	Ingestão	51
8.1.2	Quantidade de álcool no estômago	51
8.1.3	Quantidade de álcool no sangue	52
8.1.4	Impacto	52
8.2	CÓDIGOS TESTES	55
8.2.1	Afim	56

8.2.2 Exponencial	57
8.2.3 Periódica	59
8.2.4 Polinomial	62
8.3 CÓDIGOS AUXILIARES	64

1 INTRODUÇÃO

Uma pessoa pode consumir substâncias potencialmente perigosas durante determinado intervalo de tempo. Exemplos destas situações são o consumo de medicamentos ou o consumo social de álcool, que em excesso no organismo, podem trazer danos à saúde. Nestas situações, é natural considerar a seguinte pergunta: como consumir esta substância para minimizar os impactos negativos?

O consumo de álcool é um caso particular do problema mais geral de processamento e controle de substâncias perigosas, mas em comparação com outros problemas, há mais estudos e trabalhos nesta área incluindo alguns modelos matemáticos simples para a variação da concentração de álcool baseados em equações diferenciais ordinárias. Nestes modelos matemáticos a ingestão e eliminação simultânea de álcool não têm sido consideradas amplamente, e há pouca ênfase no problema de minimização do impacto no organismo relacionado ao consumo.

Neste trabalho vamos propor e analisar um modelo para o problema baseado no controle ótimo de equações diferenciais ordinárias. O modelo considera duas etapas: a presença da substância no estômago (absorção) e no sangue (eliminação). Em seguida, estudaremos algumas propriedades analíticas do modelo e implementaremos alguns métodos numéricos para obter a solução aproximada do problema de controle ótimo, para formas de consumo específicas determinadas por diferentes famílias de funções.

2 CONSTRUÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

De forma simplificada, o processo de metabolização de uma substância ingerida, pode ser particionado em três etapas: ingestão, absorção e eliminação. Entendemos por ingestão o consumo da substância até a chegada no estômago e intestino. Parte da substância ingerida é absorvida e passada para a corrente sanguínea, processo que é chamado de absorção. Por fim, na corrente sanguínea, a substância é convertida em algo menos tóxico para uso do organismo ou eliminada pelo sistema excretor, essa etapa é chamada de eliminação. (MATIELO C.; FILHO, 2012) (SANTOS B. F.; SOUZA, 2010) (LUDWIN, 2011)

2.1 ALGUNS MODELOS PARA A QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE

Na literatura consultada sobre os modelos matemáticos para a concentração de álcool no sangue, encontramos referências relevantes que citam as três fases do consumo (ingestão, absorção e eliminação), entretanto não as consideram completamente, se fixando normalmente na absorção e eliminação.

O modelo mais simples para a determinação da concentração de álcool no sangue no tempo t em horas encontrado em (HECK, 2007), considera que essa taxa decai linearmente da seguinte forma:

$$BAC(t) = \frac{D}{rW} - \beta t \quad (1)$$

Onde BAC representa a concentração de álcool no sangue, D a quantidade de álcool consumida em gramas, r a constante de Widmark, W a massa do corpo em kg e β a taxa de metabolização em $g/L/h$. Esse modelo é normalmente aplicado em simuladores on-line pela sua fácil implementação e resultados razoáveis. A constante de Widmark, criador do modelo, leva em conta o gênero da pessoa, 0.68 para homens e 0.55 para mulheres.

Em (LUDWIN, 2011) são consideradas duas equações da seguinte forma:

$$\frac{dA}{dt} = -k_1 A$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1A - k_2B$$

Onde A é a quantidade de álcool no estômago B a quantidade de álcool no sangue, k_1 a constante de absorção do estômago e k_2 a constante de eliminação do álcool. Este modelo considera duas etapas de ingestão (estômago e sangue) mas supõe uma taxa de eliminação do sangue proporcional a quantidade de álcool presente no estomago.

Outro modelo é o modelo de Wagner (HECK, 2007), que também se baseia em uma equação diferencial para expressar a concentração de álcool no sangue da seguinte forma:

$$V_d \frac{dBAC}{dt} = - \frac{V_{max}BAC}{k_m + BAC}$$

Onde BAC é a concentração de álcool no sangue, V_d o volume de líquidos do corpo, V_{max} a velocidade máxima de eliminação e k_m uma constante.

Em (KOUBA S. J.;ELGINDI M. B. M.;LANGER, 2007), há uma maior exploração do significado das constantes, sendo o modelo descrito por:

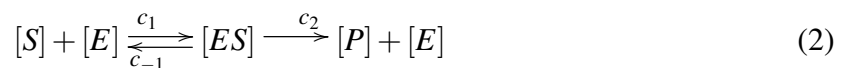
$$\frac{dx_1}{dt} = - \frac{\alpha x_1}{x_1 + \beta^b}$$

Onde x_1 é a quantidade de álcool no sangue, b é a taxa de gênero α um parâmetro relacionado a ação do fígado e β um parâmetro relacionado a ação do pâncreas. Este modelo é interessante, já que usando a função racional $-\frac{\alpha x_1}{x_1 + \beta^b}$, é possível modelar uma taxa de eliminação limitada por α , o que pode ser mais realista do que uma taxa de eliminação proporcional à quantidade de álcool no sangue.

O processo de metabolização do álcool pode ser entendido também como um processo de reações químicas catalisadas por enzimas (PATON, 2005b) (SANTOS B. F.; SOUZA, 2010). Portanto, vamos analisar a dinâmica deste tipo de reações antes de propor um novo modelo.

2.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DAS REAÇÕES QUÍMICAS

Com o intuito de descrever a velocidade de reação catalisada por enzimas, é possível considerar o modelo de Michaelis-Menten (FONTES, 1996) (MAZUCO, 2014) ilustrado por:



Temos ilustrado acima uma reação que se baseia em um processo enzimático, nesse processo as enzimas $[E]$ se associam ao substrato $[S]$ criando o composto enzima-substrato $[ES]$

que converte o substrato em produto $[P]$, por fim a enzima desassocia-se do produto para realizar outro ciclo. O modelo matemático proposto supõe que a quantidade de substrato $[S]_{TOT}$ é maior que a quantidade de enzimas $[E]_{TOT}$, o que significa que a reação está saturada, ou seja, a taxa de passagem direta entre o substrato e o produto é insignificante. Para a melhor compreensão do modelo, observe que podemos escrever a variação de enzima-substrato como:

$$\frac{d[ES]}{dt} = c_1[E][S] - c_{-1}[ES] - c_2[ES] \quad (3)$$

Dizer que a reação está saturada significa que todas as enzimas estariam catalisando a reação, portanto a variação de $[ES]$ é nula, logo por (3):

$$0 = c_1[E][S] - c_{-1}[ES] - c_2[ES] \Leftrightarrow [ES] = \frac{c_1[E][S]}{c_{-1} + c_2} \quad (4)$$

Definimos $c_m = \frac{c_{-1} + c_2}{c_1}$ como a constante de Michael-Menten, portanto a equação (4) pode ser escrita como:

$$[ES] = \frac{[E][S]}{c_m} \quad (5)$$

Por um raciocínio similar é possível descrever a variação do produto, ou seja, a velocidade da reação, da seguinte forma:

$$\frac{d[P]}{dt} = c_2[ES] \quad (6)$$

A quantidade total de enzimas que não estão na reação enzima-substrato é dada por:

$$[E] = [E_{TOT}] - [ES] \quad (7)$$

Substituindo (7) em (5):

$$[ES] = \frac{([E_{TOT}] - [ES])[S]}{c_m} \Leftrightarrow [ES] = \frac{[E_{TOT}][S]}{c_m + [S]} \quad (8)$$

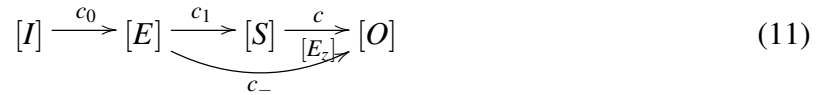
Portanto de (8) e (6):

$$\frac{d[P]}{dt} = c_2 \frac{[E_{TOT}][S]}{c_m + [S]} = c_3 \frac{[S]}{c_m + [S]} \text{ com } c_3 = c_2[E_{TOT}]. \quad (9)$$

Analogamente podemos descrever a quantidade de substrato como:

$$\frac{d[S]}{dt} = -c_2 \frac{[E_{TOT}][S]}{c_m + [S]} = -c_3 \frac{[S]}{c_m + [S]} \quad (10)$$

As equações (9) e (10) fazem parte do modelo de Michaelis-Menten (FONTES, 1996). Em relação ao problema da metabolização do álcool é possível considera-lo do ponto de vista de uma reação química, da seguinte forma: sejam $[E_z]$ as enzimas que convertem o álcool em algo menos tóxico, $[I]$ a quantidade ingerida, $[E]$ a quantidade no estômago, $[S]$ a quantidade no sangue e $[O]$ a quantidade eliminada, dessa forma:



Podemos considerar que no processo de ingestão não há a atuação significativa de enzimas na eliminação e na passagem de álcool para o sangue (PATON, 2005a), logo se $I(t)$ é a taxa de ingestão, então podemos supor que a variação da quantidade de álcool no estômago é dada por:

$$\frac{d[E]}{dt} = -c_1[E] + I(t) \quad (12)$$

Se desconsiderarmos a ação de enzimas no processo de eliminação de álcool do sangue temos a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d[S]}{dt} = c_1[E] - c[S]$$

No entanto, o álcool antes de ser eliminado é convertido em uma substância menos tóxica chamada acetato (PATON, 2005a). Assim, se considerarmos que o processo enzimático está atuando na neutralização do álcool, o modelo para a variação da quantidade de álcool no sangue pode ser escrito como:

$$\frac{d[S]}{dt} = c_1[E] - \frac{c_3[S]}{[S] + [c_m]} \quad (13)$$

Baseados nas considerações sobre a variação da quantidade/concentração de álcool no sangue, propomos o seguinte modelo, que além de incluir as duas fases no processo de consumo, e considerar uma taxa de eliminação de álcool do sangue limitada por k_2 , também considera uma função $I(x)$ da taxa de ingestão:

$$\frac{dA}{dt} = -k_0A + I(t) \quad (15a)$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1A - \frac{k_2B}{k_3 + B} \quad (15b)$$

onde A é a quantidade de álcool no estômago, B é a quantidade de álcool no sangue e I é a taxa de ingestão de álcool. A função de ingestão acrescentada no modelo terá importância

na análise das diferentes formas de consumo e o impacto gerado em cada caso, tratados posteriormente.

2.3 O CONSUMO DE ÁLCOOL COMO UM PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO

Suponha agora que devemos determinar $I(t)$ com o objetivo de minimizar os efeitos negativos causados pelo consumo excessivo de álcool, durante um intervalo $[0, T]$. Pode se considerar que estes efeitos negativos aparecem quando a concentração de álcool no sangue é superior a uma determinada constante L . Por exemplo, segundo a Secretaria Municipal de Transportes de São Paulo, os efeitos do álcool (Etanol) sobre um indivíduo pesando 70 Kg, podem ser descritos como se segue:

DOSE (g/l)	EFEITOS
0,2 a 0,3	As funções mentais começam a ficar comprometidas. A percepção da distância e da velocidade são prejudicadas.
0,31 a 0,5	O grau de vigilância diminui, assim como o campo visual. O controle cerebral relaxa, dando a sensação de calma e satisfação.
0,51 a 0,8	Reflexos retardados, dificuldades de adaptação da visão a diferenças de luminosidade; superestimação das possibilidades e minimização de riscos; e tendência à agressividade.
0,81 a 1,5	Dificuldades de controlar automóveis; incapacidade de concentração e falhas de coordenação neuromuscular.
1,51 a 2	Embriaguez, torpor alcoólico, dupla visão.
2,1 a 5	Embriaguez profunda.
> 5	Coma alcoólico.

Tabela 1: Efeitos do álcool.

Fonte: <http://www.ufrj.br/institutos/it/de/acidentes/etanol2.htm>

Seja L uma constante relacionada à quantidade de álcool no sangue, tal que se $B(t) > L$ o organismo fica sujeito aos impactos que a substância em questão pode causar. No caso do consumo de álcool, podemos considerar esse impacto como o período e a quantidade de álcool que afeta o sistema nervoso. Portanto, uma forma de quantificar o impacto total do consumo de álcool, pode ser dada por:

$$\text{Função Impacto} := \int_0^{\infty} \max\{B(t) - L, 0\} dt$$

Logicamente o mínimo impacto será atingido quando o consumo estiver entre 0 e T . Entretanto

vamos supor que deseja-se consumir uma quantidade total C de álcool no período de 0 a T , ou seja deve-se satisfazer que:

$$\int_0^T I(t)dt = C$$

Assim o problema de determinar o consumo de álcool $I(t)$ que minimiza o impacto, dadas as considerações anteriores, corresponde ao seguinte problema de controle ótimo:

$$\text{Minimizar: } \int_0^{\infty} \max\{B(t) - L, 0\}dt \quad (19)$$

$$\text{Sujeito a: } \frac{dA}{dt} = -k_0A + I(t) \quad (21a)$$

$$\frac{dB}{dt} = k_1A - \frac{k_2B}{k_3 + B} \quad (21b)$$

$$C = \int_0^T I(t)dt \quad (21c)$$

$$I(t) \geq 0, \text{ e } I(t) = 0 \text{ se } t > T. \quad (21d)$$

Nos próximos capítulos analisamos o comportamento do sistema de equações diferenciais proposto, abordamos numericamente o problema de estimar o valor da função objetivo e a partir de simulações computacionais estimamos o impacto gerado para diferentes formas de consumo.

3 ANÁLISE DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

3.1 EQUAÇÃO DA QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO ESTÔMAGO

A equação (21b) em geral não admite uma solução analítica em termos de funções elementares, porém a primeira equação, relacionada à ingestão, admite uma solução analítica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} = -k_0A + I(t) &\Leftrightarrow \frac{dA}{dt} + k_0A = I(t) \Leftrightarrow (e^{k_0t}A)' = e^{k_0t}I(t) \therefore \\ A(t) &= \frac{1}{e^{k_0t}} \int e^{k_0t}I(t)dt. \end{aligned} \quad (30)$$

Suponha que a função de ingestão é contínua por partes e $A(0) = a_0$, logo pelo teorema fundamental do cálculo podemos escrever:

$$A(t) = \frac{1}{e^{k_0t}} \left(\int_0^t e^{k_0s}I(s)ds + a_0 \right). \quad (31)$$

Nesse modelo a solução da integral pode não ser simples ou não existir dependendo da função $I(x)$, porém esta expressão analítica nos permite analisar a quantidade de álcool no estômago de forma mais precisa.

3.2 ANÁLISE DA EQUAÇÃO DO ÁLCOOL NO ESTÔMAGO

Como estamos considerando ingestão do tempo inicial 0 até o tempo T , podemos considerar uma função taxa de ingestão $I : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ definida da seguinte forma:

$$I(t) = \begin{cases} f(t), & \text{se } 0 \leq t \leq T \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (32)$$

Para analisar a coerência de função da quantidade de álcool no sangue, vamos observar o comportamento assintótico da função dada em (31). Se $t > T$, como $I(s) = 0$ para todo $s > T$

então:

$$A(t) = \frac{1}{e^{k_0 t}} \left(\int_0^T e^{k_0 s} I(s) ds + a_0 \right) \quad (33)$$

Note que em (33) o termo $\left(\int_0^T e^{k_0 s} I(s) ds + a_0 \right)$ é uma constante positiva que chamaremos de A_T , portanto:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{A_T}{e^{k_0 t}} = 0$$

Agora, note que se $t > T$ então $\frac{dA}{dt} = -k_0 A_T e^{-k_0 t}$, assim $\frac{dA}{dt} < 0$.

Portanto podemos concluir que a função tende a zero no decorrer do tempo, e que após T , a quantidade de álcool no estômago é decaída gradativamente. Este comportamento é coerente com o que se esperaria de um modelo para a quantidade de álcool no estômago.

3.3 ANÁLISE QUALITATIVA DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Assim como na quantidade de álcool no estômago, é importante saber se o modelo para a quantidade de álcool no sangue proposto é coerente com a realidade. A análise individual dessa função é dificultada por não ser linear, portanto, utilizaremos resultados de sistemas de equações diferenciais para realizar essa análise. Seja a função da taxa de ingestão $I(t)$ definida em (32), vamos considerar o seguinte sistema de equações após o momento em que não há mais ingestão ($t > T$), da seguinte forma:

$$A' = -k_0 A \quad (35a)$$

$$B' = k_1 A - \frac{k_2 B}{B + k_3} \quad (35b)$$

A seguir enunciamos e usamos alguns resultados relevantes sobre a estabilidade de sistemas de equações diferenciais. (FIGUEIREDO D. G.; NEVES, 2008).

Teorema 1: *O sistema formado por $X' = F(X, Y)$ e $Y' = G(X, Y)$ será quase linear em uma vizinhança de um ponto crítico (x_0, y_0) sempre que as funções F e G tiverem derivadas parciais contínuas até segunda ordem. Sendo que a aproximação do sistema quase linear é dada por:*

$$\begin{bmatrix} \tilde{X}' \\ \tilde{Y}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_x(x_0, y_0) & F_y(x_0, y_0) \\ G_x(x_0, y_0) & G_y(x_0, y_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}$$

Teorema 2: *Sejam r_1 e r_2 autovalores de um sistema quase linear com ponto crítico*

em (x_0, y_0) . Se $r_1 < r_2 < 0$ então (x_0, y_0) é um ponto de equilíbrio assintoticamente estável.

Note que $A = 0$ e $B = 0$, correspondem ao único ponto de equilíbrio do sistema (35). Além disso, as funções $F(A, B) = -k_0A$ e $G(A, B) = k_1A - \frac{k_2B}{B+k_3}$ são diferenciáveis para todo $A, B > 0$, $\frac{dF}{dA}(0, 0) = -k_0$, $\frac{dF}{dB}(0, 0) = 0$, $\frac{dG}{dA}(0, 0) = k_1$ e $\frac{dG}{dB}(0, 0) = -\frac{k_2}{k_3}$. Com essas informações é possível construir o sistema linear relacionado ao ponto $(0, 0)$:

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}' \\ \tilde{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_0 & 0 \\ k_1 & -\frac{k_2}{k_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \quad (40)$$

Note que o sistema quase linear definido em (40) é triangular, portanto os autovalores são os elementos da diagonal principal, ou seja, iguais a $-k_0$ e $-\frac{k_2}{k_3}$, e as constantes k_0, k_2 e k_3 são sempre reais positivas. A partir dessas afirmações podemos concluir que $(0, 0)$ é um ponto de equilíbrio assintoticamente estável do sistema, isto implica que se para algum t_0 , $(A(t_0), B(t_0))$ está suficientemente próximo a $(0, 0)$ então $\lim_{t \rightarrow \infty} B(t) = 0$ e $\lim_{t \rightarrow \infty} A(t) = 0$.

4 SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS, APLICADO AO PROBLEMA DA QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE

Nesta seção descrevemos brevemente alguns métodos estudados para a solução numérica de equações diferenciais.

4.1 MÉTODO DE EULER

O método de Euler para a solução de equações diferenciais ordinárias, criado por volta de 1768 (VALLE, 2012), é atualmente pouco usado na prática, mas a sua simplicidade é o fundamento para os métodos mais precisos (BURDEN R. L. ;FAIRES, 2003). Esse método se baseia na definição de derivada dada por:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Se considerarmos um erro de $-\frac{\varepsilon}{h}$ na aproximação do limite, podemos aproximar a derivada da seguinte forma:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\varepsilon}{h} \Rightarrow f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \varepsilon \quad (41)$$

Supondo ε suficientemente pequeno, x_0 e $y_0 = f(x_0)$ valores dados, podemos considerar que o ponto $f(x_0 + h)$ é bem aproximado por:

$$f(x_0 + h) = y_0 + hf'(x_0) \quad (42)$$

Observe que o erro está diretamente ligado ao tamanho do passo, na Figura 1 resolvemos numericamente o problema de valor inicial $f'(x) = f(x)$ no intervalo de 0 a 2 tal que $f(0) = 1$. Para passos menores os pontos estimados melhor se aproximam da solução (curva vermelha). Tal teste foi implementado em GeoGebra no arquivo *metododeEULER.ggb*¹.

¹Disponível em <http://www.4shared.com/folder/1jbgGEQm/GeoGebra.html>

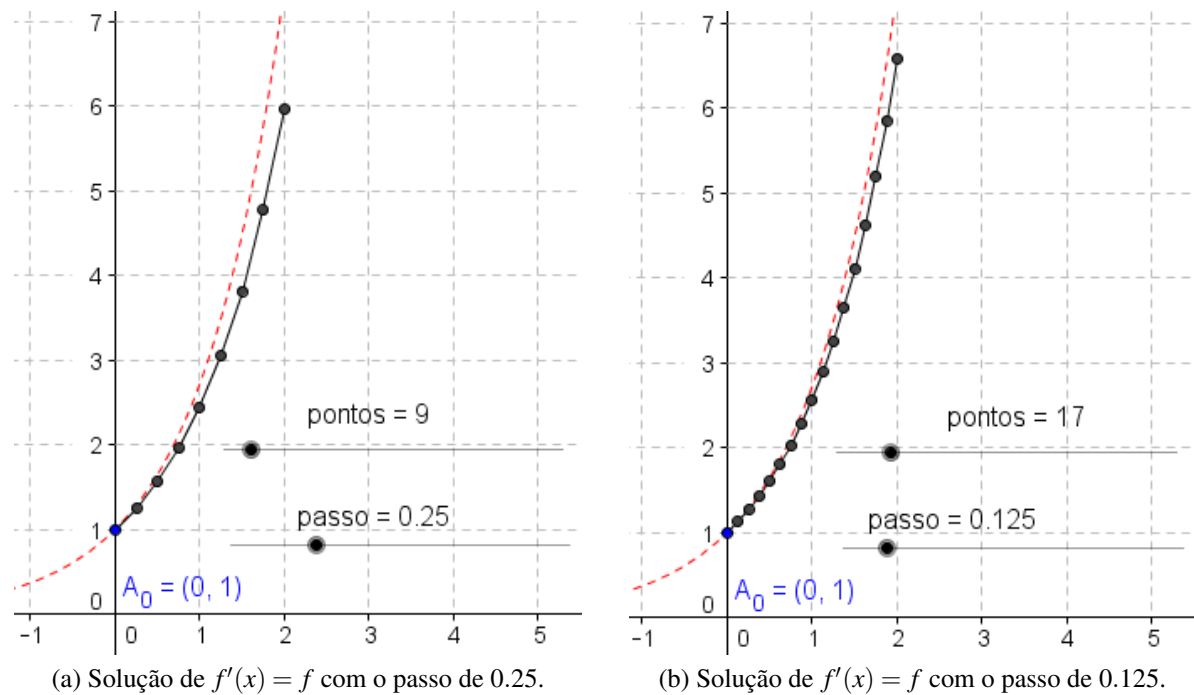


Figura 1: Método de Euler

4.2 MÉTODO DE TAYLOR

Podemos entender também o método de Euler, exposto acima, como uma aplicação da expansão em série de Taylor de grau um da função f em torno de x_0 . Temos que $f(x_0 + h) = y_0 + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(c)$ onde c é uma constante entre x_0 e $x_0 + h$. Considerando $\varepsilon = \frac{h^2}{2}f''(c)$ obtemos a fórmula de Euler (41).

Seja f de classe C^n , considere $f'(x) = g(x, y)$ onde $y = f(x)$, isso nos permite escrever:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \frac{df}{dx}(x_0) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2f}{dx^2}(x_0) + \frac{h^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3}(x_0) + \dots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^4f}{dx^4}(c)$$

$$f(x_0 + h) = y_0 + hg(y_0, x_0) + \frac{h^2}{2} \frac{dg}{dx}(y_0, x_0) + \frac{h^3}{3!} \frac{d^2g}{dx^2}(y_0, x_0) + \dots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} \frac{d^4f}{dx^4}(c) \quad (43)$$

Por exemplo, para $n = 2$ e $n = 3$, podemos calcular $\frac{dg}{dx}(x, y)$ e $\frac{d^2g}{dx^2}(x, y)$, pela regra da cadeia:

$$\frac{dg}{dx} = g_x + g_y y_x = g_x + g_y g \quad (45a)$$

$$\frac{d^2g}{dx^2} = (g_{xx} + g_{xy}g) + ((g_y g)_x + (g_y g)_y g) = g_{xx} + 2g_{xy}g + g_{xy} + g_{yy}g^2 + g_y^2 g^2 \quad (45b)$$

Como a função g é dada, a partir de (43), é possível obter aproximações para $f(x_0 + h)$ do

seguinte modo:

$$\text{Aproximação de grau 2: } f_2(x_0 + h) = f_0 + hg(y_0, x_0) + \frac{h^2}{2}(g_x + g_y g)(y_0, x_0) \quad (51a)$$

$$\begin{aligned} \text{Aproximação de grau 3: } f_3(x_0 + h) = f_0 + hg(y_0, x_0) + \frac{h^2}{2}(g_x + g_y g)(y_0, x_0) + \\ + \frac{h^3}{3!}(g_{xx} + 2g_{xy}g + g_{xy} + g_{yy}g^2 + g_y^2 g^2)(y_0, x_0) \end{aligned} \quad (51b)$$

O método teoricamente exibe a melhor aproximação para a equação diferencial, porém ele não é largamente utilizado devido ao custo computacional associado ao cálculo das derivadas (RUGGIERO M. A. G. ; LOPES, 1988).

4.3 MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

Carl David Runge (1856-1927) e M. Wilhelm Kutta (1867-1944), foram coautores do método chamado Runge-Kutta, o qual foi motivado pelos trabalhos em espectroscopia de Runge e aerodinâmica de Kutta. O método de Runge-Kutta se baseia na série de Taylor para a determinação dos seus coeficientes, por mais que normalmente não seja melhor do que a iteração em série de Taylor, esse método é usado em larga escala pois possibilita o mesmo grau de erro do que da série, com a vantagem da não necessidade do cálculo de derivadas (RUGGIERO M. A. G. ; LOPES, 1988). Seja g como definida na sessão anterior, o método de Runge-Kutta consiste em realizar várias avaliações nessa função, com o intuito de aproximar melhor o cálculo das derivadas calculadas no método de Taylor.

Em essência, desejamos obter pesos $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ e $k_1, k_2, k_3, \dots, k_n$ para melhor aproximar a expansão em polinômio de Taylor de grau n ,

$$f(x_0) + h(a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n) = f(x_0) + h \left(\frac{df}{dx}(x_0) + \frac{h}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) + \dots + \frac{h^{n-1}}{n!} \frac{d^n f}{dx^n}(x_0) \right)$$

Desse modo $f(x_0 + h)$ será calculado por:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h(a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3 + \dots + a_n k_n),$$

Para exemplificar a ideia do método calculamos as suas constantes para a aproximação de grau 2, ou seja:

$$\begin{aligned} f(x_0 + h) = f(x_0) + h(ak_1 + bk_2) = f(x_0) + h \left(\frac{df}{dx}(x_0) + \frac{h}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) \right) \\ = f(x_0) + hg(y_0, x_0) + \frac{h^2}{2}(g_x + g_y g)(y_0, x_0) \end{aligned} \quad (57)$$

Sejam α e β constantes, podemos considerar $k_1 = g(x_0, y_0)$ e $k_2 = g(x_0 + \alpha h, y_0 + \beta h k_1)$, expandindo k_2 com o seu polinômio de Taylor de ordem 1 centrado em (x_0, y_0) obtemos:

$$k_2 = g(x_0 + \alpha h, y_0 + h\beta k_1) = g(x_0, y_0) + \alpha h g_x(x_0, y_0) + h\beta k_1 g_y(x_0, y_0) \quad (58)$$

Logo por (57) e (58):

$$a_1 k_1 + a_2 k_2 = (a_1 + a_2)g(x_0, y_0) + a_2 h(\alpha g_x(x_0, y_0) + \beta k_1 g_y(x_0, y_0))$$

$$h(a_1 + a_2)g(x_0, y_0) + a_2 h(\alpha g_x(x_0, y_0) + \beta k_1 g_y(x_0, y_0)) = h \left(g(x_0, y_0) + \frac{h}{2}(g_x + g_y g)(x_0, y_0) \right)$$

Logo obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = 1 \\ a_2 \alpha = \frac{1}{2} \\ a_2 \beta = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (59)$$

Esse sistema admite infinitas soluções, uma delas é tomar $a = b = 1/2$ e $\alpha = \beta = 1$, obtendo:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \left(\frac{g(x_0, y_0) + g(x_0 + h, y_0 + hg(x_0, y_0))}{2} \right)$$

Esta aproximação é um exemplo do método de Runge-Kutta de ordem dois. De modo análogo é possível obter relações para os coeficientes de métodos de ordem superior, dentre eles, se destaca o de ordem 4, que é dado por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \text{ onde:}$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + h/2, y_n + k_1/2)$$

$$k_3 = hf(x_n + h/2, y_n + k_2/2)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

O método de Runge-Kutta de quarta ordem é o que melhor alia custo benefício (RUGGIERO M. A. G. ; LOPES, 1988), devido a esse fato nos baseamos nele para os testes que serão realizados.

4.4 IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO

Implementamos e utilizamos o método de Runge-Kutta de ordem 4 para a criação de duas rotinas dependentes: *AlcoolEstomago* e *AlcoolSange*. O objetivo é expressar numericamente, os valores das funções de álcool no estômago e álcool no sangue em pontos pré determinados e igualmente espaçados, a partir de diferentes formas de ingestão $I(t)$.

Para isso, devemos obter um vetor I , tal que I na posição k é a função da taxa de ingestão avaliada no ponto x_k com $k \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde n é o número de divisões do intervalo e $x_{k+1} - x_k = h$. A solução encontrada para essa questão foi o uso das variáveis simbólicas do MatLab, isso permite alterar facilmente a função e tempos de ingestão.

A sintaxe da rotina que realiza essa tarefa é $[X \ I] = \text{ingestao}(\text{intervalo}, \text{precisao}, \text{funcoes})$ onde as entradas são os intervalos das diferentes etapas de consumo, a precisão e um conjunto de células contendo as funções para cada intervalo².

A rotina *AlcoolEstomago*(X, I, k, y_0) tem como entradas $X =$ "Intervalo particionado", $I =$ "Vetor de ingestão em cada tempo da partição", $k =$ "Constante da equação do Estômago" e $y_0 =$ "Valor inicial da função do Estômago"². O retorno é um conjunto de aproximações da quantidade de álcool no estômago no intervalo determinado.

A rotina *AlcoolSangue*(X, Y_e, k, k_1, k_2, y_0) tem como entradas $X =$ "Intervalo particionado", $y_e =$ "Quantidade de álcool no estômago em cada tempo da partição", $k =$ "Constante associada a equação do Estômago", $k_1 =$ "Constante superior da fração do Álcool Sangue", $k_2 =$ "Constante inferior da fração do Álcool Sangue" e $y_0 =$ "Valor inicial da função do Sangue"². O retorno é um conjunto de pontos igualmente espaçados da função da quantidade de álcool no sangue aproximada.

Para exibição dos resultados criamos uma interface gráfica que exhibe as três funções simultaneamente: ingestão, quantidade de álcool no sangue e quantidade de álcool no estômago. Além disso possibilita, em tempo de execução, atribuir intervalos com funções associadas a eles e a alteração de parâmetros. As Figuras 2a e 2b representam a interface criada além de duas simulações³.

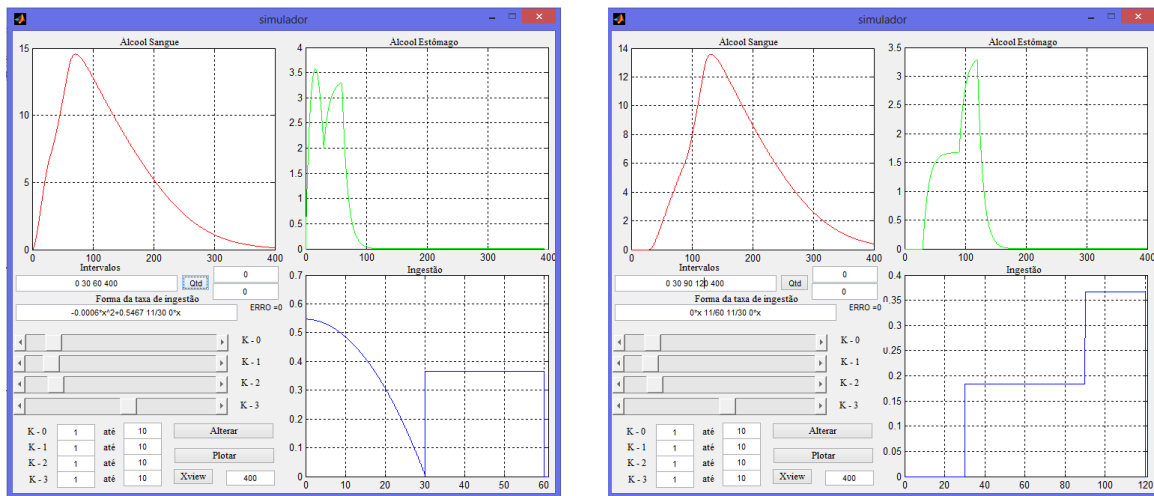
²Disponível em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

³Disponível em <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>.

Figura 2: Simulações

(a) Consumo de 22g durante 1h

(b) Consumo de 22g durante 1h com delay



4.5 ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS

Nesta sessão abordamos a questão da estimação dos parâmetros para o sistema de equações diferenciais estudado:

$$A'(t) = -k_0A(t) + I(t) \quad (61a)$$

$$B'(t) = k_1A(t) - \frac{k_2B(t)}{B(t) + k_3} \quad (61b)$$

Vamos usar alguns dados conhecidos sobre concentração de álcool no sangue. Consideramos as unidades padrões da seguinte forma: $A(t)$ e $B(t)$ como a quantidade de álcool no estômago e no sangue dada em gramas (g), a partir disso temos que $I(t)$ é dado em gramas por unidade de tempo (g/t), tanto k_0 quanto k_1 são expressos em um sobre unidade de tempo (t^{-1}), k_2 é dado em gramas por unidade de tempo (g/t) e k_3 em gramas (g).

Para fazer as comparações é necessário considerar o sistema descrito em termos de concentração de álcool no sangue. A partir de (PRÓ-SANGUE, 2012) dado a massa P em kg podemos estimar a quantidade de sangue, que em média representa 7% da massa corporal. Considerando a sua densidade de aproximadamente $1,054kg/l$ obtemos a quantidade de sangue em litros L que uma pessoa possui pela seguinte expressão $L = \frac{0.07P}{1.054}$.

Seja C_e e C_s as funções da concentração de álcool no estômago e no sangue

respectivamente. Como $C_e = A/L$ e $C_s = B/L$ então:

$$\begin{aligned}(C_e L)' &= -k_0(C_e L) + I(t) \\ C_e' &= k_0 C_e - \frac{I(t)}{L}\end{aligned}\quad (65)$$

$$\begin{aligned}(C_s L)' &= k_1 A - \frac{k_2(C_s L)}{(C_s L) + k_3} \\ C_s' &= \frac{k_1 A}{L} - \frac{k_2 C_s}{C_s L + k_3}\end{aligned}\quad (68)$$

$$C_s' = k_1 C_e - \frac{k_2 C_s}{C_s L + k_3}\quad (69)$$

De (LUDWIN, 2011) obtemos os seguintes dados:

tempo (Minutos)	0	10	20	30	45	80	90	110	170
Nível de álcool no sangue (g/l)	0	0.15	0.2	0.16	0.13	0.07	0.06	0.04	0.02

Tabela 2: Dados da concentração de álcool pelo tempo
Fonte: *BLOOD ÁLCOOL CONTENT*

A tabela se baseia no consumo de uma pessoa adulta com 75Kg que consumiu uma dose de 15 ml com 95% de álcool. Como a densidade do álcool é de aproximadamente 0.789g/ml então foi consumido aproximadamente 11.235g de álcool. O tempo e forma de consumo não foram descritos, mas é fornecida a concentração de álcool inicial no estômago de 0.245g/L.

4.5.1 MÉTODO ADOTADO PARA A ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PROPOSTO

Em (LUDWIN, 2011) se define a primeira equação de forma análoga a nossa, assim vamos considerar que a constante relativa à taxa de eliminação de álcool do estômago seja semelhante à obtida nesse trabalho ($k_0 = 0.10945 \text{min}^{-1}$). Como k_0 está associado a k_1 podemos considerar que $k_1 = \alpha k_0$ para algum $\alpha \in (0, 1)$. A partir de (GENTIL, 2007) é possível obter k_2 sabendo que sua interpretação é a quantidade de álcool eliminada por minuto. Nesta referência a taxa de eliminação é aproximadamente 0.1 gramas de álcool por quilograma por hora, fazendo a conversão, supondo uma pessoa de 75kg, obtemos $k_2 \approx 0, 125 \text{g/min}$.

Realizamos testes visuais com apoio da interface criada que exhibe a concentração de álcool no sangue e simultaneamente os dados da Tabela (2). Com a ajuda de controles deslizantes visualizamos dinamicamente o comportamento da concentração de álcool no

sangue, Figura 3, com o objetivo de determinar visualmente os parâmetros que melhor se ajustam aos dados. Esse simulador possibilita a alteração em tempo real dos parâmetros, a fácil alteração dos intervalos de integração e funções associadas a cada intervalo, exibe o erro da aproximação e possui um botão para alterar o plot do álcool no sangue para concentração e quantidade.

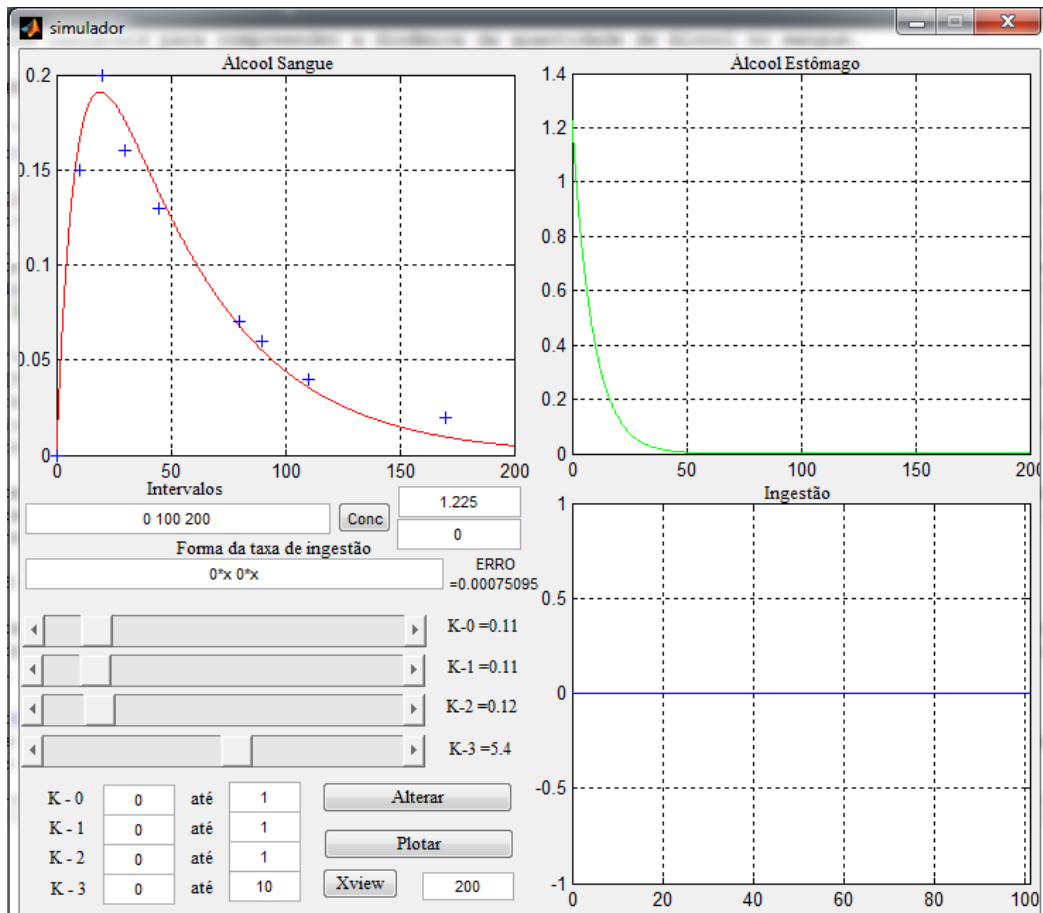


Figura 3: Simulador:Determinação dos parâmetros

Há vários métodos para encontrar as constantes, o procedimento adotado é o mais simples do ponto de vista teórico, portanto outras formas para a estimação de parâmetros serão abordadas em trabalhos futuros. A partir do procedimento adotado determinamos $k_0 = 0.10945$, $k_1 = 0.1$, $k_2 = 0.125$ e $k_3 = 5.45$ para as simulações.

4.6 TEMPO DE RECUPERAÇÃO

Das considerações feitas na seção (3.3), de que após interromper o consumo a quantidade de álcool no sangue decai e em certas condições tende a zero, é razoável supor que existe um tempo $t_{rec} \geq 0$ tal que, dado um valor δ para a quantidade de álcool no sangue, $B(t) \leq \delta$ para todo $t \geq t_{rec}$. A equação diferencial da quantidade de álcool no sangue não possui

solução analítica em termos de funções elementares, o que dificulta a obtenção do tempo de recuperação t_{rec} .

Como já foi observado anteriormente, com $A_T = \int_0^T e^{k_0 s} I(s) ds + a_0$, a função da quantidade de álcool no estômago pode ser escrita da seguinte forma:

$$A(t) = \begin{cases} \frac{1}{e^{k_0 t}} \left(\int_0^t e^{k_0 s} I(s) ds + a_0 \right), & \text{se } t < T \\ \frac{A_T}{e^{k_0 t}}, & \text{se } t \geq T \end{cases} \quad (70)$$

Dado $\varepsilon > 0$, se $A(T) \geq \varepsilon$, podemos obter por (70) o tempo t^* tal que $A(t) < \varepsilon$ para todo $t > t^*$, da seguinte forma:

$$\varepsilon = \frac{A_T}{e^{k_0 t^*}} \Rightarrow e^{k_0 t^*} \varepsilon = A_T$$

$$t^* = \frac{\ln \frac{A_T}{\varepsilon}}{k_0} \quad (71)$$

Note que se ε é suficientemente pequeno, como $A(t) < \varepsilon$ para $t > t^*$, a partir de t^* a quantidade de álcool que é passada do estômago para o sangue pode ser considerada desprezível. Dessa forma a variação da quantidade de álcool no sangue a partir de t^* pode ser modelada por:

$$B'(t) = -\frac{k_2 B}{B + k_3}. \quad (72)$$

A solução analítica da equação anterior pode ser obtida da seguinte forma:

$$B' = -\frac{k_2 B}{B + k_3}$$

$$B' \frac{B + k_3}{B} = -k_2$$

$$\int \frac{B + k_3}{B} dB = \int -k_2 dt$$

$$B + k_3 \ln B = -k_2 t + b \quad (74)$$

Para este modelo simplificado suponha $B(0) = B_m$, a quantidade de álcool no sangue no tempo t^* , dessa forma obtemos $b = B_m + k_3 \ln B_m$. Queremos determinar quanto tempo \bar{t} é necessário para que a quantidade de álcool no sangue esteja abaixo de um determinado valor δ . Considerando a equação (74), com $B(\bar{t}) = \delta$, obtemos:

$$\delta + k_3 \ln \delta = -k_2 \bar{t} + B_m + k_3 \ln B_m$$

$$\bar{t} = \frac{B_m - \delta + k_3 \ln \frac{B_m}{\delta}}{k_2} \quad (75)$$

Portanto o tempo de recuperação será dado por : $t_{rec} = t^* + \bar{t}$. Note que esta expressão depende diretamente de B_m , e este valor não pode ser determinado, em geral, de forma analítica. Para dar uma resposta à questão do tempo de recuperação realizamos alguns testes numéricos para estimar esse valor.

4.6.1 TESTES NUMÉRICOS

Os testes consistiram em analisar o tempo de recuperação, a partir da implementação do modelo descrita na seção (4.4), caso uma pessoa consuma constantemente quantidade determinada de álcool. As variáveis adotadas foram: a quantidade de álcool consumido e o tempo de consumo.

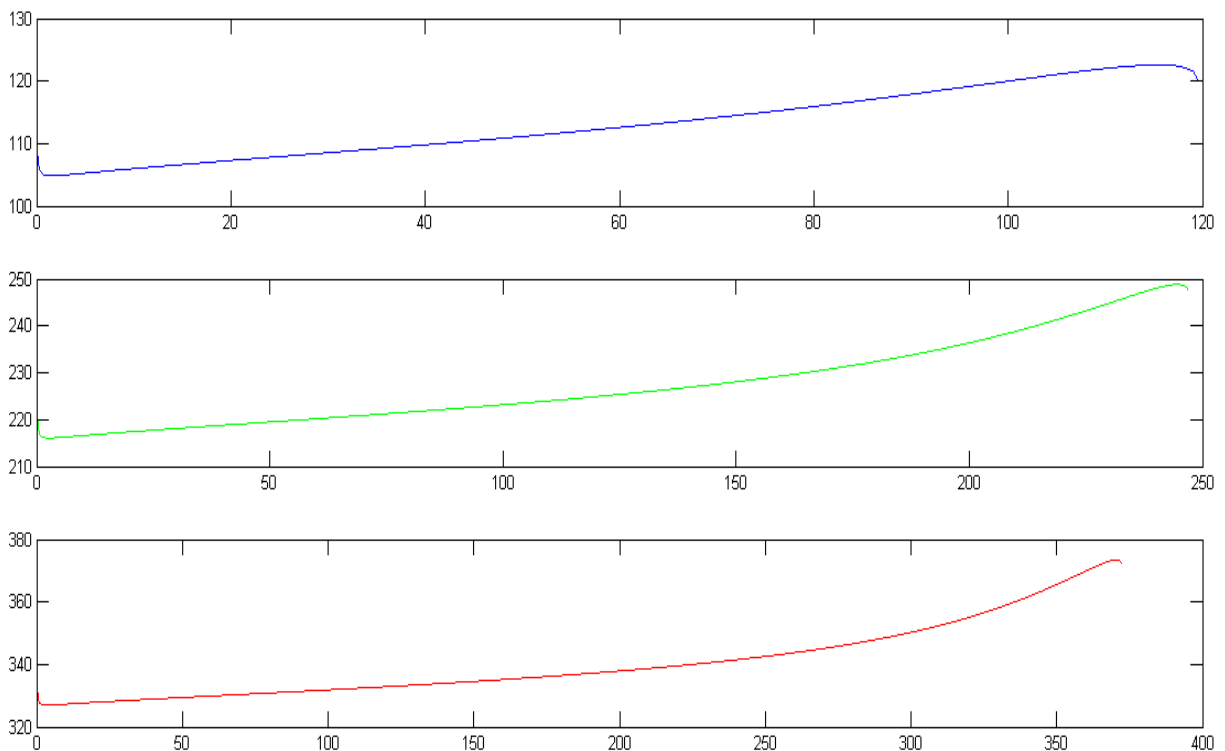


Figura 4: Tempos de recuperação em função do tempo de consumo.

A Figura 4 ilustra o tempo de recuperação no eixo das ordenadas pelo tempo de consumo no eixo das abscissas dados em minutos, as quantidades consumidas adotadas foram de 11.046g (azul), 22.092g (verde) e 33.138g (vermelho) de álcool, rotina implementada em *TempoDeRecuperacaoNUMERICO.m*⁴.

Os resultados numéricos sugerem que, para reduzir o tempo de recuperação, com taxa de consumo constante, é preciso consumir a quantidade de álcool estabelecida em um

⁴Arquivo disponível em <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>.

período curto de tempo. Note que quanto mais tempo gasto no consumo, maior será o tempo de recuperação, até o caso em que o tempo de consumo seja grande o suficiente, para que a taxa de eliminação seja maior do que a de ingestão. Nesse caso a quantidade de álcool no sangue não ultrapassa o limitante estabelecido $1g$, e portanto o tempo de recuperação é nulo $t_{rec} = 0$, pois não houve impacto. Os tempos de consumo ótimos, com precisão de $0.1min$ e tempo analisado de 0 à 500 minutos, está ilustrado na tabela (3).

Consumo	Tempo de consumo (T)	Tempo de recuperação (t_{rec})	Tempo (T) para $t_{rec} = 0$
11.046 g	1.5 min	104.8 min	119.6 min
22.092 g	2.8 min	216.1 min	247.0 min
33.138 g	4.0 min	327.0 min	372.2 min

Tabela 3: Resultados numéricos para o tempo de recuperação.

5 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA APLICADA À DETERMINAÇÃO DO IMPACTO

No modelo estudado consideramos a função $\int_0^\infty \max\{B(t) - L, 0\} dt$ para quantificar o impacto gerado. Como a estimação da função da quantidade de álcool no sangue $B(t)$ é numérica, vamos aplicar integração numérica para aproximar o valor do impacto.

Seja $f(x)$ uma função integrável no intervalo $[a, b]$. Os métodos de integração numérica estudados têm por objetivo aproximar $f(x)$ por outra função, com características que facilitem o cálculo da primitiva. A família de funções normalmente utilizada para essa aproximação é a polinomial, pois neste caso é simples calcular a primitiva além de possibilitar a interpolação de pontos de f . De forma geral, o objetivo é fornecer pesos de integração A_i e pontos associados x_i para o cálculo da integral (RUGGIERO M. A. G. ; LOPES, 1988), pela expressão:

$$\int_a^b f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \dots + A_{n-1} f(x_{n-1}) = \sum_{i=0}^{n-1} A_i f(x_i)$$

Desejamos interpolar $f(x)$ nos pontos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$ pertencentes a $[a, b]$ por um polinômio. Sejam os polinômios $l_0(x), l_1(x), l_2(x), \dots, l_{n-1}(x)$ definidos por:

$$l_i = \begin{cases} \prod_{w=1}^{n-1} \frac{x-x_w}{x_0-x_w}, & \text{Se } i = 0 \\ \prod_{w=0}^{n-2} \frac{x-x_w}{x_{n-1}-x_w}, & \text{Se } i = n-1 \\ \prod_{w=0}^{i-1} \frac{x-x_w}{x_i-x_w} \prod_{w=i+1}^{n-1} \frac{x-x_w}{x_i-x_w}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (76)$$

Observe que estes polinômios possuem as seguintes características:

- $l_i(x_i) = 1$,
- Se $w \neq i$ então $l_w(x_i) = 0$.

O polinômio $p_n(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + f(x_2)l_2(x) + \dots + f(x_{n-1})l_{n-1}(x)$ é chamado de polinômio interpolador de Lagrange de grau n . Temos que:

$$f(x) = p_n(x) + E(x) = \sum_{i=0}^{n-1} l_i(x) f(x_i) + E(x),$$

sendo que $E(x)$ é uma função de erro. Integrando obtemos:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n-1} l_i(x)f(x_i)dx + \int_a^b E(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx$$

Assim para aproximar a integral $\int_a^b f(x)dx$, consideramos os coeficientes A_i dados por:

$$A_i = \int_a^b l_i(x)$$

Suponha $x_0 = a$, $x_{n-1} = b$ e x_i valores igualmente espaçados h entre a e b , para $i \in 1, 2, 3, \dots, n-2$. Nestas condições os pesos A_i dependem apenas do tamanho do intervalo h . No caso em que o polinômio interpolador é de grau um teremos a regra dos trapézios, se for de grau dois a regra de Simpson. A partir dessas considerações criamos um algoritmo que retorna os pesos A_i a partir do número de pontos a serem interpolados. A rotina $[L] = \text{coeflagrange}(n)$ tem uma única entrada, que é o número de pontos a integrar menos um, e como saída um vetor L contendo os coeficientes A_i calculados.¹

5.1 INTERVALOS DE INTEGRAÇÃO

Observamos que a função a ser integrada $\max\{B(t) - L, 0\}$ possivelmente não será derivável em todos os pontos, essa característica compromete a integração numérica. Para contornar esse problema, dividimos o intervalo de integração nos pontos $d_1, d_2, d_3, \dots, d_n$ tal que:

- Se $B(d_i) - L = 0$ então $B(d_i - h) - L < 0$ e $B(d_i + h) - L > 0$.
- Se $B(d_i) - L > 0$ então $B(d_i - h) - L \leq 0$.
- Se $B(d_i) - L < 0$ então $B(d_i - h) - L \geq 0$.

Após essa divisão calculamos a integral dos intervalos $[d_i, d_{i+1}]$ tais que $B(d_i) - L \geq 0$.

Em resumo, a rotina que encontra os pontos em que a função da quantidade de álcool no sangue está acima do limitante gera um vetor booleano constando 1 na posição em que está acima e 0 caso contrário, a partir desse vetor gerado encontramos os pontos onde há a mudança de 0 para 1, encontrando as posições que cumprem as condições acima. Procedimento ilustrado na Figura 5. A rotina $\text{integralLagrangiana}(Xbuff, Ybuff, n)$ tem como entradas o intervalo de interesse $Xbuff$, os valores da função nesses pontos $Ybuff$, e o número máximo de pontos a

¹Disponível em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

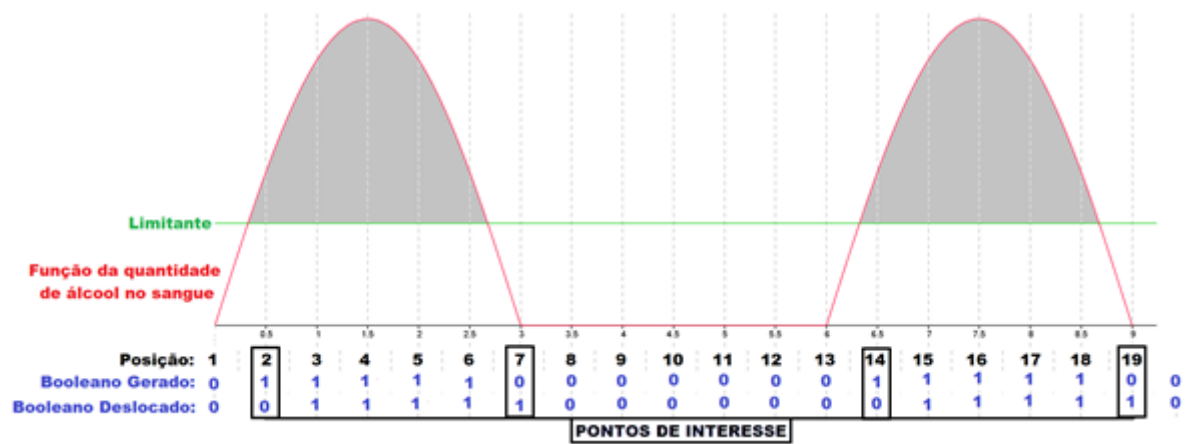


Figura 5: Ilustração do uso de variáveis booleanas para definição do intervalo.

ser utilizado na integral lagrangiana n . Programada também para nos finais de intervalos utilizar o grau de integração mais adequado.²

²Estas implementações estão disponíveis em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

6 ANÁLISE E SIMULAÇÕES PARA DIFERENTES FAMÍLIAS FUNÇÕES REPRESENTADAS PELA TAXA DE INGESTÃO

A seguir consideramos diferentes famílias de funções para a taxa de ingestão, afim, exponencial, periódico e quadrático, e queremos determinar a melhor forma de consumo em cada uma das situações, ou seja, encontrar em cada família de funções estudada uma função De ingestão possível que reduza o impacto. Dessa forma, para que uma função seja válida como taxa de ingestão as seguintes condições do problema devem ser satisfeitas:

$$\int_0^T I(x)dx = C \quad (78a)$$

$$\begin{cases} I(x) \geq 0 & \forall x \in [0, T] \\ I(x) = 0 & x > T \end{cases} \quad (78b)$$

Cada família foi descrita por um conjunto de parâmetros, e a partir das condições anteriores, determinamos uma região factível para estes parâmetros, de forma que a função correspondente satisfaça as condições estabelecidas. Posteriormente exploramos essa região, calculando numericamente o impacto em cada ponto, obtendo assim os parâmetros correspondentes ao menor impacto.

Para as implementações consideramos as constantes definidas em (4.5.1), além de fixar o consumo de $28ml$ de álcool durante 60 minutos o que equivale a 2 copos de $350ml$ com 4% de álcool, como a densidade do álcool é de $0.789g/ml$ o consumo será de $22.092g$. Usando os códigos criados para a resolução numérica do sistema de equações diferenciais e para o cálculo do impacto, é possível simular a influência de cada tipo de ingestão com o uso de uma rotina que conta com a seguinte sintaxe:

`X I = ingestao(intervalo, precisao, funcoes);`

1. `Ye = AlcoolEstomago(X, I, k0, y0e);`
2. `Ys = AlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0e);`
3. `Ya = [Ya; Ys];`

4. soma = $\text{integralsup}(\text{ordem}, \text{linha}, X, Ys)$ ¹ ;

6.1 TAXA DE INGESTÃO AFIM

Sejam $a, b \in \mathbb{R}$, vamos analisar as funções de consumo da forma:

$$I(x) = ax + b \quad (81)$$

Queremos determinar as condições sobre a e b para que a restrição (78a) seja satisfeita:

$$\int_0^T (ax + b) dx = \left(\frac{ax^2}{2} + bx \right) \Big|_0^T = \frac{aT^2}{2} + bT = C$$

Portanto:

$$b = \frac{2C - aT^2}{2T}, \text{ ou} \quad (83a)$$

$$a = \frac{2C - 2bT}{T^2} \quad (83b)$$

Assim, se considerarmos b em função de a , substituindo (83a) em (81), obtemos:

$$I(x) = ax + \frac{2C - aT^2}{2T} \quad (86)$$

Se a restrição (78b) é verificada, temos em particular que $I(0) \geq 0$ e $I(T) \geq 0$, a partir de (86), obtemos:

$$\begin{cases} 0 + \frac{2C - aT^2}{2T} \geq 0 \Leftrightarrow 2C \geq aT^2 \Leftrightarrow a \leq \frac{2C}{T^2} \\ aT + \frac{2C - aT^2}{2T} \geq 0 \Leftrightarrow 2aT^2 + 2C - aT^2 \geq 0 \Leftrightarrow a \geq -\frac{2C}{T^2} \end{cases} \quad (87)$$

Portanto para que a função definida em (81) seja uma função de ingestão factível, ou seja, satisfaça as restrições em (78) é necessário e suficiente que $a \in \left[-\frac{2C}{T^2}, \frac{2C}{T^2}\right]$ e $b = \frac{2C - aT^2}{2T}$. A Figura 6 implementada em *TESTElinear.ggb*, ilustra possíveis funções lineares para a taxa de ingestão, geradas dinamicamente pelo software.²

O impacto para os diferentes valores possíveis para a constante a está ilustrado na Figura 7, e implementados em *backboxlinear.m*³.

¹Rotina que retorna a integração numérica de ordem determinada acima do valor linha da função Ys

²Disponível em <http://www.4shared.com/folder/1jbgGEQm/GeoGebra.html>

³Disponíveis em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

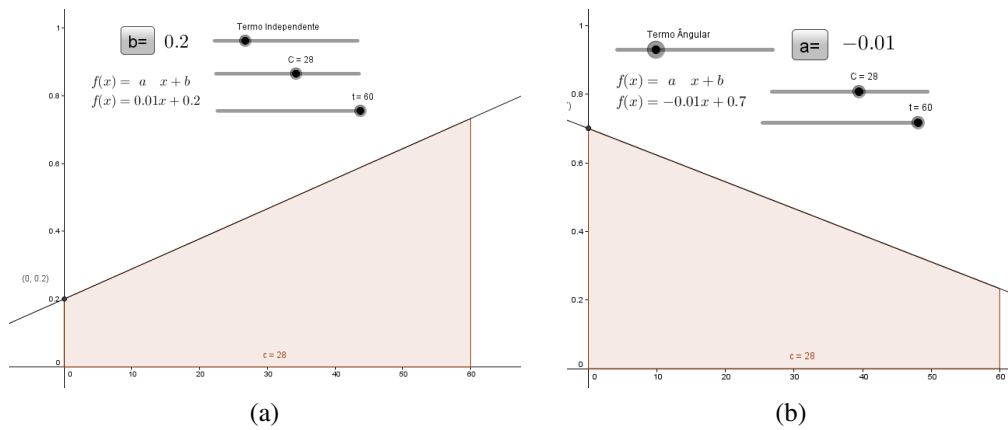


Figura 6: Parâmetros válidos do teste afim

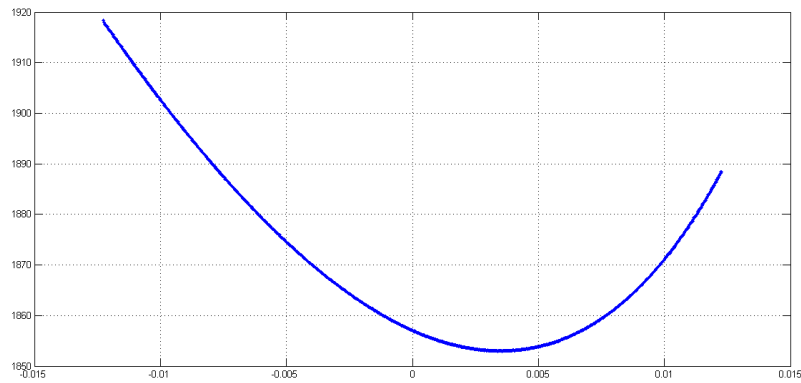


Figura 7: Impacto para funções de ingestão do tipo $I(x)=ax+b$ como função de a

A partir do resultado exposto na Figura 7, em que está representado a inclinação da reta no eixo das abscissas e o impacto no eixo das ordenadas, podemos inferir que nessa forma de consumo a política de ingestão que minimiza o impacto negativo corresponde a $a = 0.0035$, e portanto, $I(x) = 0.0035x + 0.236$ com o impacto de 1852,9 unidades. Isso sugere que o consumo deve ser aproximadamente constante e levemente crescente.

6.2 TAXA DE INGESTÃO EXPONENCIAL

Vamos considerar agora a seguinte família de funções:

$$I(x) = a(e^{bx} + k) \tag{88}$$

Note que se $b = 0$ ou $a = 0$ temos um caso particular do consumo afim, logo vamos supor $b, a \neq 0$.

Para que a restrição (78a) seja satisfeita, temos:

$$\int_0^T (ae^{bx} + ak) dx = \frac{a}{b}e^{bT} - \frac{a}{b} + akT = C \quad (89)$$

A igualdade (89) nos permite expressar k em função de a e b , da seguinte forma:

$$k = \frac{a + bC - ae^{bT}}{abT}$$

Portanto:

$$I(x) = a(e^{bx} + k) = ae^{bx} + \frac{a + bC - ae^{bT}}{bT} \quad (90)$$

Vamos obter a região em \mathbb{R}^2 para as variáveis independentes a e b que valida a restrição (78b). Observe que a função $I(x)$ é estritamente crescente ou decrescente, portanto basta verificar que $I(0) \geq 0$ e $I(T) \geq 0$, para satisfazer (78b), dessa forma:

$$I(0) = ae^{b0} + \frac{a + bC - ae^{bT}}{bT} = \frac{abT + a + bC - ae^{bT}}{bT} \geq 0 \quad (93)$$

$$I(T) = ae^{bT} + \frac{a + bC - ae^{bT}}{bT} = \frac{abTe^{bT} + a + bC - ae^{bT}}{bT} \geq 0 \quad (94)$$

A partir de (93) e (94), para $b < 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} abT + a + bC - ae^{bT} \leq 0 &\Rightarrow a(bT + 1 - e^{bT}) \leq -bC \\ abTe^{bT} + a + bC - ae^{bT} \leq 0 &\Rightarrow a(bTe^{bT} + 1 - e^{bT}) \leq -bC \end{aligned}$$

Para $b > 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} abT + a + bC - ae^{bT} \geq 0 &\Rightarrow a(bT + 1 - e^{bT}) \geq -bC \\ abTe^{bT} + a + bC - ae^{bT} \geq 0 &\Rightarrow a(bTe^{bT} + 1 - e^{bT}) \geq -bC \end{aligned}$$

Para concluir a análise dessas desigualdades, defina $f_1(b) = bT + 1 - e^{bT}$, portanto $f_1'(b) = T - Te^{bT}$. Como $f_1(0) = 0$, $f_1'(b) > 0$ para $b < 0$ e $f_1'(b) < 0$ para $b > 0$, logo $f_1(b) < 0$ para todo $b \neq 0$. Do mesmo modo, defina $f_2(b) = bTe^{bT} + 1 - e^{bT}$, portanto $f_2'(b) = Te^{bT} + bT^2e^{bT} - Te^{bT} = bT^2e^{bT}$. Como $f_2(0) = 0$, $f_2'(b) < 0$ para $b < 0$ e $f_2'(b) > 0$ para $b > 0$, logo $f_2(b) > 0$ para todo $b \neq 0$. A partir dos comentários anteriores, as restrições para o conjunto de

soluções factíveis para $b < 0$ são:

$$a \geq \frac{-bC}{bT + 1 - e^{bT}} \quad (96a)$$

$$a \leq \frac{-bC}{bTe^{bT} + 1 - e^{bT}} \quad (96b)$$

Para $b > 0$ obtemos:

$$a \leq \frac{-bC}{bT + 1 - e^{bT}} \quad (96c)$$

$$a \geq \frac{-bC}{bTe^{bT} + 1 - e^{bT}} \quad (96d)$$

Portanto a função definida em (90) é uma função de ingestão factível com $a, b \in \mathbb{R} - \{0\}$ se:

- $b > 0$ e $a \in \left[\frac{-bC}{bTe^{bT} + 1 - e^{bT}}, 0 \right) \cup \left(0, \frac{-bC}{bT + 1 - e^{bT}} \right]$,
- $b < 0$ então $a \in \left[\frac{-bC}{bT + 1 - e^{bT}}, 0 \right) \cup \left(0, \frac{-bC}{bTe^{bT} + 1 - e^{bT}} \right]$.

Exemplos de taxas de ingestões possíveis estão ilustrados na Figura 8, obtidas dinamicamente pela implementação em GeoGebra no arquivo *TESTE2exponencial.ggb*⁴.

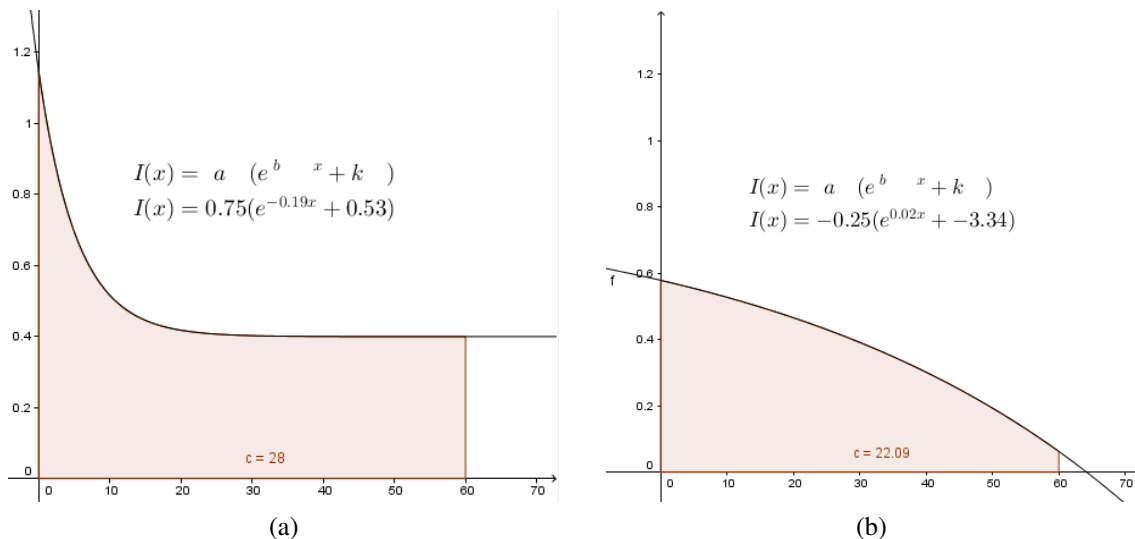


Figura 8: Ilustração de funções factíveis.

A análise dessa família de função foi restrita à região $[-1, 0.05]$ para a constante b e de $[-1, 4]$ para a constante a , sendo calculados os impactos apenas na região válida calculada anteriormente, como ilustram as Figura 8 e 9 em que o eixo das abscissas são os valores para a constante a e o eixo das ordenadas os valores para a constante b , sendo que a região branca representa os valores para a e b que tornam a função taxa de ingestão possível.

⁴Disponível em <http://www.4shared.com/folder/1jbgGEQm/GeoGebra.html>

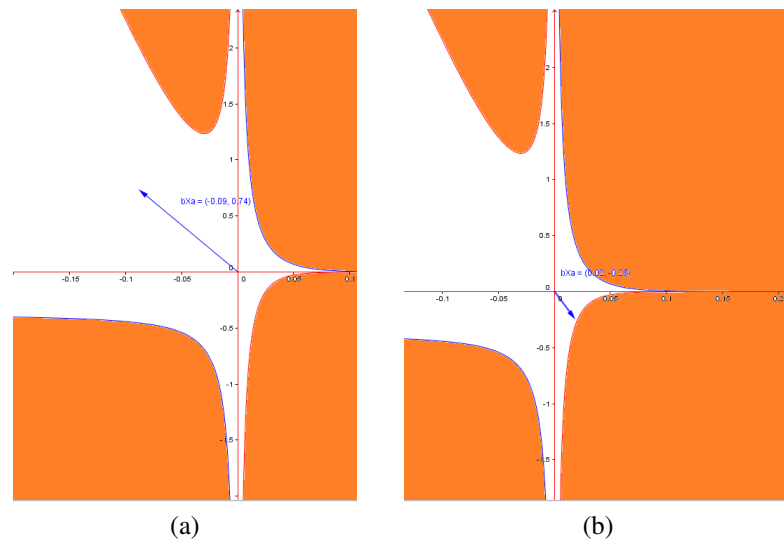


Figura 9: Ilustração da região factível.

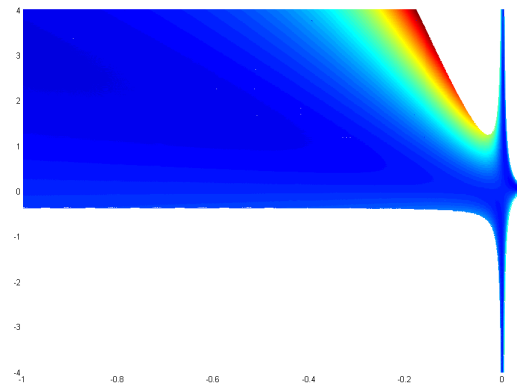


Figura 10: Impacto do consumo exponencial.

Na Figura 10 as cores próximas do azul escuro representam menores impactos, as cores próximas do vermelho maiores impactos e em branco pontos fora da região factível. A região resultante é ilimitada, portanto não é possível realizar uma exploração completa dela, no entanto observe que há regiões de baixo impacto para $b < -0.2$ e $a > 0$, e para valores de b próximos a 0. Nesse caso o resultado obtido é similar ao obtido para taxa de ingestão linear, onde o melhor tipo de consumo é consumir gradativamente mais durante o tempo. No primeiro caso de consumo teremos como menor impacto um grande consumo no início, e logo após uma taxa de consumo próxima a constante.

6.3 TAXA DE INGESTÃO PERIÓDICA

Vamos considerar agora um consumo periódico dado por:

$$I(x) = a(\cos(bx + d) + k) \quad (105)$$

Note que se $a = 0$ ou $b = 0$ então $I(x)$ é uma função constante portanto vamos considerar $a, b \neq 0$. Para verificar que $I(x) > 0$ para $x \in [0, T]$ basta tomar $a > 0$ e $k \geq 1$ ou $a < 0$ e $k \leq -1$. Suponha $a > 0$, $k \geq 1$, $a_1 = -a$ e $k_1 = -k$, observe que $a(\cos(bx + d)) = a_1(\cos(bx + d + \pi) + k_1)$ portanto sem perda de generalidade vamos supor $a > 0$ e $k \geq 1$. A partir da restrição (78a) obtemos:

$$\int_0^T (a \cos(bx + d) + ak) dx = \frac{a}{b} \text{sen}(bT + d) + akT - \frac{a}{b} \text{sen}(d) = C \quad (106)$$

Podemos escrever a em termos das outras variáveis da seguinte forma:

$$a = \frac{bC}{\text{sen}(bT + d) + kbT - \text{sen}(d)}, \quad (107)$$

logo:

$$I(x) = \frac{bC}{\text{sen}(bT + d) + kbT - \text{sen}(d)} (\cos(bx + d) + k). \quad (108)$$

Este tipo de função (108) está implementado dinamicamente no arquivo *TESTEperiodica.ggb*⁵ e ilustrada na Figura 11.

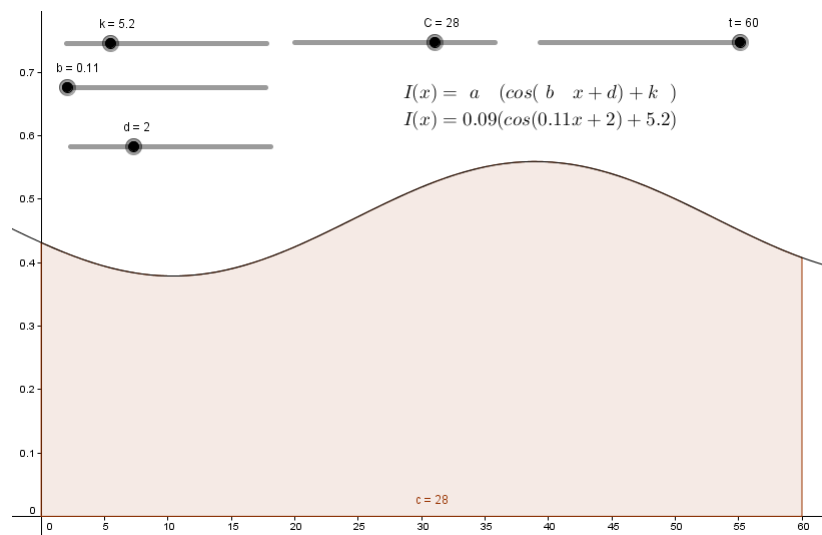


Figura 11: Parâmetros válidos do teste periódico

Foram realizadas simulações para a minimização do impacto nesse tipo ingestão, para os valores de $d = 0, \pi/2, \pi$ e $3\pi/2$, valores para $k \in [1, 10]$ e para $b \in [-2\pi, 2\pi]$, implementado

⁵Disponível em <http://www.4shared.com/folder/1jbgGEQm/GeoGebra.html>

no código *backboxperiodica.m*⁶.

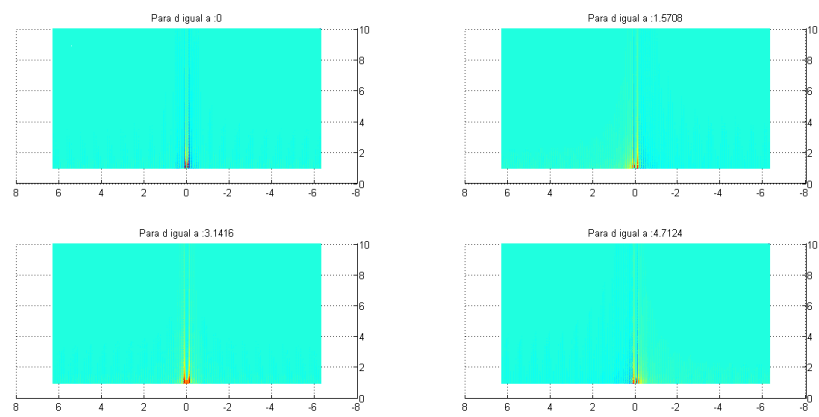


Figura 12: Resultados do teste periódico

⁶Disponíveis em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

A Figura 12 expressa no eixo das abscissas os valores dados para b , no eixo das ordenadas os valores dados para k , em vermelho os piores impactos, azul os melhores, e verde os impactos próximos ao linea. Essa Figura sugere que os melhores e piores resultados são obtidos quando $k = 1$ e b é próximo de zero. Observe que $\lim_{k \rightarrow \infty} I(x) = \frac{C}{T}$, de fato, utilizado a regra de L'Hôpital e que $|\cos(bx + d)| \leq 1$ obtemos:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} I(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{bC}{\sin(bT + d) + kbT - \sin(d)} (\cos(bx + d) + k) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{bC}{bT} = \frac{C}{T} \quad (109)$$

A partir do resultado anterior (109) e da Figura 12 podemos inferir que quanto maior o valor para o parâmetro k , mais nos aproximamos do caso constante.

6.4 TAXA DE INGESTÃO QUADRÁTICA

Considere a função de ingestão:

$$I(x) = ax^2 + bx + k \quad (110)$$

Para que a restrição (78a) seja satisfeita, temos:

$$\int_0^T (ax^2 + bx + k) dx = C \Rightarrow \frac{aT^3}{3} + \frac{bT^2}{2} + kT = C \quad (111)$$

Deixamos a variável k em função de a e b :

$$k = \frac{6C - 3bT^2 - 2aT^3}{6T}, \quad (112)$$

Portanto a função de ingestão do tipo quadrático que cumpre a restrição (78a) é dada por:

$$I(x) = ax^2 + bx + \frac{6C - 3bT^2 - 2aT^3}{6T}$$

Para verificar que $I(x) > 0$ com $x \in [0, T]$, é suficiente que três condições sejam satisfeitas:

I- $I(0) > 0$:

$$\frac{6C - 3bT^2 - 2aT^3}{6T} \geq 0 \quad (115a)$$

II- $I(T) > 0$:

$$aT^2 + bT + \frac{6C - 3bT^2 - 2aT^3}{6T} \geq 0 \quad (115b)$$

III- Se a abscissa do vértice da função pertence ao intervalo $[0, T]$, ou seja $-\frac{b}{2a} \in [0, T]$ então

devemos ter que a ordenada do vértice seja positiva:

$$\frac{-b^2 + 4ak}{4a} \geq 0 \quad (115c)$$

Com base na condição I obtemos:

$$6C - 3bT^2 - 2aT^3 \geq 0 \Rightarrow b \leq -\frac{2aT}{3} + \frac{2C}{T^2} \quad (119)$$

Pela condição II:

$$6aT^3 + 6bT^2 + (6C - 3bT^2 - 2aT^3) \geq 0 \Rightarrow b \geq -\frac{4aT}{3} - \frac{2C}{T^2} \quad (120)$$

Para $a < 0$, temos que a função $I(x)$ será crescente até o vértice e decrescente logo após, portanto bastam I e II para garantir III.

Se $a > 0$ e o vértice não pertence ao intervalo $[0, T]$ então a função $I(x)$ é estritamente monótona nesse intervalo, portanto I e II são suficientes para garantir $I(x) \geq 0$ para todo $x \in [0, T]$. Isso acontece se, e somente se:

$$\frac{-b}{2a} \leq 0 \Leftrightarrow b \geq 0, \quad (122a)$$

$$\frac{-b}{2a} \geq T \Leftrightarrow b \leq -2aT \quad (122b)$$

Seja $(a, b) \in \mathbb{R}^2$, definimos as retas $r_1 : b = -\frac{2aT}{3} + \frac{2C}{T^2}$, $r_2 : b = -\frac{4aT}{3} - \frac{2C}{T^2}$ e $r_3 : b = -2aT$. Pelos comentários anteriores em cada um dos seguintes casos obtemos uma função de ingestão válida:

- Se $a < 0$ e b está entre r_1 e r_2 .
- Se $a > 0$ e $b > 0$ com b abaixo de r_1 .
- Se $a > 0$ e $b < 0$ com b acima de r_2 e abaixo de r_3 .

Esse tipo de região está ilustrada em 13, sendo o eixo das abscissas representa os valores possíveis para a , o eixo das ordenadas os valores possíveis para b e em verde a região em que as constantes a e b tornam a taxa de ingestão possível.

Na região onde a restrição III deve ser considerada devemos garantir que a ordenada do vértice seja positiva, $\frac{-b^2 + 4ak}{4a} \geq 0$ quando $x \in [0, T]$, como nessa região $a > 0$ basta que

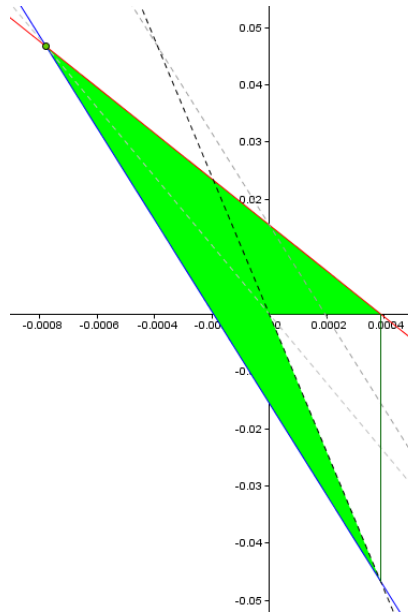


Figura 13: Região factível parcial do consumo polinomial de grau dois

$f(a,b) = -b^2 + 4ak \geq 0$. Substituindo k em $f(a,b)$ a partir de (112) obtemos:

$$f(a,b) = -b^2 + 4a \left(\frac{6C - 3bT^2 - 2aT^3}{6T} \right) = -b^2 + \frac{4aC}{T} - 2abT - \frac{4a^2T^2}{3} \quad (127)$$

Vamos mostrar que as retas r_1 e r_2 são tangentes a curva $f(a,b) = 0$ nos pontos $(\frac{3C}{T^3}, 0)$ e $(\frac{3C}{T^3}, -\frac{6C}{T^2})$ respectivamente. Uma substituição direta mostra que esses pontos pertencem à curva e à reta correspondente. Vamos analisar as retas tangentes da curva nesses pontos. Derivando implicitamente a equação $f(a,b) = 0$ (b como função de a) obtemos :

$$\begin{aligned} \frac{d(f(a,b))}{da} &= 0 \\ -2b \frac{db}{da} + \frac{4C}{T} - 2t \left(b + a \frac{db}{da} \right) - \frac{8aT^2}{3} &= 0 \\ \frac{db}{da} (-2b - 2aT) &= \frac{8aT^3 - 12C + 6bT^2}{3T} \\ \frac{db}{da} &= \frac{8aT^3 - 12C + 6bT^2}{-6bT - 6aT^2} \\ \frac{db}{da} &= \frac{4aT^3 - 6C + 3bT^2}{-3bT - 3aT^2} \end{aligned} \quad (129)$$

Para provar tangência da reta r_1 basta que $\frac{db}{da} = -\frac{2T}{3}$ no ponto $(\frac{3C}{T^3}, 0)$:

$$\frac{db}{da} = \frac{4aT^3 - 6C + 3bT^2}{-3bT - 3aT^2} = \frac{4\frac{3C}{T^3}T^3 - 6C + 3T^2 \cdot 0}{-3T \cdot 0 - 3\frac{3C}{T^3}T^2} = -\frac{6CT}{9C} = -\frac{2T}{3}$$

Para provar a tangencia de r_2 basta que $\frac{db}{da} = -\frac{4T}{3}$ no ponto $(\frac{3C}{T^3}, \frac{-6C}{T^2})$ como segue:

$$\frac{db}{da} = \frac{4aT^3 - 6C + 3bT^2}{-3bT - 3aT^2} = \frac{4\frac{3C}{T^3}T^3 - 6C + 3\frac{-6C}{T^2}T^2}{-3\frac{-6C}{T^2}T - 3\frac{3C}{T^3}T^2} = -\frac{12CT}{9C} = -\frac{4T}{3}$$

É fácil ver também, a partir de substituições, que:

- r_3 e $f(a, b) = 0$ se interceptam em $(0, 0)$ e $(\frac{3C}{T^3}, \frac{-6C}{T^2})$;
- r_1 e r_2 se interceptam em $(-\frac{6C}{T^3}, \frac{6C}{T^2})$.

Da análise anterior, podemos concluir que a região factível é o triângulo definido pelos pontos $(-\frac{6C}{T^3}, -\frac{6C}{T^2}), (\frac{3C}{T^3}, 0)$ e $(\frac{3C}{T^3}, \frac{-6C}{T^2})$ união com a região $f(a, b) \geq 0$. Um exemplo dessa região está ilustrada na Figura 14, a qual pode ser manipulada em *TESTEpolinomio.ggb*⁷,

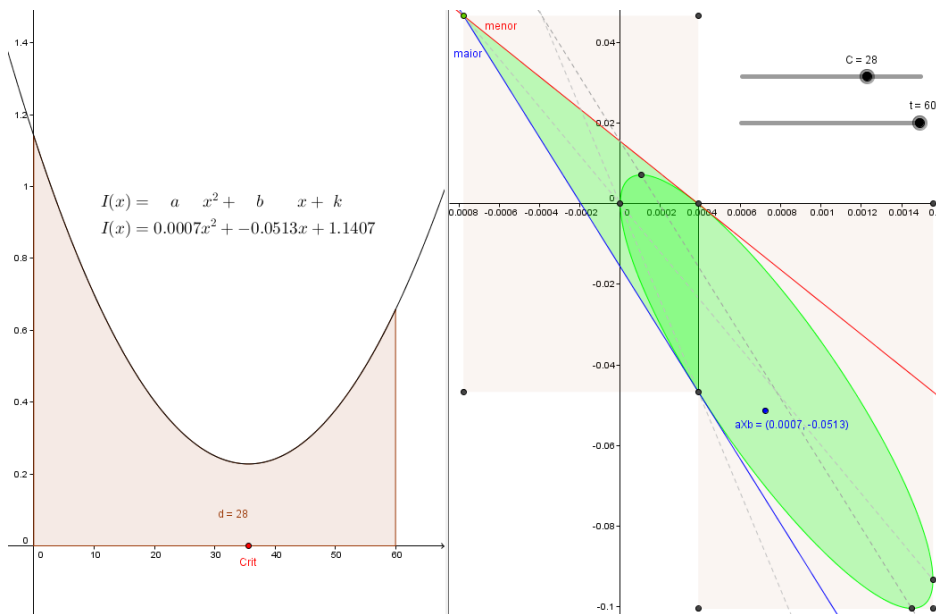


Figura 14: Região factível para o teste quadrático.

Os testes foram realizados em uma região retangular que engloba toda a região factível ilustrado na Figura 15, sendo o eixo das abscissas os valores para a , ordenadas os valores para b , azul escuro os menores impactos, verde impactos médios e vermelho maiores impactos. Os valores para os coeficientes que geram os maiores impactos estão representados em vermelho, os menores impactos em azul escuro e os não calculados em branco a partir da rotina *blackboxpolinomio.m*⁸.

⁷Disponível em <http://www.4shared.com/folder/1jbgGEQm/GeoGebra.html>

⁸Disponíveis em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

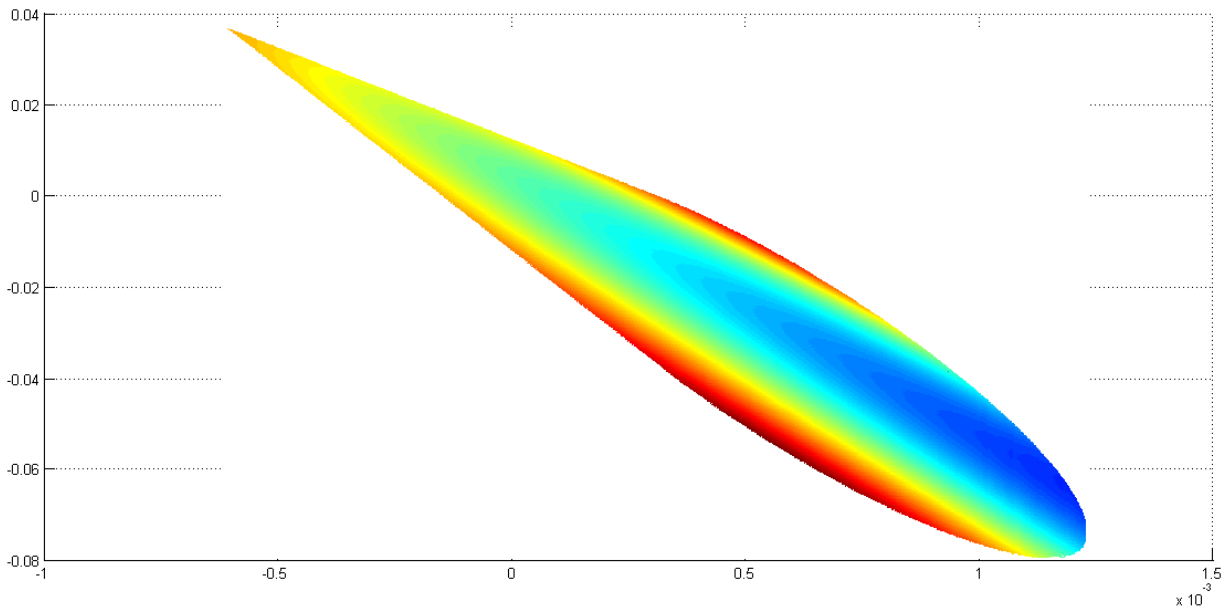


Figura 15: Impacto do teste quadrático.

Essa região aponta para um tipo de consumo diferente do sugerido nos testes anteriores. Nesse teste o ponto $(0.0012, -0.0633)$ gera o menor impacto, o que corresponde à uma função quadrática cujo vértice é tangente ao eixo horizontal, com a função sendo inicialmente decrescente e posteriormente crescente.

6.5 CONCLUSÕES

Nessa seção vamos comparar os resultados obtidos com o objetivo de analisar quais características estão associadas às formas de consumo que minimizam e maximizam o impacto, além de observar dentre as formas estudadas qual o consumo que tem menor impacto negativo. Para isso foram elaboradas rotinas ⁹ cujo objetivo é encontrar a posição dos valores mínimos e máximos em qualquer *array* de dados de dimensão arbitrária. Na tabela (4), estão descritos as funções que geraram os melhores e piores impactos em cada caso de ingestão na região de parâmetros considerada, além do impacto correspondente ao caso constante.

Taxa de Ingestão	Função $I(x)$	Impacto min./max.	Fig.
Constante	$I(x) = 0.0000x + 0.3682$	1857.1	-
Afim	$I(x) = 0.0035x + 0.236$	1852.9	16a
	$I(x) = -0.0123x + 0.7364$	1918.3	17a
Exponencial	$I(x) = 0.0236(e^{0.05x} + 9.2682)$	1844.1	16b

⁹*findMIN(X)* e *findMAX(X)* disponíveis em: <http://www.4shared.com/folder/JOPGOeHU/MatLab.html>

	$I(x) = 4(e^{-0.1813x} + 0.0001)$	2032.9	17b
Periódica	$I(x) = 0.705(\cos(-0.0630x + 4.7124) + 1)$	1791.9	16c
	$I(x) = 0.4369(\cos(-0.0630x) + 1)$	1961.0	17c
Quadrática	$I(x) = 0.0012x^2 - 0.0633x + 0.8538$	1783.8	16d
	$I(x) = 0.000589x^2 - 0.0565x + 1.3567$	1975.9	17d

Tabela 4: Dados obtidos nas simulações do impacto

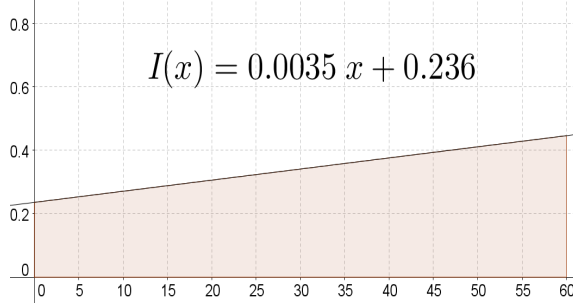
A primeira característica comum entre as melhores formas de consumo, ilustradas na Figura 16, é que o consumo não é constante, e mais ainda, a maior taxa de consumo está no final do período. Outra característica, é que a partir de algum instante, a taxa de ingestão é crescente até o final do período de consumo e a maior quantidade consumida (área sob a curva) se concentra na segunda metade do período. Em relação aos dois melhores resultados, consumo quadrático e periódico, note que praticamente não há consumo próximo à metade do intervalo, indicando que devem haver dois momentos de ingestão, consumo decrescente e crescente.

Note que entre os piores caso estudados, ilustrados na Figura 17, o que possui a menor concentração na parte inicial é o caso linear, e o que têm maior concentração o caso exponencial. Os impactos associados com estes consumos sugerem que quanto mais concentrado o consumo no início do intervalo pior o impacto.

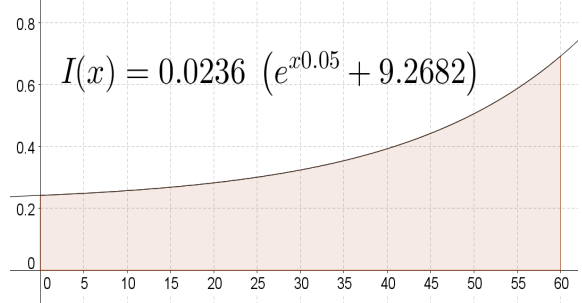
Os resultados obtidos fornecem um norte para analisar a melhor forma de consumo, dentre as funções estudadas. Entretanto, poderiam ser feitos refinamentos como: parâmetros mais precisos, uma maior exploração apenas na região onde está localizado o mínimo, entre outros com o objetivo de buscar melhores resultados.

Figura 16: Funções de ingestão que minimizam o impacto

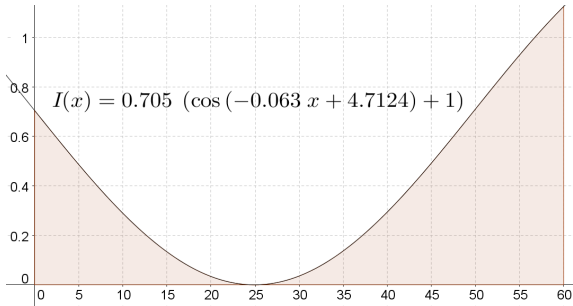
(a) Menor impacto linear



(b) Menor impacto exponencial



(c) Menor impacto periódica



(d) Menor impacto quadrática

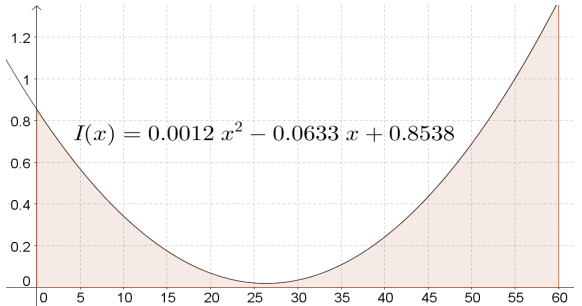
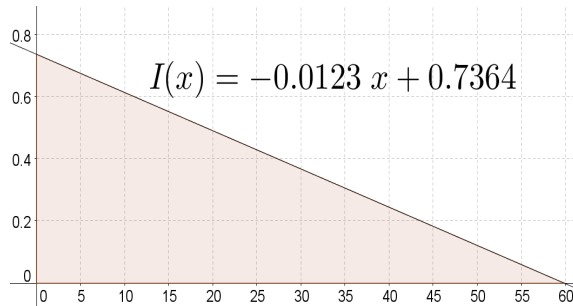
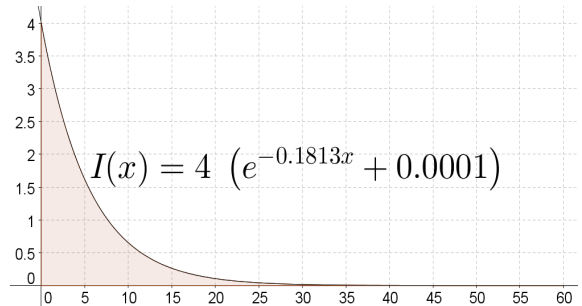


Figura 17: Funções de ingestão que maximizam o impacto

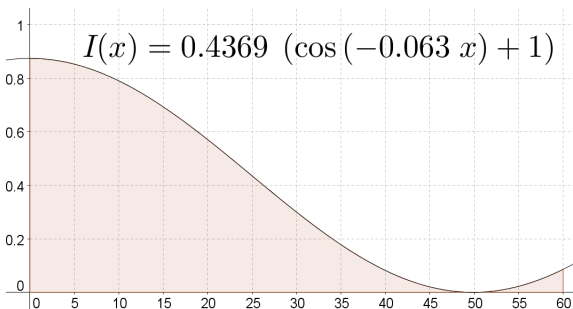
(a) Maior impacto linear



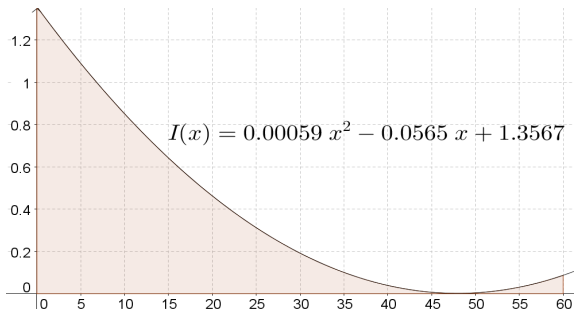
(b) Maior impacto exponencial



(c) Maior impacto periódica



(d) Maior impacto quadrática



7 COMENTÁRIO FINAIS

Nesse trabalho foi proposto e estudado um modelo baseado em equações diferenciais para um problema de controle ótimo associado ao consumo de álcool. O modelo proposto foi inspirado em estudos da cinética enzimática, e de trabalhos já elaborados sobre a modelagem matemática da quantidade de álcool no sangue.

Posteriormente estudamos e implementamos alguns métodos numéricos para a solução de equações diferenciais e integração numérica, em particular Runge-Kutta de ordem quatro e integração a partir dos polinômios interpoladores de Lagrange. Em paralelo, aplicamos vários conceitos e técnicas da teoria das equações diferenciais, para a análise do sistema adotado.

Usando técnicas básicas de integração e manipulações de desigualdades, foram determinadas regiões factíveis para os parâmetros de cada família de funções estudadas. A partir dos resultados, implementamos explorações numéricas dessa região, com o objetivo de determinar a melhor forma de consumo em cada caso. As explorações sugerem que a melhor forma de ingestão é *decrecente no início e crescente no final*, sendo o maior consumo no final do período.

Em futuros trabalhos poderíamos considerar uma abordagem analítica, com foco na teoria de controle ótimo. Também seria possível estender a abordagem numérica para outros tipos de consumo tais como: funções definidas por partes, descontínuas e impulsos.

Utilizamos o software GeoGebra na implementação rápida e dinâmica de situações onde era possível uma exploração analítica. Foi uma ferramenta fundamental para a compreensão da influência dos parâmetros no modelo. O software MatLab permitiu a implementação numérica de rotinas e simulações complexas, com melhor desempenho computacional. Foi essencial no avanço do trabalho, onde a abordagem analítica era insuficiente, por exemplo na solução da equação diferencial da quantidade de álcool no sangue.

As principais contribuições deste trabalho foram, além do impacto positivo na formação teórica/computacional do estudante, as considerações, do ponto de vista da biomatemática, do problema do consumo social de álcool, que pode ser estendido para o

consumo de outras substâncias potencialmente perigosas. Além disso, os códigos desenvolvidos poderão ser utilizados em problemas futuros.

Mesmo com algumas questões solucionadas, ainda é possível avançar em vários temas abordados nesse trabalho, com o objetivo de aperfeiçoar ou estudar outras questões levantadas. Como o estudo de modelos matemáticos mais complexos para estimar a quantidade de álcool no sangue, busca por métodos mais sofisticados para a determinação dos parâmetros, entre outros caminhos que permitam obter modelos cada vez mais realistas.

REFERÊNCIAS

- BURDEN R. L. ;FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. 8. ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003.
- FIGUEIREDO D. G.; NEVES, A. F. **Equações diferenciais aplicadas**. 3. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2008.
- FONTES, R. Enzimas e cinética enzimática. **Faculdade de Medicina do Porto**, v. 1, p. 1–32, 1996.
- GENTIL, P. **ALCOOL E ATIVIDADE FÍSICA**. 2007. http://www.gease.pro.br/artigo_visualizar.php?id=198".
- HECK, A. Modeling intake and clearance of alcohol in humans. **The Electronic Journal of Mathematics and Technology**, v. 1, p. 232–244, 2007.
- KOUBA S. J.;ELGINDI M. B. M.;LANGER, R. W. Exploring mathematical models for calculating blood alcohol concentration. **Forensic science international**, v. 171, p. 16–21, 2007.
- LUDWIN, C. Blood alcohol content. **Undergraduate Journal of Mathematical Modeling**, v. 3, 2011.
- MATIELO C.; FILHO, M. T. H. A. A. G. S. C. **O caminho do álcool**. 2012. <http://noticias.uol.com.br/saude/infograficos/2013/02/13/saiba-como-funciona-a-ressaca.htm#caminho-do-alcool>".
- MAZUCO, V. **Cinética enzimática**. 2014. "http://pt.wikipedia.org/wiki/Cin%C3%A9tica_enzim%C3%A1tica".
- PATON, A. **Alcohol in the body**. 2005. "http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC543875/".
- PATON, A. **O metabolismo do álcool**. 2005. "http://www.cisa.org.br/artigo/735/-metabolismo-alcool.php".
- PRÓ-SANGUE, F. ao. **Curiosidades**. 2012. <http://www.prosangue.sp.gov.br/artigos/curiosidades?Idioma=pt-BR>".
- RUGGIERO M. A. G. ; LOPES, V. L. R. **Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais**. 2. ed. São Paulo: PEARSON, 1988.
- SANTOS B. F.; SOUZA, J. D. N. M. L. A. **Bioquímica do álcool**. 2010. "http://biobiodoalcohol.blogspot.com.br/2010/12/o-caminho-do-alcool-no-organismo.html".
- VALLE, K. N. F. Métodos numéricos de euler e runge-kutta. **Universidade Federal de Minas gerais**, v. 1, p. 1–40, 2012.

8 ANEXOS

8.1 CÓDIGOS ESSENCIAIS

8.1.1 INGESTÃO

```

1 function [X I] = ingestao(intervalo, precisao, funcoes)
2 x = sym('x'); %define a variavel simbolica
3 X = [intervalo(1):precisao:intervalo(end)]; %Gera a malha X
4 I = X.*0; %Prealocacao
5 c = 1; %1/precisao*(a-intervalo1)+1
6 I(1) = subs(funcoes(1), intervalo(1)); %primeiro valor
7 for a=1:length(intervalo)-1 %intervalo a intervalo
8     ini = find(X==intervalo(a));
9     fim = find(X==intervalo(a+1));
10    Xbuff = X(ini+1:fim); %avalia a funcao
11    Vaux = subs(funcoes(a), Xbuff);
12    if sum(isnan(Vaux(1)))
13        fprintf('Valores nao numericos!');
14        pause();
15    end
16    if length(Vaux)==1 %funcao constante
17        Vaux = Vaux.*ones(1, length(Xbuff));
18    end
19    I(ini+1:fim) = Vaux;
20 end
21 end

```

8.1.2 QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO ESTÔMAGO

```

1 function Ye = AlcoolEstomago(X, I, k, y0)
2 Ye = zeros(1, length(X)); %Inicializa Ye para velocidade

```

```

3 h=X(2)-X(1); %intervalo
4 Ye(1)=y0;
5 for a=2:length(X)
6     I1 = I(a-1);
7     I2 = I(a);
8     Im = 0.5*(I1+I2); %aproximacao linear para Im
9     A = Ye(a-1);
10    %runge-kutta 4
11    m0 = -k*A+I1;%f(t,A)
12    m1 = -k*(A+0.5*h*m0)+Im;%f(t+h/2,A+h/2*m0)
13    m2 = -k*(A+0.5*h*m1)+Im;%f(t+h/2,A+h/2*m1)
14    m3 = -k*(A+h*m2)+I2;%f(t+h,A+h*m2)
15    Ye(a)=Ye(a-1)+h/6*(m0+2*m1+2*m2+m3);
16 end
17 end

```

8.1.3 QUANTIDADE DE ÁLCOOL NO SANGUE

```

1 function Ys = AlcoolSangue(X,Ye,k,k1,k2,y0)
2 Ys = zeros(1,length(X)); %Prealocacao para velocidade
3 h=X(2)-X(1); %intervalo
4 Ys(1)=y0;
5 for a=2:length(X) %RK4
6     %definicoes basicas
7     A1 = Ye(a-1);
8     A2 = Ye(a);
9     Am = 0.5*(A1+A2);
10    B = Ys(a-1);
11    m0 = k*A1-k1*B/(B+k2);%f(t,B)
12    m1 = k*Am-k1*(B+0.5*h*m0)/(B+0.5*h*m0+k2);%f(t+h/2,B+h/2*m0)
13    m2 = k*Am-k1*(B+0.5*h*m1)/(B+0.5*h*m1+k2);%f(t+h/2,B+h/2*m1)
14    m3 = k*A2-k1*(B+h*m2)/(B+h*m2+k2);%f(t+h,B+h*m2)
15    Ys(a)=Ys(a-1)+h/6*(m0+2*m1+2*m2+m3);
16 end
17 end

```

8.1.4 IMPACTO

```

1 function [L Pol] = coeflagrange(n)
2 %F = sym('F',n); %valores de f
3 L = [];
4 Pol = {};
5 for a=0:n
6     P = 1; %neutro mult polinomial
7     Pi = 1; %neutro mult
8     for b=0:a-1
9         P = conv(P,[1 -b]);
10        Pi = Pi*(a-b);
11    end
12    for b=a+1:n
13        P = conv(P,[1 -b]);
14        Pi = Pi*(a-b);
15    end
16
17    integ = polyint(P/Pi);
18
19    Pol = [Pol {P/Pi}];
20    L = [L polyval(integ,n)];
21 end
22 %sum(L)
23 end

```

```

1 function soma = integralLagrangiana(X,Y,ordem)
2 h = X(2)-X(1);
3 tamanho = length(X);
4 soma=0;
5 omax = 10;
6 if ordem == 0; %decidir a ordem
7     ordem = 1;
8     od2 = 0; %variavel auxiliar para restos
9     for a=2:omax
10        v = (tamanho-1)/a;
11        if v-fix(v)< eps % for multiplo
12            od2 = a;
13        else
14            od2 = tamanho-fix(v)*a;
15        end
16        if od2 >= ordem
17            ordem = a;

```

```

18         end
19     end
20 end
21
22     pontos = coeflagrange(ordem);
23     iter = fix((length(Y)-1)/ordem);
24
25     for a=1:iter
26         A = Y(1 + (ordem)*(a-1):1 + (ordem)*a);
27         soma = soma+sum(h.*pontos.*A);
28     end
29     d = length(Y)-(1+iter*(ordem));
30     if d>0
31         pontos = coeflagrange(d);
32         A = Y(length(Y)-d:length(Y));
33         soma = soma+sum(h.*pontos.*A);
34     end
35 end

```

```

1 function soma = integralsup(ordem,linha,X,Y)
2 neg = (Y-linha)>0; %acima e abaixo
3 neg1 = [0 neg]; %deslocamento
4 neg = [neg 0]; %igualar casas
5 result = find(neg~=neg1);%encontra inicios e fins
6 %% def internas
7 soma=0;
8 acess = 0;
9 pt1 = 0;
10 pt2 = 0;
11 for a=1:2:length(result)-1
12     acess = 0;
13     %seleciona apenas em cima da curva
14     Xbuff = X(result(a):result(a+1)-1);
15     Ybuff = Y(result(a):result(a+1)-1)-linha;
16     %checa se e possivel calcular o intervalo anterior a curva
17     if result(a)>1
18         x1 = X(result(a));
19         x2 = X(result(a)-1);
20         y1 = Y(result(a))-linha;
21         y2 = Y(result(a)-1)-linha;
22         pt1 = x1 -y1*(x1-x2)/(y1-y2); %1x metodo secante

```

```

23     acess = acess + abs(x1 - pt1)*y1/2;
24 end
25
26 %Calcular o intervalo posterior a curva
27 if result(a+1) ≤ length(Y) %caso final de pontos ou pontos perfeitos
28     x1 = X(result(a+1)-1);
29     x2 = X(result(a+1));
30     y1 = Y(result(a+1)-1)-linha;
31     y2 = Y(result(a+1))-linha;
32     pt2 = x1 -y1*(x1-x2)/(y1-y2); %1x metodo secante
33     acess = acess + abs(x1 - pt2)*y1/2;
34 end
35 soma = soma + acess;
36 if length(Xbuff)>1
37     soma = soma + integralLagrangiana(Xbuff,Ybuff,ordem);
38 end
39 end
40 end

```

8.2 CÓDIGOS TESTES

Código inicial em todos os casos:

```

1 %2 latas em 1 hora 350ml 4% vol 28ml de alcool
2 t = 60; %tempo de consumo
3 C = 22.092; %Consumo
4 contador = 1;
5
6 intervalo = [0 t 500];
7 precisao = 0.1;
8 y0e = 0;
9 y0s = 0;
10
11 k0 = 0.10945;
12 k1 = 0.1;
13 k2 = 0.125;
14 k3 = 5.45;
15
16 P = 75;
17 L = 0.07*P/1.054;
18

```



```

19 ordem = 1;
20 linha = 1;
21
22 Ya = [];
23 rsoma = [];

```

8.2.1 AFIM

```

1  %linear
2  ...
3  constante = (2*C)/(t^2);
4  espaco = linspace(-constante,constante,10000);
5  %constante = find(espaco==min(abs(espaco)),'last');
6  espaco = [0 espaco];
7  %espaco = [0 0.5 1];
8
9  clf
10 shg
11
12 for a=espaco
13     coefb = (2*C-a*t^2)/(2*t);
14     s = strcat(num2str(a),'*x+',num2str(coefb));
15     funcoes = {s};
16     funcoes = [funcoes {'0'}];
17     [X I] = ingestao(intervalo,precisao,funcoes);
18     Ye = AlcoolEstomago(X,I,k0,y0e);
19     Ys = AlcoolSangue(X,Ye,k1,k2,k3,y0s);
20     %Ys = ConcAlcoolSangue(X,Ye,k1,k2,k3,y0s,L);
21     Ya = [Ya;Ys];
22     soma = integralsup(ordem,linha,X,Ys);
23     rsoma = [rsoma soma];
24     if 0
25         subplot(2,2,1)
26         grid on
27         plot(X,I,'g')
28
29         subplot(2,2,2)
30         grid on
31         plot(X,Ys,'r')
32         subplot(2,2,3)
33         grid on

```

```

34     plot(X,Ye, 'b')
35     subplot(2,2,4)
36     hold on
37     grid on
38     plot(coefb,soma);
39     pause(0.000001);
40     contador = contador+1;
41     end
42 end
43 if 0
44     pause()
45     clf
46     plot(espaco,rsoma, '.')
47     grid on
48     shg
49 end

```

8.2.2 EXPONENCIAL

```

1  %exponencial
2  ...
3  constante1 = 1; %offset b
4  constante2 = 4; %offset a
5  espaco1 = linspace(-constante1,0.05,100); %associado a b
6  espaco2 = linspace(-constante2,constante2,100); % associado a a
7
8  f = find(espaco1==0);
9  if ~isempty(f)
10     espaco1(f)=[];
11 end
12 f = find(espaco2==0);
13 if ~isempty(f)
14     espaco2(f)=[];
15 end
16 rsoma = zeros(length(espaco1),length(espaco2));
17 clf
18 shg
19 tic
20 b1 = 1;
21 for b=espaco1
22     a1 = 1;

```

```

23     for a=espaco2
24         logic = (b>0 && (a ≤ (-b*C/(b*T+1-exp(b*T))) && a ≥ (-b*C/(b*T*exp(b*T)+1-exp(k
25         logic = logic || (b<0 && (a ≥ (-b*C/(b*T+1-exp(b*T))) && a ≤ (-b*C/(b*T*exp(b*T
26
27         coef = (a+b*C-a*exp(b*T))/(a*b*T);
28
29         if logic
30             s = strcat(num2str(a), '* (exp(', num2str(b), '*x) +', num2str(coef), ') ');
31             funcoes = {s};
32             funcoes = [funcoes {'0'}];
33
34             [X I] = ingestao(intervalo, precisao, funcoes);
35
36             Ye = AlcoolEstomago(X, I, k0, y0e);
37
38             Ys = AlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s);
39             %Ys = ConcAlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s, L);
40
41             soma = integralsup(ordem, linha, X, Ys);
42             rsoma(b1, a1) = soma;
43
44             if 0
45                 subplot(2,2,1)
46                 grid on
47                 plot(X, I, 'g')
48
49                 subplot(2,2,2)
50                 grid on
51                 plot(X, Ys, 'r')
52
53                 subplot(2,2,3)
54                 grid on
55                 plot(X, Ye, 'b')
56
57                 subplot(2,2,4)
58                 hold on
59                 grid on
60                 plot3(a, b, soma, '+');
61
62                 pause(0.000001);
63             end
64         end
65         a1=a1+1;

```

```

66     end
67     a1+(b1-1)*100-1
68     b1=b1+1;
69 end
70 toc
71 clf
72 buff = rsoma;
73 buff(buff==0) = 10000000000000000;
74 rsoma(rsoma==0) = min(min(buff))-0.01*min(min(buff));
75 mesh(meshgrid(espaco1)',meshgrid(espaco2),rsoma)
76 grid on
77 shg

```

8.2.3 PERIÓDICA

```

1  %periodica
2  ...
3  constante1 = 10; %offset k
4  constante2 = 2*pi; %offset b
5  ref = [90 500 4];
6
7  espacio1 = linspace(1,constante1,ref(1)); %asociado a k
8  espacio2 = linspace(-constante2,constante2,ref(2)); % asociado a b
9
10 espacio3 = [0 pi/2 pi 3*pi/2];
11
12 f = find(espaco2==0);
13 if ~isempty(f)
14     espaco2(f)=[];
15 end
16
17 rsoma = zeros(length(espaco1),length(espaco2),length(espaco3));
18
19 clf
20 shg
21 tic
22 kk1 = 1;
23 for k=espaco1
24     b1 = 1;
25     for b=espaco2
26         d1=1;

```

```

27     for d = espaco3
28         coef = b*C/(sin(b*T+d)+k*b*T-sin(d));
29
30         s = strcat(num2str(coef), '* (cos(', num2str(b), '*x+', num2str(d), ') + ', num2
31         %funcoes = {s};
32         funcoes = [{s} {'0'}];
33
34         [X I] = ingestao(intervalo, precisao, funcoes);
35
36         Ye = AlcoolEstomago(X, I, k0, y0e);
37
38         Ys = AlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s);
39         %Ys = ConcAlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s, L);
40
41         soma = integralsup(ordem, linha, X, Ys);
42         rsoma(kk1, b1, d1) = soma;
43
44         if 0
45             subplot(2,2,1)
46             grid on
47             plot(X, I, 'g')
48
49             subplot(2,2,2)
50             grid on
51             plot(X, Ys, 'r')
52
53             subplot(2,2,3)
54             grid on
55             plot(X, Ye, 'b')
56
57             subplot(2,2,4)
58             hold on
59             grid on
60             if d1==1
61                 plot3(k, b, soma, '+');
62             end
63
64             pause(0.000001);
65         end
66         d1=d1+1;
67     end
68     b1=b1+1;
69 end

```

```

70
71     d1+(b1-1)*ref(3)+(kk1-1)*ref(2)*ref(3)-1 %timeline
72
73     kk1=kk1+1;
74 end
75
76 toc
77
78 ma = max(max(max(rsoma)));
79
80 mi = min(min(min(rsoma)));
81
82 rsoma(length(espaco1),length(espaco2),1)=ma + 0.05*(ma-mi);
83 rsoma(length(espaco1),length(espaco2),2)=ma + 0.05*(ma-mi);
84 rsoma(length(espaco1),length(espaco2),3)=ma + 0.05*(ma-mi);
85 rsoma(length(espaco1),length(espaco2),4)=ma + 0.05*(ma-mi);
86
87 rsoma(length(espaco1),1,1)=mi - 0.05*(ma-mi);
88 rsoma(length(espaco1),1,2)=mi - 0.05*(ma-mi);
89 rsoma(length(espaco1),1,3)=mi - 0.05*(ma-mi);
90 rsoma(length(espaco1),1,4)=mi - 0.05*(ma-mi);
91
92 if 0
93     clf
94     subplot(2,2,1)
95     superplot(espaco1,espaco2,rsoma(:, :, 1)', [0 0 1]);
96     title(strcat('Para d igual a :', num2str(espaco3(1))));
97     grid on
98     subplot(2,2,2)
99     superplot(espaco1,espaco2,rsoma(:, :, 2)', [0 0 1]);
100    title(strcat('Para d igual a :', num2str(espaco3(2))));
101    grid on
102    subplot(2,2,3)
103    superplot(espaco1,espaco2,rsoma(:, :, 3)', [0 0 1]);
104    title(strcat('Para d igual a :', num2str(espaco3(3))));
105    grid on
106    subplot(2,2,4)
107    superplot(espaco1,espaco2,rsoma(:, :, 4)', [0 0 1]);
108    title(strcat('Para d igual a :', num2str(espaco3(4))));
109    grid on
110    shg
111 end

```

8.2.4 POLINOMIAL

```

1  constante1 = 1; %offset b
2  constante2 = 4; %offset a
3
4  ref = [800 800];
5
6  espaco1 = linspace(-6*C/T^3,12*C/T^3,ref(1)); %associado a a
7  espaco2 = linspace(2*C/T^2*(-3 - sqrt(12)),6*C/T^2,ref(2)); % associado a b
8
9  f = find(espaco1==0);
10 if ~isempty(f)
11     espaco1(f)=[];
12 end
13
14 f = find(espaco2==0);
15 if ~isempty(f)
16     espaco2(f)=[];
17 end
18
19 rsoma = zeros(length(espaco1),length(espaco2));
20
21 tic
22 a1 = 1;
23 for a=espaco1
24     b1 = 1;
25     tic
26     for b=espaco2
27         logic = (a ≤ 3*C/T^3 && b ≤ -2*a*T/3+2*C/T^2 && b ≥ -4*a*T/3-2*C/T^2);
28         logic = logic || (a > 3*C/T^3 && (-b^2+4*a*C/T-2*a*b*T-4*a^2*T^2/3) ≥ 0);
29
30         if logic
31             coef = (6*C-3*b*T^2-2*a*T^3)/(6*T);
32
33             s = strcat(num2str(a),'*x^2+',num2str(b),'*x+',num2str(coef));
34
35             funcoes = [{s} {'0'}];
36
37             [X I] = ingestao(intervalo,precisao,funcoes);
38
39             Ye = AlcoolEstomago(X,I,k0,y0e);
40

```

```
41     Ys = AlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s);
42     %Ys = ConcAlcoolSangue(X, Ye, k1, k2, k3, y0s, L);
43
44     soma = integralsup(ordem, linha, X, Ys);
45     rsoma(a1, b1) = soma;
46
47     if 0
48         subplot(2,2,1)
49         grid on
50         plot(X, I, 'g')
51
52         subplot(2,2,2)
53         grid on
54         plot(X, Ys, 'r')
55
56         subplot(2,2,3)
57         grid on
58         plot(X, Ye, 'b')
59
60         subplot(2,2,4)
61         hold on
62         grid on
63         plot3(a, b, soma, '+');
64
65         pause(0.000001);
66     end
67 end
68 b1=b1+1;
69 end
70 toc
71 b1+(a1-1)*ref(1)-1
72 a1=a1+1;
73 end
74
75 toc
76
77 clf
78 buff = rsoma;
79
80 buff(buff==0) = 10000000000000000;
81 range = max(max(rsoma)) - min(min(buff));
82
83 rsoma(rsoma==0) = min(min(buff))-0.01*range;
```



```

84
85 surf(meshgrid(espaco1)',meshgrid(espaco2),rsoma)
86 grid on
87 shg

```

8.3 CÓDIGOS AUXILIARES

```

1 function [fm unicidade] = findMAX(X)
2 a = X;
3 bufa={};
4 bufb={};
5 comando1 = 'v(';
6 while numel(a)≠length(a)
7     [a b] = max(a);
8     bufb=[bufb b];
9     bufa=[bufa a];
10    comando1 = strcat(comando1,'1,');
11 end
12 [a, b] = max(a);
13 fm = [b a];
14 unicidade=[];
15 comando2 = strcat(num2str(b),' ');
16 v=bufb{end};
17 fm = [eval(strcat(comando1,comando2)) fm];
18 unicidade = [unicidade sum(find(bufa{length(bufa)}==a)>0)];
19 for c=length(bufb)-1:-1:1
20     v=bufb{c};
21     comando1(end)=[];
22     comando1(end)=[];
23     comando2 = strcat(num2str(fm(1)),' ',comando2);
24
25     fm = [eval(strcat(comando1,comando2)) fm];
26     unicidade = [sum(find(bufa{c}==a)>0) unicidade];
27 end
28 unicidade=[sum(find(X==a)>0) unicidade];
29 end

```

```

1 function [fm unicidade] = findMIN(X)
2 a = X;

```

```

3  bufa={};
4  bufb={};
5  comandol = 'v(';
6  while numel(a)≠length(a)
7      [a b] = min(a);
8      bufb=[bufb b];
9      bufa=[bufa a];
10     comandol = strcat(comandol,'1,');
11 end
12 [a, b] = min(a);
13 fm = [b a];
14 unicidade=[];
15 comando2 = strcat(num2str(b),' ');
16 v=bufb{end};
17 fm = [eval(strcat(comandol,comando2)) fm];
18 unicidade = [unicidade sum(find(bufa{length(bufa)}==a)>0)];
19 for c=length(bufb)-1:-1:1
20     v=bufb{c};
21     comandol(end)=[];
22     comandol(end)=[];
23     comando2 = strcat(num2str(fm(1)),' ',comando2);
24
25     fm = [eval(strcat(comandol,comando2)) fm];
26     unicidade = [sum(find(bufa{c}==a)>0) unicidade];
27 end
28 unicidade=[sum(find(X==a)>0) unicidade];
29 end

```

```

1  function Y = SORT(X)
2  % Y = SORT(X,op)
3  %
4  % op = 1 para simple sort
5  % op = [0 v] para changesort
6  i=[];
7  Y=[];
8  Aux = [];
9  tam = size(X);
10
11 [Aux I] = sort(X(:,end));
12 Y = zeros(tam);
13 Y(:,end) = Aux;

```

```

14 Y([1:tam(1)],1:end-1) = X(I,1:end-1);
15 %find(X(:,end)==max(X(:,end)), 1 ); %posicao
16 end

```

```

1 function sf = SuperFind(X,Y,relax)
2 %Retorna as primeiras posicoes de Y em X
3 %relax 1 valor aproximado, relax 0 valor exato
4 sf = zeros(1,length(Y));
5 auxiliar = sf+1;
6 if relax
7     V = auxiliar.*10000000000000;
8     for a=1:length(X)
9         buff = abs(X(a) - Y);
10        teste = (buff<V);
11        if sum(teste)
12            sf = sf - teste.*sf; %retira o valor antigo
13            sf = sf + teste.*auxiliar*a; %insere o novo valor
14            V = V - teste.*V;
15            V = V + teste.*buff;
16        end
17    end
18 else
19    for a=1:length(X)
20        buff = (X(a) == Y);
21
22        if sum(buff)
23            sf = sf + a*auxiliar.*buff;
24        end
25    end
26 end
27 end

```

```

1 function [] = superplot(x,y,Z,diretiva)
2 tam = [length(x) length(y)];
3 XX=x;
4 YY=y;
5 if diretiva(1) %inverte x com y
6     YY = x;
7     XX = y;
8     tam = [length(y) length(x)];

```

```

9 end
10 if diretiva(2) %espelha y
11     buff=YY;
12     for a=1:length(YY)
13         YY(a) = buff(length(YY)-a+1);
14     end
15 end
16 YY=YY';
17 %cria matriz YY
18 buff = YY;
19 for a=2:tam(1)
20     YY = [YY buff];
21 end
22 %cria matriz XX
23 buff = XX;
24 for a=2:tam(2)
25     XX = [XX ; buff];
26 end
27 switch diretiva(3)
28     case 1
29         mesh(XX,YY,Z);
30     case 2
31         surf(XX,YY,Z);
32     case 3
33         plot(XX,YY,Z);
34 end
35 end

```

```

1 function S = simetria(M,tipo,k)
2 % S = simetria(M,tipo,k)
3 %
4 % M = Vetor nxm
5 % k = supressao de mensagem de erro (optativo, qualquer valor)
6 % tipo
7 % h = horizontal
8 % v = vertical
9 % d1 = diagonal principal
10 % d2 = diagonal secundaria
11 %
12
13 S = [];

```

```

14 tam = size(M);
15
16 logic = strcmp(tipo, 'h') || strcmp(tipo, 'v') || strcmp(tipo, 'd1') || strcmp(tipo, 'd2');
17 if logic
18
19     logic = tam(1) ≥ 1 && tam(2) ≥ 1 && length(tam) == 2;
20
21     if logic
22
23         if strcmp(tipo, 'h')
24             S = M;
25             for a=1:tam(1)
26                 S(a,:) = M (tam(1)-a+1,:);
27             end
28         end
29         if strcmp(tipo, 'v')
30             S = M;
31             for a=1:tam(2)
32                 S(:,a) = M (:,tam(2)-a+1);
33             end
34         end
35         if strcmp(tipo, 'd1')
36             S = M';
37         end
38         if strcmp(tipo, 'd2')
39             S = simetria(simetria(M, 'v')', 'v');
40         end
41     else
42         if ~exist('k', 'var')
43             fprintf('\n Erro nas dimensoes da Matriz!\n');
44         end
45     end
46 else
47     if ~exist('k', 'var')
48         fprintf('\nTipo Invalido!!\n');
49     end
50 end
51 end

```

```

1 function sf = SuperFind(X,Y,relax)
2 %Retorna as primeiras posicoes de Y em X

```

```
3 %relax 1 valor aproximado, relax 0 valor exato
4
5 sf = zeros(1,length(Y));
6 auxiliar = sf+1;
7 if relax
8     V = auxiliar.*10000000000000;
9     for a=1:length(X)
10        buff = abs(X(a) - Y);
11        teste = (buff<V);
12        if sum(teste)
13            sf = sf - teste.*sf; %retira o valor antigo
14            sf = sf + teste.*auxiliar*a; %insere o novo valor
15            V = V - teste.*V;
16            V = V + teste.*buff;
17        end
18    end
19 else
20    for a=1:length(X)
21        buff = (X(a) == Y);
22
23        if sum(buff)
24            sf = sf + a*auxiliar.*buff;
25        end
26    end
27 end
28 end
```