



---

# B i o Matemática

---

34



IMECC – Unicamp

Campinas

2024

ISSN 1679-365X

Acesso on-line: <https://ime.unicamp.br/~biomat/revistas.htm>



*Busarellus nigricollis*, gavião belo, Pantanal/MT.

Foto: G.L.Diniz

### **Conselho Editorial**

- Rodney C. Bassanezi – UNICAMP (Coordenador);
- Estevão E. Laureano – UNICAMP;
- João Frederico C. A. Meyer – UNICAMP;
- Laécio C. Barros – UNICAMP;
- Laércio L. Vendite – UNICAMP;
- Marcos Eduardo R. V. Mesquita – UNICAMP;
- Wilson C. Ferreira Jr. – UNICAMP;
- Geraldo L. Diniz – UFMT (Organizador).

Acesso on-line:  
<https://ime.unicamp.br/~biomat/revistas.htm>

## **Prefácio:**

Neste trigésimo quarto volume da revista, há contribuições relevantes para o conhecimento desta área interdisciplinar denominada Biomatemática.

Os artigos que se seguem, é fruto de um esforço conjunto e da dedicação dos pesquisadores que acreditam na solução dos problemas atuais e vem exigindo uma maior cooperação entre pesquisadores de áreas diversificadas.

Ao percorrer as páginas desta revista, a pessoa interessada irá descobrir abordagens diferenciadas, cujas aplicações se estendem a uma série de problemas em áreas do conhecimento ligadas à epidemiologia, oncologia, dinâmica populacional e questões ambientais.

Com o intuito de que tenham uma boa leitura e possam apreciar o que se apresenta no presente número deste periódico, é que o corpo editorial selecionou estes artigos.

Comissão Editorial – IMECC-Unicamp.  
Campinas, 30 de agosto de 2024.

# Índice

<i>Estudo sobre modelagem matemática baseado na dinâmica do sistema imunológico humano mediante a exposição tumoral</i> , B. P. P. Rodrigues & V. F. Wasques	1
<i>State feedback as a strategy for COVID-19 control and analysis</i> , L. R. S. Rodrigues & F. Gabrielli	15
<i>Utilizando agrupamento automático na identificação de campos vetoriais em sistemas p-fuzzy</i> , G. O. Queiroz, J. B. Florindo & E. Esmi	45
<i>Comparação entre modelos teóricos e dados experimentais do sistema planta-polinizador</i> , I. Marcondes, M. C. Leite, P. Ferrari & P. Sophia	57
<i>Equação de Gompertz: um estudo sobre a evolução de tumores</i> , O. S. Macedo & G. R. Souza	69
<i>Modelagem matemática para descrever interações entre espécies mediante a dispersão de poluente em corpos aquáticos</i> , C. F. L. Santos	81
<i>Holling-type functional responses of fuzzy population models under cross operations</i> , B. Laiate, J. R. Alves & J. F. C. A. Meyer	101

# Estudo sobre modelagem matemática baseado na dinâmica do sistema imunológico humano mediante a exposição tumoral

Barbara P. P. Rodrigues<sup>1</sup>, Vinícius F. Wasques<sup>2</sup>

Ilum Escola de Ciência, CNPEM – 13.087-548, Campinas/SP.

**Resumo.** Neste estudo é proposta uma modelagem via equações diferenciais que descrevem o crescimento tumoral cancerígeno considerando muitos dos fatores que o ajudam a se desenvolver, além dos que tentam o impedir a se proliferar. Ademais, realiza-se um estudo sobre a dinâmica do sistema imunológico diante dessas populações tumorais, a fim de compreender matematicamente o seu comportamento e propor formas diferentes de interpretar seus resultados. Além da modelagem, este trabalho fornece interpretações biológicas para possivelmente auxiliar estudos oncológicos.

**Palavras-chave:** Câncer; Biomatemática.

## 1. Introdução

A Oncologia é a área da medicina responsável por tratar o desenvolvimento de tumores, sejam eles benignos ou malignos formados a partir da proliferação descontrolada de células dentro de um organismo. Este ramo da ciência é atualmente um dos mais requisitados, pois no mundo a cada ano mais de 10 milhões de pessoas vão a óbito em consequência do câncer, versão maligna dos tumores, de acordo com a Organização Pan-Americana da saúde OPAS/OMS (2020).

A grande incidência de casos de câncer na contemporaneidade pode ser associada a globalização, a qual com ela trouxe a urbanização que em termos

---

<sup>1</sup>barbaraperezrodrigues@gmail.com

<sup>2</sup>vwasques@outlook.com - FAPESP nº 2023/03927-0

de saúde provocou uma mudança no estilo de vida das pessoas. Sendo assim, com essa mudança no estilo de vida, apesar do avanço da ciência, que busca a cura dessa doença, o aumento do consumo de alimentos industrializados com uma grande quantidade de conservantes provocou o aumento da probabilidade do surgimento dessas enfermidades cada vez em maior escala na população (Sung et al., 2021). Ademais, o sedentarismo cada vez mais instaurado na população também contribui para essa situação.

No entanto, reiterando, também houveram avanços nas técnicas para o tratamento dos tumores como a radioterapia, que usa radiação ionizante para conter o tumor, quimioterapia, a qual faz uso de medicamentos para destruir o câncer e técnicas cirúrgicas de remoção da massa. Dessa forma, um impasse parece surgir, pois de um lado há a melhoria nas estratégias que visam acabar com os tumores e do outro há o aumento nos números de óbitos por causa dessa proliferação. Então, o mais sensato parece ser buscar maneiras de aperfeiçoar ainda mais as condutas de tratamento da doença (Duarte et al., 2022).

Nas próximas seções serão abordados os fatores envolvidos na doença para maior entendimento da proposta discutida neste trabalho.

## 2. Carcinogênese e desenvolvimento

As células são pequenas estruturas que compõem todo o corpo de seres vivos. Nos seres humanos elas são eucarióticas, ou seja, possuem um núcleo bem definido em seu interior, o qual contém toda a informação genética para a formação de proteínas essenciais para a manutenção e sobrevivência do corpo humano. Toda a informação genética é armazenada em forma de DNA, ácido desoxirribonucleico e RNA, ácido ribonucleico. Para a geração de novas células somáticas é preciso ocorrer o processo de mitose, o qual consiste na multiplicação dos ácidos nucleicos o que gera, a partir de uma célula-mãe, duas células-filhas. Entretanto, alguns problemas podem ocorrer durante esse procedimento, ocasionando em mutações na informação genética gerando células diferentes das que deveriam existir. Geralmente, nestes casos entram em ação proteínas responsáveis por gerar a morte ou reparo destas células mutantes, como a proteína p53 (Carvalho e Recco-Pimentel, 2019). No entanto, quando nenhum mecanismo atua visando detê-las, essas mutações se propagam de célula em célula, o que é extremamente prejudicial ao corpo, principalmente na sua forma maligna a qual se espalha descontroladamente pelo organismo inva-

dindo e danificando tecidos e órgãos, como pode ser observado na Figura 1. Ademais, estes tumores podem ainda se espalhar para variadas partes do corpo formando metástases (Britton, 2003).

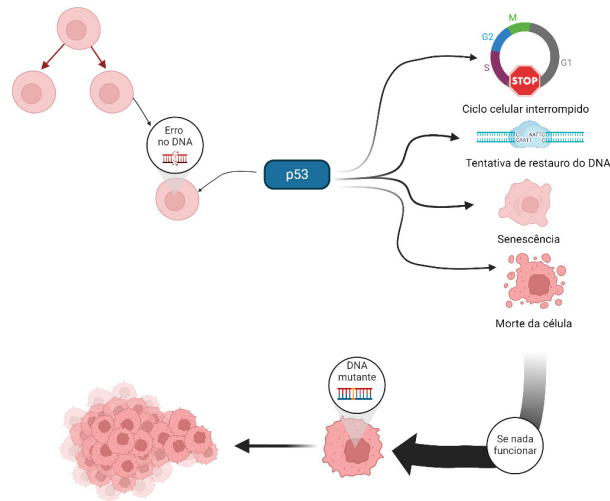


Figura 1: Esquema ilustrativo da carcinogênese.

O crescimento deste tumor ocorre de diferentes formas a depender do seu estágio e de sua classificação. Com isso, mecanismos são necessários para que o seu desenvolvimento ocorra plenamente. Um destes mecanismos é a angiogênese em que o tumor cria para si vasos sanguíneos, a partir de outros já preexistentes, que suprem a sua necessidade de recursos para sua sobrevivência no organismo. Dessa forma, essa massa tumoral consegue assim ter a capacidade de se espalhar ainda mais pelo corpo.

### 3. Ação do sistema imunológico

O sistema imunológico humano é dividido em inato e adaptativo. O inato, como o próprio nome diz, são formas de defesa do corpo que nascem com o indivíduo, ela atua sem precisar de ativação prévia e começa a agir rapidamente

com o surgimento de um possível invasor ao organismo. Ele é composto por mecanismos de barreiras físicas, químicas e biológicas, contendo células efetoras, sendo elas os macrófagos, neutrófilos, células dendríticas e as natural killers (NK). Já o sistema imune adaptativo é aquele que se desenvolve de acordo com a exposição corporal a patógenos presentes no ambiente ao decorrer da vida. Este proporciona ao corpo uma memória imunológica capaz de reconhecer estes invasores já enfrentados anteriormente possibilitando rápida ação das células imunes a fim de detê-los. Fazem parte desse sistema as células B e T.

Para que toda a ação do sistema imune comece a acontecer existem citocinas, glicoproteínas extracelulares, as quais funcionam levando informação química para regulação da imunidade inata e adaptativa. Elas agem mediante a exposição a informações antigênicas de corpos estranhos e visam ativar o sistema imunológico para combatê-lo. Para cada célula imune surgem diferentes citocinas acionando-as (Abbas, 2019).

Durante a exposição tumoral, muitas dessas células surgem visando agir contra esse cenário, haja vista o fato dele ser um corpo estranho. No entanto, os cânceres (forma maligna do tumor) possuem meios de se ocultar do sistema imune e, assim, dificultar a sua ação. Além disso, os tumores podem ainda utilizar algumas das células imunológicas a seu favor, para que diminuam o número de agentes que atuam para lhe deter e, ainda, promovem um ambiente imunossupressor que beneficia o seu crescimento.

## 4. Modelagem matemática

Tendo em vista, então, todo o mecanismo de crescimento de um tumor, além dos meios que visam o deter, é proposto neste trabalho um estudo utilizando diferentes modelos matemáticos que o descrevam. Ademais, são também propostas formas, possivelmente mais fiéis, de aplicação para cada um dos modelos a depender do estágio em que a doença se encontra. Por fim, torna-se possível utilizar um modelo matemático que permita o entendimento de cada estágio da doença, possibilitando pensar em momentos certos para tomar medidas diferentes de seu desenvolvimento visando o seu combate.

Este artigo se apoiou no trabalho proposto por Reips et al. (2021), tomando como base suas contribuições e realizando algumas adaptações. Para compreender a forma como o câncer se propaga pelo corpo humano de forma matemática é preciso o entendimento de uma série de equações descritivas do



funcionamento fisiológico do corpo mediante a população tumoral. Então, para estudo inicial foi de escolha trabalhar com um escopo mais reduzido de equações considerando as mais relevantes para o trabalho e focando em entender a forma isolada de cada uma delas.

#### 4.1. O modelo aplicado ao câncer

As células tumorais, diferentemente das outras que compõem o corpo, crescem de forma variada a depender do estágio de sua condição. Sendo assim, modelos que definem uma única equação como sendo geral para toda a fase de desenvolvimento e progressão da doença parecem ser incompatíveis com a realidade.

O primeiro modelo matemático estudado foi na forma como se apresentava na referência Reips et al. (2021) que tratava-se da equação logística, também conhecida como modelo de Verhulst, conforme ilustrada na Figura 2. A equação diferencial associada à quantidade de células cancerígenas é dada por (4.1)

$$\begin{aligned} \frac{dC}{dt} &= \alpha_c C \left(1 - \frac{C}{\beta_c}\right) + \theta_c M_2 C + \theta_1 P_c \\ &- [(\lambda_C(M_1 + N_K + T_C + T_1 + E + B + M_A)/1 + \eta_3 I_B) + \mu_C] C, \end{aligned} \quad (4.1)$$

em que:

- $\alpha_c$  = Taxa de crescimento tumoral;
- $C$  = Quantidade de células cancerígenas;
- $\beta_c$  = Capacidade de suporte;
- $\theta_c$  = Taxa de crescimento dos macrófagos do tipo 2 ao entrarem em contato com uma população cancerígena;
- $M_2$  = Macrófagos do tipo 2;
- $\theta_1$  = Taxa de proliferação do câncer;
- $P_c$  = Termo referente a proliferação do tumor;
- $M_1$  = Macrófagos do tipo 1;
- $N_K$  = Natural killers;

- $T_C$  = Células T citotóxicas;
- $T_1$  = Células T Helper 1;
- $E$  = Eosinófilos;
- $B$  = Basófilos;
- $M_A$  = Mastócitos;
- $\eta_3$  = Taxa de inibição dos mastócitos;
- $I_B$  = Interleucinas;
- $\mu_C$  = Período de meia-vida das células.

Nesse modelo, o câncer apresenta um crescimento lento em seu início, crescendo a partir de uma condição inicial das células até passar por um ponto de inflexão correspondente a metade da capacidade de suporte e, ao atingir enfim o limite das condições disponíveis no meio, que para o tumor são os nutrientes vindos por difusão de células adjacentes pertencentes aos tecidos saudáveis, e, então tem seu crescimento estabilizado. Ele é dado pela equação diferencial (4.2)

$$\frac{dN}{dt} = \lambda N \left(1 - \frac{N}{k}\right), \quad (4.2)$$

em que  $\lambda$  é a taxa de crescimento e  $k$  a capacidade suporte.

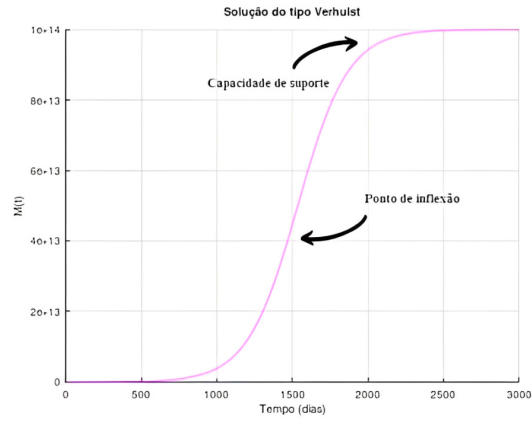


Figura 2: Modelo de Verhulst ilustrativo do crescimento tumoral.

Em segunda análise, foi estudado o modelo de Gompertz, cuja equação diferencial é dada por (4.3)

$$\frac{dN}{dt} = -aN \ln \left( \frac{N}{K} \right), \quad (4.3)$$

em que  $a$  é a taxa de crescimento e  $K$  a capacidade suporte.

O modelo de Gompertz já é muito utilizado para descrever o crescimento do câncer em muitos estudos de forma generalizada, visando ilustrá-lo como um todo. Esse modelo tem a forma logística, assim como o modelo de Verhulst. No entanto, alguns fatores em sua equação alteram a velocidade de crescimento, sendo ainda mais lenta no início do que no modelo inicial, até atingir a capacidade de suporte do meio. Tal comportamento pode ser visto na Figura 3. Esse fator logarítmico da equação é o que torna o crescimento extremamente rápido no início até passar para um estágio mais lento.

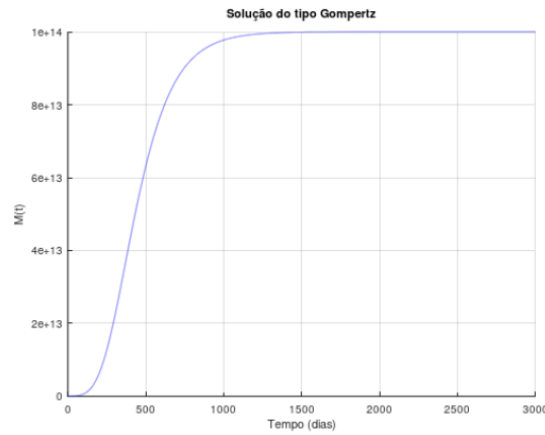


Figura 3: Modelo de Gompertz ilustrativo do crescimento tumoral.

## 4.2. O modelo aplicado ao sistema imunológico

Durante o desenvolvimento do tumor no corpo, surgem células do sistema imunológico visando combater a sua proliferação, aja vista o fato dele se comportar como um invasor prejudicial a saúde do hospedeiro. Nos próximos tópicos serão, então, listadas as células abordadas no estudo e as respectivas equações descritivas de seu crescimento.

#### 4.2.1 O modelo aplicado aos macrófagos

Os macrófagos são células do sistema imunológico inato provenientes de hematopoiese, ou seja, se formam a partir de células-tronco hematopoiéticas, aquelas que possuem a capacidade de se autorrenovar e se diferenciar em células específicas. Esses corpúsculos distribuem-se por todo o organismo e tem a capacidade de fagocitar corpos estranhos que ali podem surgir. Ao realizar esse processo de envolver o possível patógeno elas obtêm informações úteis do patógeno e apresentam-o para os linfócitos promovendo uma resposta inflamatória, organização tecidual e ação microbiana.

Esses macrófagos dividem-se em dois grupos principais, sendo os dois relevantes para o trabalho devidos as suas características. Os macrófagos 1 ( $M_1$ ) surgem, principalmente, no início da doença visando a sustentação da inflamação sendo extremamente importantes na proteção contra o câncer devido a sua alta atividade citotóxica, ou seja, liberação de substâncias tóxicas que podem levar a morte do invasor. A partir desses fatores, é proposta a seguinte equação diferencial (4.4):

$$\frac{dM_1}{dt} = \rho_m I_\alpha C_i + \frac{\alpha_m M_1 \left(1 - \frac{M_1}{\beta_m}\right)}{1 + \eta_3(I_\beta + I_{23})} - \delta_m M_1 C - \mu_m M_1, \quad (4.4)$$

em que  $\rho_m$  diz respeito a taxa de ativação da produção de  $I_\alpha$  que é uma proteínas envolvidas na ativação do sistema imune, uma interleucinas,  $\alpha_m$  a taxa de crescimento das células  $M_1$ ,  $C_i$  diz respeito ao efeito de saturação do câncer e é dado por (4.5)

$$C_i = \frac{C}{(k + C)}, \quad (4.5)$$

$\eta_3$  taxa de proliferação das interleucinas  $I_\beta$  e  $I_{23}$ ,  $M_1$  crescimento da população de macrófagos,  $\delta_m$  necrose celular por contato com o tumor,  $\mu_m$  fator de apoptose devido a meia-vida e  $\beta_m$  capacidade de suporte do meio.

Além dessa célula outro macrófago que surge nesse contexto é o  $M_2$  o qual provém de uma via alternativa e que possui importante papel na inflamação, mas não é tão bom na apresentação de antígenos. No entanto, essas células possuem propriedades que as tornam pró-tumorais, isso ocorre devido a um processo complexo de liberação de algumas proteínas no meio celular que estimulam a  $M_2$  a funcionar de forma a diminuir a função imune, promovendo eventos mitóticos, inibitórios de morte celular, apoptose e angiogênicos. Com isso essas células conseguem ajudar o câncer a sobreviver e a se proliferar

em metástase. Dessa forma, a diferença de sua equação (4.6) com a (4.4) é a ausência do fator associado à população cancerígena.

$$\frac{dM_2}{dt} = \rho_m I_{10} C_i + \frac{\alpha_m M_2 \left(1 - \frac{M_2}{\beta_m}\right)}{1 + \eta_1 I_\gamma} - \mu_m M_2, \quad (4.6)$$

em que  $\rho_m$  diz respeito a taxa de ativação da interleucina  $I_{10}$ ,  $M_2$  correspondendo aos macrófagos 2 e  $\eta_1$  a proliferação da interleucina de supressão  $I_\gamma$ .

#### 4.2.2 O modelo aplicado às natural killers

As células natural killers ( $N_K$ ) são também células do sistema imunológico inato que passam a agir no organismo na tentativa de combater os tumores. Essas células agem se aderindo a células infectadas e liberando enzimas que danificam a sua membrana plasmática levando-as a morte. A equação diferencial (4.7) que a descreve é semelhante a dos macrófagos  $M_1$  (4.4), apenas diferindo nas especificidades de cada célula.

$$\frac{dN_K}{dt} = \rho_k I_\alpha C_i + \frac{\alpha_K N_K \left(1 - \frac{N_K}{\beta_K}\right)}{1 + \eta_3 (I_\beta + I_{23})} - \delta_K N_K C - \mu_K N_K, \quad (4.7)$$

sendo  $\rho_k$  correspondente a taxa de ativação da interleucina  $I_\alpha$ ,  $\alpha_k$  a taxa de crescimento das natural killers,  $\beta_k$  a capacidade de suporte do meio,  $\eta_3$  a taxa de produção das interleucinas de supressão  $I_\beta$  e  $I_{23}$ ,  $\delta_k$  morte celular por contato com as células cancerígenas e  $\mu_k$  o fator de apoptose celular ao atingir a sua meia-vida.

#### 4.2.3 O modelo aplicado aos linfócitos T citotóxicos

Outra célula que age na presença de uma população tumoral são os linfócitos T citotóxicos. Sua ação se inicia com o reconhecimento de antígenos expostos pelas células cancerígenas que permitem a ação dos glóbulos brancos em identificá-las e, assim, ocorre a liberação de citotoxinas que desencadeiam uma cascata de reações nas células-alvo o que as leva a apoptose. Novamente, a estrutura da equação diferencial (4.8) é similar as anteriores modificando apenas as suas especificidades,

$$\frac{dT_C}{dt} = \rho_8 I_{12} C_i + \frac{\alpha_T T_C \left(1 - \frac{T_C}{\beta_t}\right)}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_t T_C C - \mu_8 T_C, \quad (4.8)$$

em que  $\rho_8$  diz respeito a taxa de ativação da interleucina  $I_{12}$ ,  $\alpha_T$  a taxa de crescimento das células  $T_c$ ,  $\eta_3$  a ativação da  $I_\beta$ ,  $\gamma_t$  a taxa de morte celular por contato com o tumor e  $\mu_8$  o fator de apoptose por meia-vida.

#### 4.2.4 O modelo aplicado à T helper: Th0, Th1, Th2 e Th17

Os linfócitos T são células que após serem produzidas na medula óssea migram para o timo \* que se diferenciam e passam a circular entre os órgãos linfóides secundários. Então, a partir de um linfócito T precursor, há a sua diferenciação em outras variantes. Neste trabalho, o foco será nas Th0, Th1, Th2 e Th17. A única diferença entre cada uma delas está no conjunto de citocinas que cada uma secreta. Suas equações (4.9–4.12) também seguem a estrutura já apresentada anteriormente.

$$\frac{dT_0}{dt} = \rho_t I_{12} C_i + \frac{\alpha_t T_0 (1 - \frac{T_0}{\beta_t})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_t T_0 C - \mu_t T_0, \quad (4.9)$$

$$\frac{dT_1}{dt} = \rho_t I_{12} T_0 + \frac{\alpha_t T_1 (1 - \frac{T_1}{\beta_t})}{1 + (\eta_3 I_\beta + \eta_2 I_4)} - \delta_t T_1 C - \mu_t T_1, \quad (4.10)$$

$$\frac{dT_2}{dt} = \rho_t I_4 T_0 + \frac{\alpha_t T_2 (1 - \frac{T_2}{\beta_t})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \mu_t T_2, \quad (4.11)$$

$$\frac{dT_{17}}{dt} = \rho_t I_6 T_0 + \frac{\alpha_t T_{17} (1 - \frac{T_{17}}{\beta_t})}{1 + \eta_1 I_\gamma} - \mu_t T_{17}. \quad (4.12)$$

sendo  $\rho_t$  a taxa de ativação das interleucinas  $I_{12}$ ,  $I_4$  e  $I_6$  nas respectivas equações,  $\alpha_t$  taxa de crescimento de cada uma das células,  $\beta_t$  a capacidade de suporte do meio,  $\eta_3$  taxa de produção da interleucina  $I_\beta$ ,  $\eta_2$  da interleucina  $I_4$  e  $\eta_1$  da  $I_\gamma$  e, por fim,  $\mu_t$  o fator de apoptose celular devido ao alcance da meia-vida.

### 4.3. O modelo aplicado aos mastócitos e basófilos

Por fim, os mastócitos e os basófilos são outras células que também tem ação contra as populações cancerígenas, por meio da liberação do conteúdo granular presente em seu interior. A principal diferença entre esses dois corpúsculos é que o primeiro localiza-se nos tecidos conjuntivos e o segundo circula pelos vasos sanguíneos.

---

\*Timo: órgão do sistema linfático responsável pela maturação das células do tipo T.

Os mastócitos tem papel importante na atuação do sistema imunológico, eles são responsáveis pela ativação dos linfócitos B e Th2, além da produção da interleucina IL-5 que são receptoras dos eosinófilos e dos linfócitos B. Sua equação é escrita na forma (4.13)

$$\frac{dM_A}{dt} = \phi_M A I_\alpha C_i + \frac{\alpha_M A M_A (1 - \frac{M_A}{\beta_{MA}})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_M A M_A C - \mu_M A M_A \quad (4.13)$$

sendo  $\phi_M A$  a taxa de ativação dos basófilos.

Já os basófilos são responsáveis pela diferenciação das células Th0 e Th2, haja vista a produção de interleucinas IL-4 estimuladas por eles. Sua equação é dada por (4.14)

$$\frac{dB}{dt} = \phi_B I_8 C_i + \frac{\alpha_B B (1 - \frac{B}{\beta_B})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_B B C - \mu_B B. \quad (4.14)$$

sendo  $\phi_B$  a taxa de ativação dos basófilos.

## 5. Sistema de equações

Por fim, todas as equações correspondentes a cada uma das células imunológicas podem formar juntas um sistema de equações que corresponde a ação de todas elas em conjunto no organismo,

$$\begin{cases} \frac{dM_1}{dt} = \rho_m I_\alpha C_i + \frac{\alpha_m M_1 (1 - \frac{M_1}{\beta_m})}{1 + \eta_3 (I_\beta + I_{23})} - \delta_m M_1 C - \mu_m M_1 \\ \frac{dT_C}{dt} = \rho_8 I_{12} C_i + \frac{\alpha_T T_C (1 - \frac{T_C}{\beta_t})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_t T_C C - \mu_8 T_C \\ \frac{dB}{dt} = \phi_B I_8 C_i + \frac{\alpha_B B (1 - \frac{B}{\beta_B})}{1 + \eta_3 I_\beta} - \delta_B B C - \mu_B B, \end{cases}$$

como o sistema acima que tem em si a interação entre o macrófagos 1 (4.4), células T citotóxicas (4.8) e basófilos (4.14).

## 6. Interpretação do problema

Diante, então, do conhecimento obtido a partir das equações, nas seções anteriores, passamos a fazer uma análise de variados modelos pensando em

diferentes estágios do câncer. Resolvemos propor, assim, nos baseando em pesquisa bibliográfica, o modelo de Gompertz para a modelagem final do problema ao invés de Verhulst como proposto em Reips et al. (2021). Tal escolha se deu pelo fato de que o modelo de Gompertz apresenta um crescimento mais rápido no início da dinâmica. Dessa forma, propusemos uma modificação na EDO que descreve o tumor e observamos a solução produzida por ele utilizando valores presentes na literatura.

Com o resultado dos dois modelos, foi possível compará-los e analisar o quão fiel estavam ao problema. Pudemos observar que os dois representam muito bem populações tumorais, atingindo em certo ponto uma estabilidade correspondente a capacidade de suporte conforme a limitação de nutrientes do ambiente em que o tumor se encontra. No entanto, também foi possível observar uma diferença entre eles correspondente a velocidade do desenvolvimento do câncer em cada caso. Sendo a do modelo de Gompertz maior que a de Verhulst, conforme pode ser ilustrado na Figura 4.

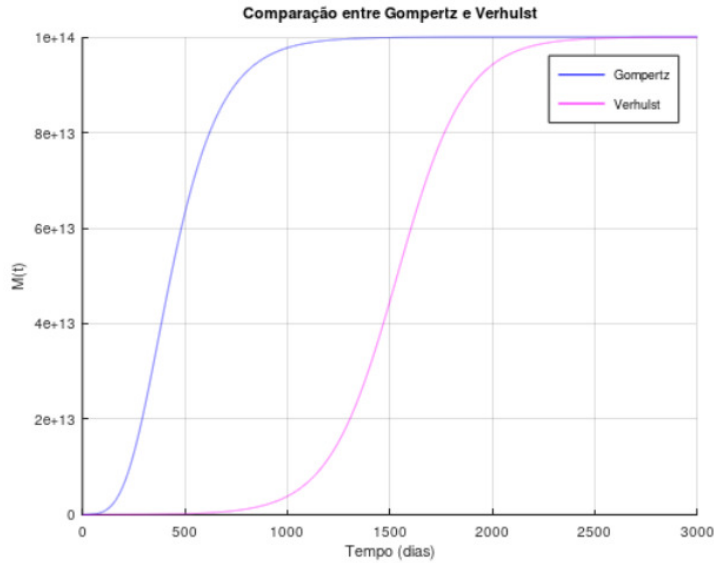


Figura 4: Gráfico comparativo do comportamento do modelo a partir de Verhulst (em magenta) e Gompertz (em azul).



## 7. Considerações finais

Por fim, chegamos a conclusão de que o modelo de Gompertz é o mais adequado para a fase inicial do câncer em que há uma pequena quantidade de células formando uma massa baixa e sólida e assim cresce de forma mais acelerada com as células se dividindo mais em um menor tempo. No entanto, para fases mais avançadas em que o tumor já está grande, vascularizado e em metástase, o mais adequado é utilizar o modelo de Verhulst que demonstra um desenvolvimento mais lento.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) para o desenvolvimento do trabalho.

## Referências

- Abbas, A. K. (2019). *Imunologia Celular e Molecular*. GEN Guanabara Koogan, 9ª edição.
- Britton, N. F. (2003). *Essential Mathematical Biology*. Springer, Berlin.
- Carvalho, H. F. e Recco-Pimentel, S. M. (2019). *A Célula*. Manole Saúde, Brasil, 4ª edição.
- Duarte, D., Guerreiro, I., e Vale, N. (2022). Novel strategies for cancer combat: Drug combination using repurposed drugs induces synergistic growth inhibition of mcf-7 breast and ht-29 colon cancer cells. *Current Issues in Molecular Biology*, 44(10):4930–4949.
- OPAS/OMS (2020). *Cancêr*. Organização Pan-Americana da Saúde. <https://www.paho.org/pt/topicos/cancer\#:~:text=0%20c%C3%A2ncer%20C3%A9%20a%20segunda,de%20baixa%20e%20m%C3%A9dia%20renda>. Acesso: 18 de abril de 2024.
- Reips, L., França, L. A. S., e Aleixo, R. (2021). Modelagem matemática aplicada à dinâmica de células imunológicas mediante a presença de populações tumorais. In *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, volume 8, páginas 1–7. SBMAC.

Sung, H., Ferlay, J., Siegel, R. L., Laversanne, M., Soerjomataram, I., Jemal, A., e Bray, F. (2021). Global cancer statistics 2020: Globocan estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. *CA: A Cancer Journal for Clinicians*, 71(3):209–249.

# State feedback as a strategy for COVID-19 control and analysis

Leonardo R. S. Rodrigues<sup>1</sup> Felipe Gabrielli<sup>2</sup>  
Natural Sciences, CCCO, UFMA – 65.400-000, Codó/MA.

**Abstract.** This paper presents a study on a compartmental epidemic model for COVID-19, examining the stability of its equilibrium points upon vaccination introduction as a strategy to mitigate the spread of the disease. Initially, the Susceptible-Infectious-Quarantine-Recovered (SIQR) mathematical model and its technical aspects are introduced. Subsequently, vaccination is incorporated as a control measure within the model scope. Equilibrium points and the basic reproductive number are determined followed by an analysis of their stability. Furthermore, controllability characteristics and optimal control strategies for the system are investigated, supplemented by numerical simulations.

**Keywords:** *Optimal, mathematical modeling, Riccati, equilibrium points, vaccination, numerical simulation.*

## 1. Introduction

Mathematical modeling has long been used as a tool in several areas of public health, including epidemiology, an area that developed significantly during the 20<sup>th</sup> century. Models in mathematical epidemiology, in particular, have been studied since the 18<sup>th</sup> century but had a development leap arguable from the work of Kermack and McKendrick (1927). Since then, many other advances were made and many types of models were created and studied. Most of these models are compartmental models, which divide the population into categories with a particular behavior. Some examples are SIS, SIR, SIRS, SEIR,

---

<sup>1</sup>leonardo.rodrigues@ufma.br

<sup>2</sup>gabrielli14@gmail.com

SIQR, among others. More details about some of these models can be seen in Brauer et al. (2019). One important point to observe is that a mathematical model is always a simplification of reality. Some aspects are disregarded, so we can focus on the variables that really matter to the problem. No model can consider all aspects of a complex real problem, as the spread of an infectious disease, hence the importance of each model type. Just to exemplify this reality simplification, the model studied in this paper does not consider population heterogeneity, i.e, all individuals are equally susceptible to the disease, and there are models that take these differences into account, as can be seen in Britton et al. (2020).

We are currently living through the COVID-19 pandemic, a disease caused by the sars-cov-2 virus, which has already caused thousands of deaths around the world and continues to plague the population. Many researchers believe that COVID-19 will become an endemic disease in the future, but until the present date, World Health Organization keeps classifying COVID-19's threat level as a pandemic. An interesting discussion about predicting the pandemic contention is done by Achaiah et al. (2020). Several strategies have been adopted by governments to combat the spread of the disease, such as quarantine, lockdown, closing borders, using masks, hand hygiene with alcohol gel, etc. But no measure is as effective as vaccination, and since its development in 2021, many countries have implemented a vaccination schedule as part of disease-fighting strategies. Vaccination is the most effective and safe way we know to combat infectious diseases, and it was responsible, for instance, for eradicating smallpox.

Our objective in this work is to consider and analyze the SIQR model properties by adding vaccination as a strategy to control the growth of the disease, study constant solution stability, calculate the basic reproductive number of disease propagation, study system controllability and the conditions to obtain the optimal control and apply the model in some numerical simulations (using MATLAB<sup>TM</sup> software) to reach some conclusions about the control method (vaccination).

This analysis, via theoretical modeling, is very important to complement the models that work with empirical data to compare, complement and adjust possible strategies to face the disease, given that empirical data is not entirely trustful, as can be seen in Liu et al. (2020), due to the number of unreported cases and the low number of tests in many countries.

## 2. SIQR mathematical model

In this section, we will describe the mathematical model used to study the spreading of COVID-19, its elements, and technical features.

In order to study the spread of infectious disease, we have to consider a population whose size varies with time, representing this population as  $N(t)$  – see equation (2.1). The mathematical model we will use is a SIQR compartmental model that divides the total population into four groups, such as susceptible ( $S(t)$ ), infected ( $I(t)$ ), quarantined ( $Q(t)$ ) and recovered (sometimes also called removed) ( $R(t)$ ), thus:

$$N(t) = S(t) + I(t) + Q(t) + R(t) \quad (2.1)$$

The model is the following system (2.2) of ordinary differential equations:

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = \Delta - \alpha SI - \mu S \\ \frac{dI}{dt} = \alpha SI - (\gamma + \mu + \eta)I \\ \frac{dQ}{dt} = (\eta - \epsilon)I - (\rho + \mu)Q \\ \frac{dR}{dt} = \gamma I + \rho Q - \mu R \end{cases} \quad (2.2)$$

Such as:

Table 1: Model parameters

Variable	definition
$T$	Time
$\alpha$	Effective contact rate between susceptible and infectious class
$\gamma$	Natural recovery rate
$\mu$	Natural death rate
$\rho$	Removed rate from quarantine to recovered
$\epsilon$	Disease-related death rate
$\eta$	Infectious class quarantine rate
$\Delta$	Population recruitment rate

The model works with the following dynamics: each compartment has an initial portion proportional to the population  $N$ , and if we want to encourage the start of the pandemic, for example, we can put  $Q(0) = 0$ ,  $R(0) = 0$  and even  $I(0) = I/N$  (representing patient zero). After that, the parameters will change the population amounts in each compartment at each time interval, adding or

subtracting some portions. In the first equation, the susceptible population is increased by  $\Delta$ , then some portion (determined by  $\alpha$ ) is subtracted from the susceptible and added to the infectious group. Still in the first equation, another portion is subtracted due to  $\mu$ , the natural death rate. The population in the second group is also decreased by  $\mu$  and by  $\gamma$  and  $\eta$ , natural recovery rate and quarantine rate, respectively. The third and fourth equations follow the same dynamics. In the third, a portion (due to  $\epsilon$ ) is subtracted, representing the disease-related death rate, and another portion is subtracted from there and added to the recovered group ( $\rho$ ), representing the quarantine recovery rate.

Figure 1 shows a schematic diagram showing the model dynamics:

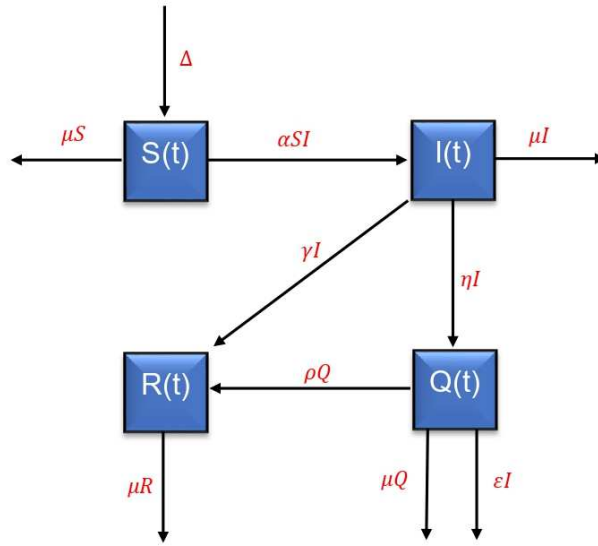


Figure 1: SIQR dynamic flow

Some important observations about this model are

- As already mentioned, this is a homogeneous-mixing model;
- It uses only one disease-related death rate (some models have different death-related rates for infected and quarantine individuals, such as Lisboa and Rodrigues (2023));

- This model does not consider an incubation period;
- It does not differentiate infected individuals with symptoms and without symptoms. They are all in the same group;
- In the quarantine compartment, isolated individuals are those who are infected, and it does not consider the isolation of healthy individuals.

More details about the SIQR model properties can be found in Lu et al. (2021), Ma et al. (2018) and Odagaki (2020). Lisboa and Rodrigues (2023) they use a slightly different SIQR model and even make simulations based on empirical data from local healthcare authorities.

Now we complete our model by adding vaccination as a control agent for the system:

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = \Delta - \alpha SI - \mu S - vS \\ \frac{dI}{dt} = \alpha SI - (\gamma + \mu + \eta)I \\ \frac{dQ}{dt} = (\eta - \epsilon)I - (\rho + \mu)Q \\ \frac{dR}{dt} = \gamma I + \rho Q - \mu R \end{cases} \quad (2.3)$$

In system (2.3) the  $v$  parameter represents the presence of vaccination, and the portion of the population who are vaccinated is subtracted from the susceptible group and added directly to the recovered group. It is easy to observe that the higher the percentage of vaccinated individuals, the lower the proportion of infected individuals and, consequently, the lower the number of disease-related death. We now proceed to a qualitative analysis of the system of differential equations, presented in (2.3).

### 3. Methodology

To study and analyze disease-free equilibrium and endemic equilibrium point stability, we used the Routh-Hurwitz criteria, Lyapunov method and La Salle's invariance principle.

To study and analyze control system controllability, we used Kalman criteria, studies the control problem with linear dynamics and quadratic objective function and used a Riccati equation to obtain the corresponding optimal controls. To solve the problems, we used the fourth order Runge-Kutta method, and in numerical simulations, we used MATLAB<sup>TM</sup> software.

## 4. Equilibrium points and basic reproductive number

In this section, we found the constant solutions (equilibrium points) of system (2.3) and showed the formula for the basic reproductive number.

We will call  $R_0$  the basic reproductive number of a disease, which indicates how contagious an infectious disease is. This number is very important to healthcare authorities and governments to devise strategies to combat the disease. To learn more about  $R_0$ , one can look at Achaiah et al. (2020) and Ma (2020).

**Theorem 4.1.** *The closed region  $\Omega = \left\{ (S, I, Q, R) \in \mathbb{R}_+^4 : N(t) \leq \frac{\Delta}{\mu} \right\}$  is positive invariant for the model (2.3).*

*Proof.* To initiate our analysis, we have to establish boundaries to our variables and parameters. All parameters described in table 1 are non-negative real numbers. For our variables, we used the derivative of  $N(t)$  in expression (2.1):

$$N'(t) = \Delta - \mu N - \epsilon I \leq \Delta - \mu N$$

Multiplying by integration factor  $e^{\mu t}$ :

$$N'(t)e^{\mu t} \leq \Delta e^{\mu t} - \mu N e^{\mu t}$$

$$N'(t)e^{\mu t} \leq \Delta e^{\mu t} - \mu N e^{\mu t}$$

Integrating both sides:

$$\int_0^t [N'(t)e^{\mu t} + \mu N e^{\mu t}] dt \leq \int_0^t \Delta e^{\mu t} dt$$

$$N(t)e^{\mu t} \Big|_0^t \leq \Delta \frac{e^{\mu t} - 1}{\mu} \Big|_0^t$$

$$e^{\mu t} N(t) - N(0) \leq \Delta \left( \frac{e^{\mu t} - 1}{\mu} \right)$$

$$N(t) \leq N(0)e^{-\mu t} + \frac{\Delta}{\mu}(1 - e^{-\mu t})$$

When  $x \rightarrow \infty$ , we have:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} Sup[N(t)] = \frac{\Delta}{\mu}$$



This shows us that we have to study the problem in region  $D$ :

$$D = \left\{ (S, I, Q, R) \mid S \geq 0, I \geq 0, Q \geq 0, R \geq 0, S + I + Q + R \leq \frac{\Delta}{\mu} \right\}$$

□

#### 4.1. Positivity and boundedness

**Theorem 4.2.** *Let  $(S(0), I(0), Q(0), R(0))$  be non negative initial conditions, then the solutions  $(S(t), I(t), Q(t), R(t))$  of the proposed model (2.3) are positive for all  $t > 0$ .*

*Proof.* Consider the following from the model's first equation (2.3)

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \Delta - \alpha SI - \mu S - vS \\ \frac{dS}{dt} &\geq -(\alpha I + \mu + v)S \\ S(t) &\geq Ce^{-(\alpha I + \mu + v)t} \end{aligned}$$

where  $C = e^{C_1}$  is a constant determined by the initial conditions. Now, if  $S(0)$  is the initial condition, then  $S(0) = C$ , so we can state that:

$$S(t) \geq S(0)e^{-(\alpha I + \mu + v)t}$$

Therefore, the solution  $S(t)$  is bounded above by  $S(0)$ .

By using the same justification, we can demonstrate that:

$$Q(t) \geq Q(0)e^{-(\rho + \mu)t}$$

and

$$R(t) \geq R(0)e^{-\mu t}, \text{ for all } t > 0.$$

We have proved the lemma technical by showing that  $I(t)$  is bounded. In fact:

**Lemma 4.3.** *Let the solution  $S(t)$  be bounded below by  $S(0)e^{-(\alpha I(t) + \mu + v)t}$  for all  $t > 0$ , where  $S(0)$  is the initial condition. Then, the solution  $I(t)$  of the differential equation*

$$\frac{dI}{dt} = \alpha SI - (\gamma + \mu + \eta)I$$

*is bounded for all  $t > 0$ .*

*Proof.* We are given the constraint that  $S(t) \geq S(0)e^{-(\alpha I(t)+\mu+v)t}$ . This constraint means that the  $S(t)$  value will never decrease below  $S(0)e^{-(\alpha I(t)+\mu+v)t}$ . Under this condition, any increase in  $I(t)$  that would cause  $S(t)$  to decrease below the specified limit contradicts the imposed constraint on the  $S(t)$  dynamics. This is a direct consequence of the interdependence between  $S(t)$  and  $I(t)$ , as described by equations (2.3). Therefore, the solution  $I(t)$  is bounded, ensuring that  $S(t)$  remains above the specified limit for all  $t > 0$ .  $\square$

This demonstrates that the solution of system (2.3) is positive for all  $t > 0$ . As a result, the model is epidemiologically significant and mathematically placed in the  $\Omega$  domain.  $\square$

By setting the right side of system (2.3) to zero, we have:

$$\begin{cases} \Delta - \alpha SI - \mu S - vS = 0 \\ \alpha SI - (\gamma + \mu + \eta)I = 0 \\ (\eta - \epsilon)I - (\rho + \mu)Q = 0 \\ \gamma I + \rho Q - \mu R = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

We established the existence of a disease-free constant solution and an endemic constant solution:

**Theorem 4.4.** *For system (4.4), there is always a disease-free equilibrium  $E_0$ , and there is also a unique endemic equilibrium  $E^*$ .*

*Proof.* By observing the second equation in system (4.4), we have the product:

$$I[\alpha S - (\gamma + \mu + \eta)] = 0 \quad (4.5)$$

If we have  $I = 0 \Rightarrow Q = 0$ ,  $S = \frac{\Delta}{\mu+v}$  and  $R = 0$

Thus, the point  $E_0 = \left(\frac{\Delta}{\mu+v}, 0, 0, 0\right)$  is a solution called free-disease solution.

If  $[\alpha S - (\gamma + \mu + \eta)] = 0$ , then:

$$S^* = \frac{\gamma + \mu + \eta}{\alpha}$$

By replacing  $S^*$  in the first equation of (4.4), we have:

$$\Delta - (\gamma + \mu + \eta) \left( I^* + \frac{\mu + v}{\alpha} \right) = 0$$

$$I^* = \frac{\Delta}{\gamma + \mu + \eta} - \frac{\mu + v}{\alpha}$$

$$I^* = \frac{\mu + v}{\alpha} \left( \frac{\Delta}{\mu + v} \frac{\alpha}{\gamma + \mu + \eta} - 1 \right)$$

By proceeding in the same way in the third and fourth equations, we have:

$$Q^* = \frac{(\eta - \epsilon)I^*}{\rho + \mu}$$

$$R^* = \frac{\gamma I^* + \rho Q^*}{\mu}$$

$E^* = (S^*, I^*, Q^*, R^*)$  is called endemic solution.  $\square$

By looking at expression of  $I^*$ , it is important to note that equilibrium point  $E^*$  only occurs if:

$$\left( \frac{\Delta}{\mu + v} \frac{\alpha}{\gamma + \mu + \eta} - 1 \right) > 1$$

Thus, we defined:

**Definition 4.5.** The basic reproduction number for system (2.3), denoted by  $R_0$ , is given as:

$$R_0 = \left( \frac{\Delta}{\mu + v} \frac{\alpha}{\gamma + \mu + \eta} \right). \quad (4.6)$$

which represents the mean number of new infections generated by an infectious case in a susceptible population.

Expression (4.6) is essential to system (2.3). If  $R_0 > 1$ , then the solution converge to the endemic equilibrium. On the other hand, if  $R_0 < 1$ , then the solution converge to free-disease equilibrium.

The  $R_0$  value for COVID-19 is estimated to be between 1.9 and 6.5 according to Achaiah et al. (2020).

## 5. Equilibrium point stability

In this section, we will state and prove the theorems that establish the stability of the solutions found in the previous section.

**Theorem 5.1.** *If  $R_0 < 1$ , disease-free equilibrium  $E_0$  of system (2.3) is locally asymptotically stable. If  $R_0 > 1$ , the disease-free equilibrium  $E_0$  is unstable.*

*Proof.* The Jacobian matrix of system (2.3) at  $E_0$  is:

$$J(E_0) = \begin{bmatrix} -\mu - v & -\frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha\Delta}{\mu+v} - (\gamma + \mu + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix}$$

The four eigenvalues of matrix  $J(E_0)$  are:

$$\lambda_1 = -\mu - v, \lambda_2 = \frac{\alpha}{\gamma + \mu + \eta}(R_0 - 1), \lambda_3 = -(\rho + \mu), \lambda_4 = -\mu$$

If  $R_0 < 1 \Rightarrow \lambda_2 < 0$ , therefore, all eigenvalues have negative real parts and  $E_0$  is locally asymptotically stable. If  $R_0 > 1 \Rightarrow \lambda_2 > 0$ , thus  $E_0$  is unstable.  $\square$

**Theorem 5.2.** *If  $R_0 < 1$ , the disease-free equilibrium  $E_0$  of the system (2.3) is globally asymptotically stable.*

*Proof.* Consider the following Lyapunov function:

$$\mathcal{L}(t) = I(t)$$

By calculating the derivative of  $\mathcal{L}(t)$  along the positive solution of system (2.3), we have that:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} \right|_{(3)} &= \left. \frac{dI}{dt} \right|_{(3)} = \alpha SI - (\gamma + \mu + \eta)I \\ &= [\alpha S - (\gamma + \mu + \eta)]I \\ &= \left[ \alpha \frac{\Delta}{\mu + v} - (\gamma + \mu + \eta) \right] I \\ &= [(\gamma + \mu + \eta)(R_0 - 1)]I \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

Furthermore,  $\mathcal{L}' = 0$  only if  $I = 0$ . The maximum invariant set in  $\{(S, I, Q, R) | \mathcal{L}' = 0\}$  is the singleton  $E_0$ . When  $R_0 < 1$ , according to La Salle's invariance principle, we have that:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} I(t) = 0$$

Then, we obtain the limit equations of system (2.3):

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = \Delta - \mu S - vS \\ \frac{dQ}{dt} = -(\rho + \mu)Q \\ \frac{dR}{dt} = \rho Q - \mu R \end{cases}.$$

Thus, disease-free equilibrium is globally attractive in region  $D$ . Therefore, disease-free equilibrium of system (2.3) is globally asymptotically stable when  $R_0 < 1$ .  $\square$

**Theorem 5.3.** *If  $R_0 > 1$ , endemic equilibrium  $E^*$  of system (2.3) is locally asymptotically stable.*

*Proof.* The Jacobian matrix of system (2.3) at  $E^*$  is:

$$J(E^*) = \begin{bmatrix} -\alpha I^* - \mu - v & -\alpha S^* & 0 & 0 \\ \alpha S^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix}$$

The two eigenvalues of matrix  $J(E^*)$  are:

$$\lambda_3 = -(\rho + \mu), \lambda_4 = -\mu$$

The other two eigenvalues are also the eigenvalues of the following matrix:

$$J^*(E^*) = \begin{bmatrix} -(\alpha I^* + \mu + v) & -\alpha S^* \\ \alpha S^* & 0 \end{bmatrix}$$

which has the characteristic polynomial:

$$\lambda^2 + (\alpha I^* + \mu + v)\lambda + \alpha^2 S^{*2} = 0$$

which has all coefficients positive. By applying the Routh-Hurwitz criterion, we obtained that all eigenvalues of matrix  $J(E^*)$  have negative real parts and endemic equilibrium  $E^*$  is locally asymptotically stable.  $\square$

**Theorem 5.4.** *If  $R_0 > 1$ , endemic equilibrium  $E^*$  of system (2.3) is globally asymptotically stable.*

*Proof.* If  $R_0 > 1$  we have that endemic equilibrium point values are given by

$$E^* = \left( \frac{\gamma + \mu + \eta}{\alpha}, \frac{\mu + v}{\alpha}(R_0 - 1), \frac{(\eta - \epsilon)I^*}{\rho + \mu}, \frac{\gamma I^* + \rho Q^*}{\mu} \right).$$

Consider the following Liapunov function:

$$\mathcal{L}(t) = \frac{1}{2} [(S - S^*) + (I - I^*) + (Q - Q^*) + (R - R^*)]^2.$$

By calculating the derivative of  $\mathcal{L}(t)$  with respect to  $t$ , we have that

$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = [(S - S^*) + (I - I^*) + (Q - Q^*) + (R - R^*)] \frac{d}{dt} [S + I + Q + R],$$

since  $N(t) = S + I + Q + R$ , and according to Theorem 4.1, we have  $N'(t) \leq (\Delta - \mu N)$  and consequently  $N(t) \leq \frac{\Delta}{\mu}$ . So,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}}{dt} &= [(S - S^*) + (I - I^*) + (Q - Q^*) + (R - R^*)] \frac{dN}{dt} \\ &\leq [(S - S^*) + (I - I^*) + (Q - Q^*) + (R - R^*)] (\Delta - \mu N) \\ &\leq (N - \frac{\Delta}{\mu})(\Delta - \mu N) \end{aligned}$$

Finally, we have:

$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} \leq -\frac{1}{\mu}(\Delta - \mu N)^2.$$

We can clearly determine that  $\mathcal{L}'(t)$  is negative definite and  $\mathcal{L}(t)$  is positive definite. Furthermore,  $\frac{d\mathcal{L}}{dt} = 0$  if and only if  $S = S^*, I = I^*, Q = Q^*, R = R^*$ . Therefore, the largest compact invariant set of  $\{\mathcal{L}'(t) = 0\}$  is the singleton  $E^*$ . This shows that, according to the classical Lyapunov and La Salle's invariance principle,  $E^*$  is globally asymptotically stable. Thus, system (2.3) has a globally asymptotically stable solution  $(S^*, I^*, Q^*, R^*)$ .  $\square$

## 6. Finite dimensional linear system control

Let  $T > 0$  be a real fixed number. We should consider the following finite dimensional system:

$$\begin{aligned} x'(t) &= Ax(t) + Bu(t), \quad t \in [0, T] \\ x(0) &= x_0, \end{aligned} \tag{6.7}$$

where  $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ,  $B \in \mathbb{R}^{n,m}$  are a real matrix, and  $x_0$  is a vector in  $\mathbb{R}^n$ . The function  $x : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$  represents the state, and  $u : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^m$ , the control. Both are vector functions of  $m$  and  $n$  components, respectively, depending exclusively on time  $t$ .

Given an initial datum  $x_0 \in \mathbb{R}^n$  and a vector function  $u \in L^1([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , system (6.7) has a unique solution  $C([0, T]; \mathbb{R}^n)$  characterized by the variation of constants formula:

$$x(t) = e^{At}x_0 + \int_0^t e^{A(t-s)}Bu(s)ds, \quad \forall t \in [0, T].$$

### 6.1. Kalman's controllability rank condition

The following classical result is due to Micu and Zuazua (2004) and gives a complete answer to the problem of exact controllability of finite dimensional linear systems. It shows, in particular, that the control time is irrelevant.

We considered that  $A \in \mathbb{R}^{4,4}$  is the Jacobian matrix of system (2.2) at  $E_0$  without control perturbation;  $B \in \mathbb{R}^{4,2}$  is a real matrix; and  $x_0$  is a vector in  $\mathbb{R}^4$ . The function  $x : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^4$  represents the state, and  $u : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$ , the control. Both are vector functions of 4 and 2 components, respectively, depending exclusively on time  $t$ . We will use the shorthand notation  $(A, B)$  to denote control system (6.7).

**Definition 6.1.** A system  $(A, B)$ , for which the Kalman criterion condition is satisfied, is termed completely controllable.

**Theorem 6.2.** System (6.7) is completely controllable in some time  $T$  if and only if

$$\text{rank}[B, AB, A^2B, A^3B] = 4.$$

Consequently, if system (6.7) is controllable in some time  $T > 0$ , it is controllable in any time.

*Proof.* In fact, from (6.7), we have

$$A = \begin{bmatrix} -\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\gamma + \mu + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix}$$

and

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

with  $\mu$ ,  $\gamma$ ,  $\eta$ ,  $\epsilon$  and  $\rho$  being positive constants. To determine system controllability, we calculated the controllability matrix  $W_c = [B, AB, A^2B, A^3B]$ . Consequently, we have

$$\text{rank } W_c = 4.$$

Therefore, the system is controllable.

In conclusion, **Algorithm 1** shows the matrix calculation.

**Algorithm 1.** Solving the matrix  $W_c$

1: **Constant values**

2:  $\mu = 0.02$ ;

3:  $\alpha = 0.2$ ;

4:  $\Delta = 0.2$ ;

5:  $\gamma = 0.1$ ;

6:  $\eta = 0.2$ ;

7:  $\epsilon = 0.1$ ;

8:  $\rho = 0.3$ ;

9: **Definition of matrix A**

10:  $A = [-\mu, 0, 0, 0; 0, -(\gamma + \mu + \eta), 0, 0$ ;

11:  $0, \eta - \epsilon, -(\rho + \mu), 0$ ;

12:  $0, \gamma, \rho, -\mu]$ ;

13: **Definition of matrix B**

14:  $B = [1 \ 0; 0 \ 1; 0 \ 0; 0 \ 0]$ ;

15: **Controllability check**

16:  $W_c = [B, AB, A^2B, A^3B]$ ;

17:  $\text{rank}_{W_c} = \text{rank}(W_c)$ ;

18: **Show the position of the  $W_c$  matrix**

19:  $\text{disp}(['\text{Posi\c{c}o da matriz } W_c: ', \text{num2str}(\text{rank}_{W_c})])$

□

Figure 2 shows, that the number of columns in Matrix  $W_c$  equals the order of the system, indicating complete controllability. However, columns 1



and 2 exhibit singular values significantly different from zero, suggesting their importance in system controllability. Thus, the presence of these significant singular values implies that columns 1 and 2 of the controllability matrix are crucial for system controllability.

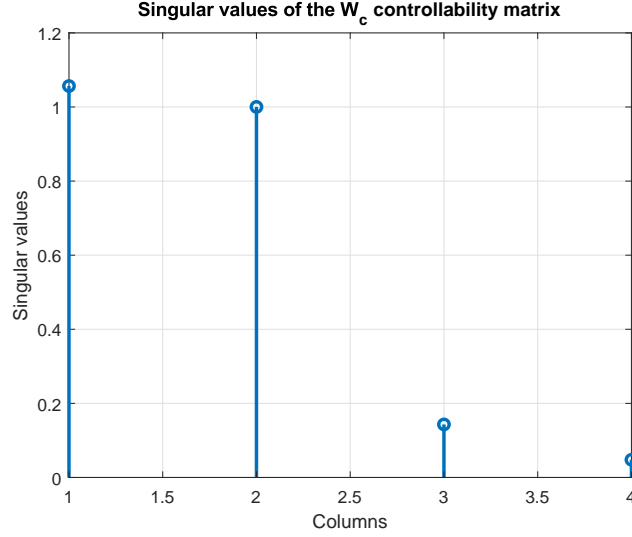


Figure 2: Controllability matrix

In the context of working with an epidemiological model that provides insights into the spread of COVID-19, it is highly advantageous to employ output feedback and State Feedback Strategies to modify the free system dynamics, aiming to achieve properties such as full controllability, asymptotic stability, BIBO-stability, etc. At this stage of the research, we are interested in demonstrating that, in the case of autonomous linear control system, given  $A \in \mathbb{R}^{n,n}$  and  $B \in \mathbb{B}^{n,m}$ , we have:

$$x' = Ax + Bu. \quad (6.8)$$

We can utilize the state feedback strategy, where we assume that the control  $u$  is derived from the state  $x$  through a linear law, denoted as

$$u = -Fx, \quad (6.9)$$

where  $F \in \mathbb{R}^{m,n}$  is a state feedback *Gain Matrix*. By replacing them (6.8), we

obtained:

$$x' = (A + BF)x.$$

The subsequent outcome facilitates our examination of controllability concerns in the presence of disturbances within a completely controllable autonomous system.

**Theorem 6.3.** *Let  $(A, B)$  be a completely controllable autonomous system. Then, for every matrix  $F \in \mathbb{R}^{2,4}$ , system  $(A + BF, B)$  is also completely controllable.*

*Proof.* Note that

$$A = \begin{bmatrix} -\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 - (\gamma + \mu + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix}$$

and

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Given

$$F = - \begin{bmatrix} v & \frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

by (6.9) assuming that the control  $u$  is

$$u = - \begin{bmatrix} v & \frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S \\ I \\ Q \\ R \end{bmatrix},$$

that result in

$$u = \begin{bmatrix} -vS - \frac{\alpha\Delta}{\mu+v}I \\ \frac{\alpha\Delta}{\mu+v}I \end{bmatrix}.$$

Consequently, we obtain

$$(A + BF) = \begin{bmatrix} -\mu - v & -\frac{\alpha\Delta}{\mu+v} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha\Delta}{\mu+v} - (\gamma + \mu + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix},$$

noting that  $(A + BF)$  is the Jacobian matrix of system (2.3) at point  $E_0$  with the presence of control perturbation. To prove the given theorem, we will use the Kalman criterion for linear system controllability.

The Kalman criterion states that a linear system is completely controllable if its controllability matrix:

$$\mathcal{C} = [B \quad AB \quad A^2B \quad A^3B]$$

And has full rank, meaning its rank equals state-space dimension.

Now, we will use the Kalman criterion to prove the given theorem. Given a system  $(A, B)$  that is completely controllable, we know that the controllability matrix  $\mathcal{C}$  has full rank, which means the rank of  $\mathcal{C}$  equals state-space dimension.

The dimension state-space dimension equals 4. Then, the rank of  $\mathcal{C}$  is 4. Now, considering system  $(A + BF, B)$ ,  $F$  is a control matrix.

The controllability matrix of this system is:

$$\mathcal{C}_{\text{new}} = [B \quad (A + BF)B \quad (A + BF)^2B \quad (A + BF)^3B]$$

Now, we need to show that the rank of  $\mathcal{C}_{\text{new}}$  equals to 4, i.e., full rank. If we can show this, then system  $(A + BF, B)$  will be completely controllable. To do this, we will use the property that the rank of a matrix does not change when we multiply the matrix by another left-invertible matrix. We will use this property to show that the rank of  $\mathcal{C}_{\text{new}}$  equals 4.

We will consider the matrix  $T$  defined as:

$$T = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ F & I & 0 & 0 \\ F^2 & 2BF & I & 0 \\ F^3 & 3BF^2 & 3B(F^2 + BF + I) & I \end{bmatrix}$$

where  $I$  is the identity matrix. It is easy to see that  $T$  is an invertible matrix.

Furthermore, if we multiply  $T$  by the matrix  $\mathcal{C}_{\text{new}}$ , we obtain  $\mathcal{C}$ .

$$T\mathcal{C}_{\text{new}} = [B \quad AB \quad A^2B \quad A^3B] = \mathcal{C}$$

Since  $\mathcal{C}$  has full rank (equal to  $n$ ), then  $T\mathcal{C}_{\text{new}}$  also has full rank.

Therefore, the rank of  $\mathcal{C}_{\text{new}}$  equals 4, and thus system  $(A + BF, B)$  is completely controllable.

Thus, using the Kalman criterion, we have proven that, for every matrix  $F$ , system  $(A + BF, B)$  is completely controllable, provided that  $(A, B)$  is

completely controllable. In conclusion, **Algorithm 1** shows the calculation of the matrix  $(A + BF)$  with the appropriate changes to the input values. This concludes the proof of the theorem.  $\square$

## 7. Optimal control model

In this section, we associated the control problem (2.3) with a function that is intrinsically related to solving the system problem. This relationship is described through the optimality principle of a dynamic system. We wanted to find a control function that minimizes or maximizes a cost functional while satisfying the constraints imposed by the system. Thus, the following optimal control variable is given: the variable  $u(t)$  represents vaccination, as seen previously. In this context, optimal control theory provides a powerful framework for designing control strategies that minimize the spread of infectious diseases while considering various constraints and objectives. By formulating the problem as an optimization task, optimal control theory allows us to determine the most effective allocation of control measures over time to achieve specific objectives, such as minimizing the number of infections, reducing economic losses, or optimizing the use of healthcare resources.

We treated a special case in optimal system control, in which state differential equations are linear in  $x$  and  $u$  and the objective functional is quadratic.

Let  $T > 0$  be a fixed real number, given  $t_0 \in [0, T]$  and  $x_0 \in \mathbb{R}^n$ , considering a dynamic system described by the following differential equations:

$$\begin{aligned} x'(t) &= Ax(t) + Bu(t), \quad t \in [0, T] \\ x(t_0) &= x_0, \end{aligned} \quad (7.10)$$

considering cost functional

$$J(u, x) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^T x^T(t)G(t)x(t) + u^T(t)R(t)u(t)dt \right] \quad (7.11)$$

in which the matrices  $G(t)$  and  $R(t)$  are sizes  $n \times n$ ,  $m \times m$ , respectively, with  $G(t)$  being positive semidefinite and  $R(t)$  being positive definite for all  $t \in [0, T]$ . The positive definite property guarantees that  $R(t)$  is invertible. The superscript  $\mathbf{T}$  refers to transpose of a matrix.

Considering the set of admissible control

$$\mathcal{U}_{ad} := \{u \in L^1([0, T]; \mathbb{R}^m); u(t) \in \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^m \text{ a.e in } [t_0, T].\}$$

**Definition 7.1.** The optimal value function refers to the application  $V : [0, T] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , defined by

$$V(t_0, x_0) := \inf \{J(t_0, x_0; u); u \in \mathcal{U}_{ad}\}.$$

**Definition 7.2.** The optimal control problem is to find, for a given initial condition  $x_0$ , the control  $u^* \in \mathcal{U}_{ad}$  that minimizes the cost functional (7.11). Furthermore,

$$V(t_0, x_0) = J(t_0, x_0; u^*).$$

With the objective of illustrating the ideas presented here, we considered the control problem (7.10) to (7.11). The Hamiltonian becomes

$$H(t, x, u, \lambda) := \frac{1}{2}x^T(t)Gx(t) + \frac{1}{2}u^T Ru + \lambda^T(Ax(t) + Bu).$$

From the Hamiltonian, we have the optimality equation, derived from the term  $u^T Ru$  with respect to  $u$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} (u^T Ru) &= \frac{\partial}{\partial u} \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i R_{ij} u_j \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial u} \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i \frac{1}{2} (R_{ij} u_j + R_{ji} u_i) \right) \\ &= \frac{1}{2} (R + R^T) u \\ &= Ru \end{aligned}$$

Derived from the term  $\lambda^T(Ax(t) + Bu)$ , with respect to  $u$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} (\lambda^T(Ax(t) + Bu)) &= \frac{\partial}{\partial u} (\lambda^T Bu) \\ &= B^T \lambda \end{aligned}$$

Therefore, the partial derivative of  $H$  with respect to  $u$  is:

$$\frac{\partial H}{\partial u} = Ru + B^T \lambda,$$

hence it follows that

$$u^* = -R^{-1}B^T \lambda$$

we have that

$$\mathcal{H}(t, x, \lambda) = \min_u \in \mathcal{X} \left\{ \langle \lambda^T, Ax + Bu \rangle + \frac{1}{2} [x^T G x + u^T R u] \right\},$$

using the *Hamilton-Jokobi-Bellman* optimality equation

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \left\langle \frac{\partial V}{\partial x}, Ax \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial V}{\partial x}, BR^{-1}B^T \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle + \frac{1}{2} \langle x^T, Gx \rangle = 0$$

We will now make the most important hypothesis-driven development, which allows us to determine  $V$ . Assuming that the value function for the linear quadratic problem has the form:

$$V(t, x) := \frac{1}{2} \langle x, P(t)x \rangle, \quad (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}^n,$$

assuming that  $P : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{n,n}$  is continuously differentiable, as the cost function is non-decreasing, and we can state that  $P(t)$  is positive defined for all  $t \in [0, T]$ . The assumptions of symmetry for  $G$ ,  $R$  are buried in the above calculations. Instead of using  $\lambda$ , we found a matrix function  $P(t)$  such that  $\lambda(t) = \frac{\partial V}{\partial x} = P(t)x(t)$ .

Substituting the expression for  $V$  into the *HJB* equation, we obtained

$$\langle x, Y(t)x \rangle = 0,$$

in which

$$Y(t) = P'(t) + P(t)A + A^T P(t) - P(t)BR^{-1}B^T P(t) + G.$$

the problem now is to find a matrix function  $P$  such that  $Y(t) \equiv 0$ . The following theorem guarantees this result.

**Theorem 7.3.** *Let  $P(t)$  be a continuous and differentiable symmetric matrix with respect to time  $t$  on an interval  $[0, T]$ , considering the Riccati equation:*

$$\frac{\partial P(t)}{\partial t} = -A^T P(t) - P(t)A + P(t)BR^{-1}B^T P(t) - G$$

*in which  $A$  is a constant matrix of size  $n \times n$ ;  $B$  is a constant matrix of size  $n \times m$ ;  $R$  is a positive definite matrix of size  $m \times m$ ; and  $G$  is a constant symmetric matrix of size  $n \times n$ . Optimal control is the form*

$$u^* = -R^{-1}B^T \lambda.$$

*Then, for each initial condition  $P(0) = P_0$ , there is a unique solution  $P(t)$  to the Riccati equation defined by  $[0, T]$ , associated with control systems (7.10) to (7.11).*

Simple ODE techniques can be used to solve the problem because, once the Riccati matrix equation for  $P$  is solved, the control is given by an equation in  $x$ , and  $x$  is given by an ODE in  $u$ . The proof for this theorem can be seen in detail in Baumeister and Leitão (2008).

We considered the control system (7.10), whose governing matrix is

$$A = \begin{bmatrix} -\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\gamma + \mu + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & (\eta - \epsilon) & -(\rho + \mu) & 0 \\ 0 & \gamma & \rho & -\mu \end{bmatrix}$$

The control operator is assumed to be

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

and 
$$R = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

The (7.10) system is added to a control measure to decrease COVID-19 transmission, in which the optimal control policy  $u^* = -R^{-1}B^T\lambda$  determines how the system should be controlled to minimize the cost functional. The main objective of optimal control is to reduce the number of individuals susceptible  $S(t)$  to and infected  $I(t)$  with COVID-19 in the population and the overall cost of controlling the disease dynamics. Then, the cost functional (7.11) can be rewritten as the following eq. (7.12)

$$J(u, x) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^T (S^2 + I^2 + u^2) dt \right], \quad (7.12)$$

with,  $u^* = -[1/2\lambda \ 1/2\lambda]^T$ .

By solving the Riccati equation for internal control  $u^*(t)$ , we obtained eq. (7.13)

$$\frac{\partial P(t)}{\partial t} = -A^T P(t) - P(t)A + P(t)BR^{-1}B^T P(t) - G. \quad (7.13)$$

For this example, we specified the ingredients as follows:  $T = 30$ ;  $\mu = 0.02$ ;  $\alpha = 0.2$ ;  $\Delta = 0.2$ ;  $\gamma = 0.1$ ;  $\eta = 0.2$ ;  $\epsilon = 0.1$ ;  $\rho = 0.3$ ;  $\lambda = 1.5$ . And by using the fourth order Runge-Kutta method we solved the equation, as shown figure 3.

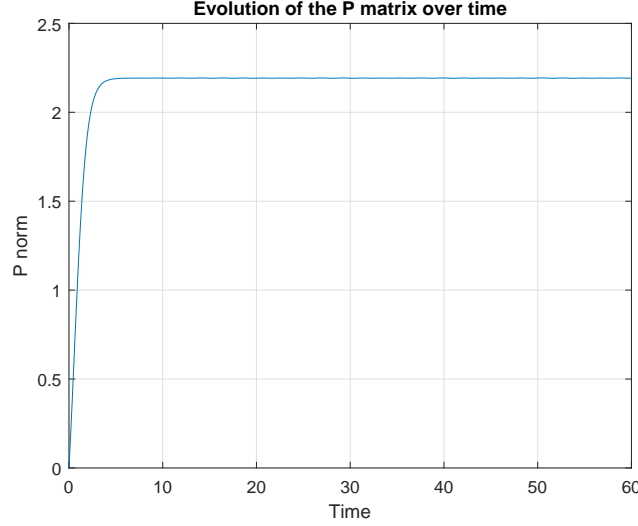


Figure 3: Evolution of the P norm.

The  $P(t)$  matrix, obtained as the solution of the Riccati equation, is directly related to optimal control. This tool is used to find the control input that minimizes system costs over time. The  $P(t)$  matrix norm in the context of the Riccati equation provides information about controlled system stability, indicating whether or not it has stabilized, as it converges to a constant value over time. The graph shows, according to figure 3, this evolution by indicating how optimal control also converges and ensures both stability and adequate performance for the entire controlled system. In the next section, we will show optimal control numerically.

## 8. Numerical simulations

We will see numerical simulations in this section to demonstrate the model dynamic characteristics, equilibrium point stability and optimal control.



Using MATLAB<sup>TM</sup> software, we performed numerical simulation in model (2.3) and estimated the basic values of the model parameters. We will see the results of stabilization to endemic and disease-free equilibrium points. We showed how to solve the suggested optimal control problem. We simulated and compared different situations to control the spread of COVID-19. The results of simulation are shown in the following diagram.

In system (2.3),  $\gamma = 0.1$ ,  $\mu = 0.02$ ,  $\rho = 0.3$ ,  $\epsilon = 0.1$ ,  $\eta = 0.2$ ,  $\Delta = 0.2$ , and  $v = 0.05$ . When  $\alpha = 0.08$ , we have  $R_0 = 0.7143 < 1$ , and with the initial condition  $(9, 1, 0, 0)$ , the solution converged to the free-disease solution  $(2.8571, 0, 0, 0.0041)$ . Figure 4 shows numerical simulation. From Theorem 5.2, we noticed that  $E_0$  is globally asymptotically stable.

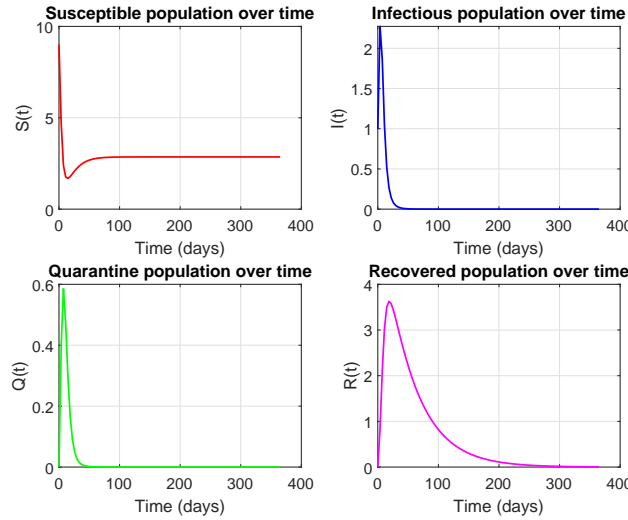
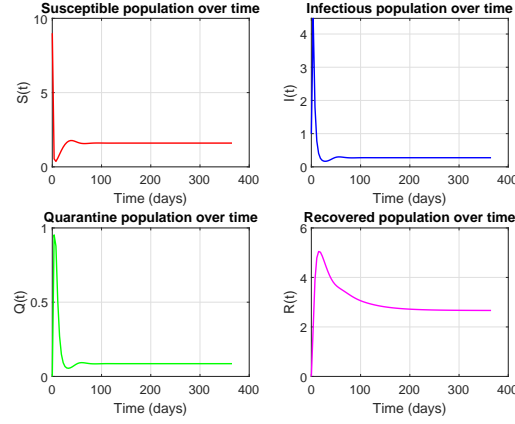
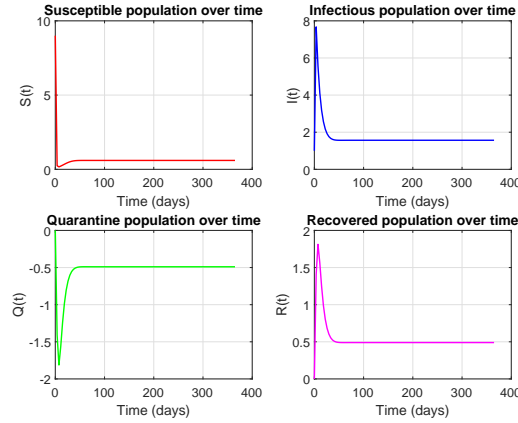


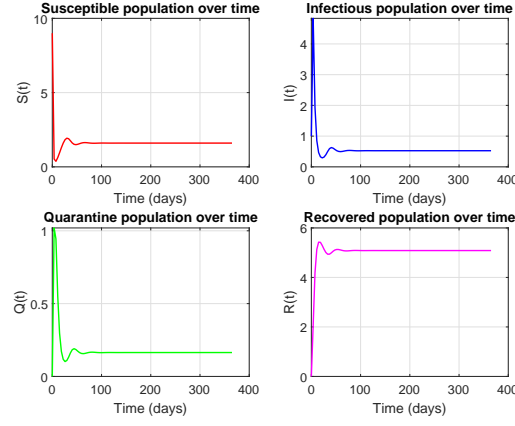
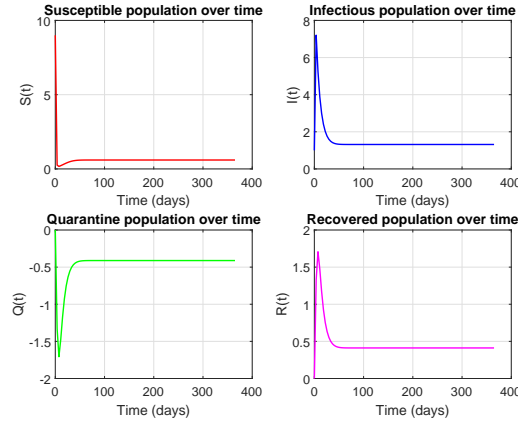
Figure 4: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$

In system (2.3),  $\gamma = 0.1$ ,  $\mu = 0.02$ ,  $\rho = 0.3$ ,  $\epsilon = 0.1$ ,  $\eta = 0.2$ ,  $\Delta = 0.2$ , and  $v = 0.05$ . When  $\alpha = 0.2$ , we have  $R_0 = 1.7857 > 1$ , and with the initial condition  $(9, 1, 0, 0)$ , the solution converges to the endemic disease solution  $(1.6, 0.275, 0.0859, 2.6660)$ . Figure 5 shows numerical simulation. From Theorem 5.4, we noticed that  $E^*$  is globally asymptotically stable.

Figure 5: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$ 

Additionally, we set the same initial conditions and parameters as in the previous simulation, and we had the following examples. The quarantine-free ( $\eta = 0$ ) and vaccination-free ( $v = 0$ ) model reproduction number  $R_0$  is  $16.6667 > 1$ , as shown in numerical simulation figure 6. The reproduction number  $R_0$  vaccination-free ( $v = 0$ ) model is  $R_0 = 6.2500 > 1$ , as shown in numerical simulation in figure 7. The reproduction number  $R_0$  quarantine-free ( $\eta = 0$ ) model is  $R_0 = 4.7619 > 1$ , as shown in numerical simulation in figure 8.

Figure 6: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$  with  $R_0 = 16.6667 > 1$

Figure 7: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$  with  $R_0 = 6.2500$  and  $v = 0$ Figure 8: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$  with  $R_0 = 4.7619$  and  $\eta = 0$ 

Moreover, we have the evolution of the state variables without the presence of the optimal control strategy. Considering the Riccati equation (7.13),  $T = 30$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $\mu = 0.02$ ,  $\rho = 0.3$ ,  $\epsilon = 0.1$ ,  $\eta = 0.2$ ,  $\Delta = 0.2$ , and  $v = 0.05$ . When  $\alpha = 0.2$ , we have  $R_0 = 1.7857 > 1$ , and with the initial condition  $(9, 1, 0, 0)$ , figure 9 shows numerical simulation.

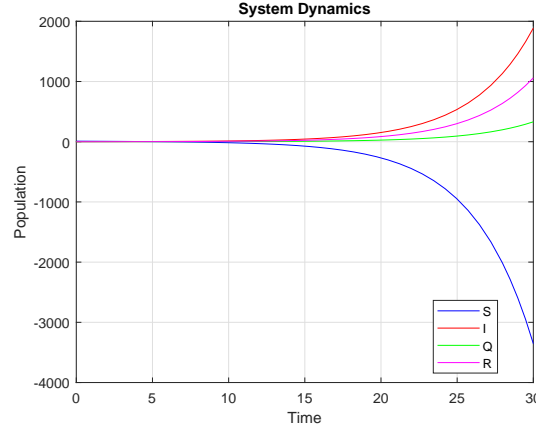


Figure 9: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$  without optimal control

In this next simulation, we will perform numerical simulations for an optimal control strategy given by theorem 7.3. Considering the Riccati equation (7.13),  $T = 180$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $\mu = 0.02$ ,  $\rho = 0.3$ ,  $\epsilon = 0.1$ ,  $\eta = 0.2$ ,  $\Delta = 0.2$ , and  $v = 0.05$  and  $\lambda = 0.5$ . When  $\alpha = 0.2$ , we have  $R_0 = 1.7857 > 1$ , and with the initial condition  $(9, 1, 0, 0)$ , figure 10 shows numerical simulation.

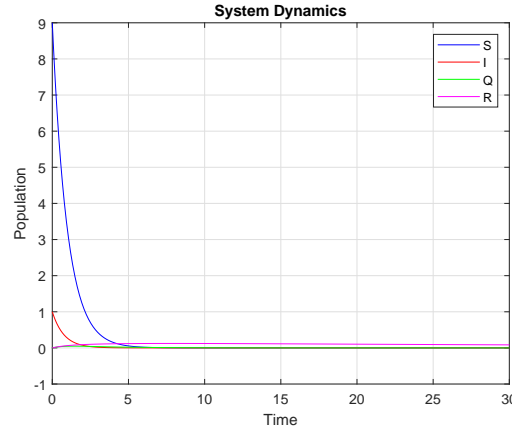


Figure 10: Variational curves of  $S$ ,  $I$ ,  $Q$ , and  $R$  with optimal control

## 9. Results

In this section, we will discuss and analyze the COVID-19 spread waves patterns presented in the numerical simulations previously. To do this analysis, we will take as a parameter the basic reproduction number  $R_0$ .

We have from Theorem 5.1 that if  $R_0 < 1$ , the solutions converge to disease-free equilibrium of system (2.3), as we can see in figure 4. This means that, when the number of newly infected  $I(t)$  is zero in the system, the disease-free equilibrium point occurs. This can occur when the number of individuals susceptible to  $S(t)$  is small as a result of vaccination or when the amount of infected  $I(t)$  recovered  $R(t)$  is small enough to prevent the disease from continuously spreading in the population. This confirms the fact that the system is also controllable (Theorem 6.3). Besides that, a system is controllable if, and only if it is stabilized (Micu and Zuazua (2004)).

On the other hand, when  $R_0 > 1$ , we have a system converging to endemic equilibrium solution of system (1.6, 0.275, 0.0859, 2.6660), as in figure 5. In system (2.3), the endemic stabilization point occurs when the number of people entering the  $I(t)$  compartment is equal to the number of people leaving the compartment for reasons of  $Q(t)$  quarantine,  $R(t)$  recovery, or death.

In other words, at endemic equilibrium point, the number of new cases is equal to the number of recovered or quarantined cases, thus providing a balance in the number of infected cases in the population over time. Actually,

$$\alpha SI = \mu I + \gamma I + \eta I = 0.088.$$

Note that  $R_0$  depends as much on  $v$  as on  $\eta$  and  $\frac{\partial R_0}{\partial v} > \frac{\partial R_0}{\partial \eta}$ . In fact,

$$\frac{\partial R_0}{\partial v} = \frac{\Delta \alpha}{(\mu + v)^2(\gamma + \mu + \eta)}$$

and

$$\frac{\partial R_0}{\partial \eta} = \frac{\Delta \alpha}{(\mu + v)(\gamma + \mu + \eta)^2} \quad (9.14)$$

in which  $\frac{\partial R_0}{\partial v} = 1.0449$  and  $\frac{\partial R_0}{\partial \eta} = 0.0234$ .

Continuing our analysis, we can see in the simulation presented in figure 7 that, when a system presents  $v = 0$  and  $\eta \neq 0$ , the number of reproductions increases approximately 1.3 more than when considered  $\eta = 0$  and  $v$ , with a 5% vaccination rate (simulation 8). We noticed that the number of basic reproduction increases very quickly when we consider  $v = 0$  and  $\eta = 0$  (simulation 6),

in which we do not consider any kind of control over the spread of the disease. From this, we concluded that the presence of the vaccine is more effective as a control strategy than just control of infectious individuals.

From the analysis, we noted that isolating infected individuals can be considered as a disease spread control strategy but as our main objective is to verify the effectiveness of the vaccine use strategy, we will take the isolation rate of constantly infected individuals equal to  $\eta$  and vary the population vaccination rate for optimal control simulations.

Finally we showed optimal control, taking into account 7.3, which provides us with an optimal control strategy  $u^* = -R^{-1}B^T\lambda$ , minimizing the functional cost (7.11), which gives us the system performance over time. Considering  $R_0 > 1$ , we have here a context of spread of the disease, so we analyzed this scenario without the presence of an optimal control strategy (figure 9). We can see how state variables are unstable, and it is only possible to obtain a system stability by increasing the percentage of the vaccinated population, i.e., from 35% of the population immunized we can maintain spread curves stable. On the other hand, when we used the optimal control strategy  $u^*$ , it was possible to see a better system performance and consequently a reduction in costs that we can obtain the same results with less effort in applying control (figure 10). Therefore, the vaccine presents itself as a state strategy to control system replenishment, effective in combating the spread of COVID-19.

## 10. Conclusion

In this article, we studied the behavior of COVID-19 spread by using a compartmental SIQR model, with vaccination as the main prevention strategy. We studied model equilibrium points and stability, controllability, and optimal control for the system, finally presenting some numerical simulations to support the theoretical results. From equilibrium points and stability analysis, we learned about two constant solutions: one was the disease disappearing quickly and the other continued to infect a small portion of the population, depending on the value of  $R_0$ . By using the simulations, we showed the behavior of system (2.3) and also learned that the presence of vaccination can decrease the basic reproductive number faster than the isolation of infectious individuals, eventually bringing the number of infections to endemic equilibrium. By applying optimal control strategies, it was possible to optimize the logistical costs of the

vaccine and reach endemic equilibrium more quickly.

We concluded this work by emphasizing that, for future work, this study can be carried out for the same models, combinations of varied control strategies, improving our knowledge about the behavior of this type of system and also our understanding of infectious diseases

## References

- Achaiah, N. C., Subbarajasetty, S. B., and Shetty, R. M. (2020).  $R_0$  and  $R_e$  of COVID-19: Can we predict when the pandemic outbreak will be contained? *Indian J. Crit. Care Med.*, 24(11):1125–1127.
- Baumeister, J. and Leitão, A. (2008). Introduction to theory of control and dynamic programming (in portuguese). In *Euclid's project*. IMPA, Rio de Janeiro.
- Brauer, F., Castillo-Chavez, C., and Feng, Z. (2019). Simple compartmental models for disease transmission. In *Mathematical Models in Epidemiology*, pages 21–61. Springer New York.
- Britton, T., Ball, F., and Trapman, P. (2020). A mathematical model reveals the influence of population heterogeneity on herd immunity to SARS-COV-2. *Science*, 396:846–849.
- Kermack, M. and Mckendrick, A. (1927). Contributions to the mathematical theory of epidemics. *Proceedings of the Royal Society*, 115A:700–721.
- Lisboa, S. A. and Rodrigues, L. R. S. (2023). Epidemiological model for building scenarios for the spread of COVID-19 in codó-MA. *Journal of Epidemiology and Infection Control (in Portuguese)*, 13(1):28–35.
- Liu, Z., Magal, P., Seydi, O., and Webb, G. (2020). Understanding unreported cases in the covid-19 epidemic outbreak in wuhan, china, and the importance of major public health interventions. *Biology*, 9(3):50.
- Lu, H., Ding, Y., Gong, S., and Wang, S. (2021). Mathematical modeling and dynamic analysis of siqr model with delay for pandemic covid-19. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 18:3197–3214.
- Ma, J. (2020). Estimating epidemic exponential growth rate and basic reproduction number. *Infectious Disease Modelling*, 5:129–141.

- Ma, Y., Liu, J., and Li, H. (2018). Global dynamics of an siqr model with vaccination and elimination hybrid strategies. *Mathematics*, 6(12):328.
- Micu, S. and Zuazua, E. (2004). An introduction to the controllability of partial differential equations. In *Quelques questions de théorie du contrôle*, T. Sari ed. Citeseer.
- Odagaki, T. (2020). Exact properties of SIQR model for COVID-19. *Physica A*, 564:125564.



# Utilizando agrupamento automático na identificação de campos vetoriais em sistemas p-fuzzy

Gislaine O. Queiroz,<sup>1</sup> João B. Florindo,<sup>2</sup> Estevão Esmi,<sup>3</sup>  
DMA, IMECC-Unicamp – 13.083-859, Campinas/SP.

**Resumo.** Este trabalho propõe uma alternativa para a realização de modelagem de sistemas dinâmicos, utilizando um sistema de base de regras *fuzzy* (SBRF), cujas regras são obtidas com o auxílio de um método de aprendizado de máquinas para clusterização, mais precisamente o método *K-means*.

**Palavras-chave:** Sistema de base de regras *fuzzy*; sistema dinâmico; aprendizado de máquinas.

## 1. Introdução

Propor uma modelagem para um campo vetorial de um sistema dinâmico não costuma ser uma tarefa fácil, pois há diversos obstáculos relacionados a incertezas intrínsecas do objeto de estudo. Deste modo, os Sistemas de Bases de Regras Fuzzy (SBRF) podem auxiliar na modelagem de campos vetoriais, por se tratar de uma ferramenta capaz de lidar com dados incertos e/ou parciais das dinâmicas estudadas. Esse tipo de abordagem de aproximar um campo vetorial parcialmente conhecido por um SBRF é denominada de sistemas parcialmente fuzzy ou, simplesmente, sistemas p-fuzzy (Barros et al., 2016). Uma outra vantagem de utilizar SBRF é que as regras dos sistemas podem ser interpretadas através de uma linguagem mais natural o que facilita a compreensão e a interdisciplinaridade entre especialistas de áreas diversas.

---

<sup>1</sup>g155579@unicamp.br

<sup>2</sup>florindo@unicamp.br

<sup>3</sup>eesmi@unicamp.br

Além disso, quando dispomos de dados, a elaboração do sistema de regras pode ser assistida pelo uso de técnicas adequadas para tratar estes dados, tal como o emprego dos algoritmos de aprendizado de máquinas.

Neste contexto, o presente estudo propõe automatizar a geração de regras, de modo que os conjuntos fuzzy (Zadeh, 1965) sejam devidamente delimitados com o auxílio do método de aprendizado de máquinas *K-means*, cabendo ao especialista analisar esses conjuntos fuzzy e lhes atribuir significado.

Assim, em posse de um conjunto de dados referentes a um sistema dinâmico, os mesmos são organizados visando obter a variável de estado de interesse ( $y$ ) e a sua derivada temporal  $\left(\frac{dy}{dt}\right)$ , resultando em um gráfico do tipo  $y \times \frac{dy}{dt}$ , cujos pontos são entradas do método de *K-means*.

Neste trabalho focaremos no SBRF do tipo Takagi-Sugeno-Kang (TSK), cujos antecedentes são conjuntos fuzzy e os consequentes são funções afins. Dado os agrupamentos produzidos pelo método *K-means*, determinamos os conjuntos fuzzy antecedentes utilizando a projeção dos agrupamentos obtidos no eixo horizontal do gráfico e, com o auxílio do método dos quadrados mínimos, os consequentes foram obtidos por retas que melhor se ajustam aos dados de cada grupo. Relacionando os conjuntos antecedentes e consequentes por regras *fuzzy* conjuntivas, obtem-se um SBRF do tipo TSK que estima o campo associado a dinâmica de  $y$ , isto é, que estima  $\frac{dy}{dt}$  dado o estado de  $y$ . Em seguida, através do método numérico de Euler, conseguimos plotar a solução do nosso sistema p-fuzzy. A fim de comparar a qualidade da nossa estratégia de gerar automaticamente a base de regras de um sistema p-fuzzy assistido por um método de aprendizagem de máquina, iremos comparar a solução do sistema p-fuzzy produzido com a solução original de um problema de valor inicial conhecido.

## 2. Estado da arte

Dentro da literatura existente relacionada aos assuntos abordados aqui, traremos alguns dentre os trabalhos mais interessantes e de maior relevância. Por exemplo, quanto a utilização de sistemas fuzzy para auxílio de tomada de decisões referente s COVID-19, em Arora et al. (2021) os sintomas de algumas características relevantes dos indivíduos foram utilizados como antecedentes fuzzy para um sistema de inferência fuzzy, a fim de avaliar a necessidade de tratamento médico e isolamento o mais cedo possível, apresentando 97,2% de

precisão.

Alguns trabalhos têm surgido na linha do fuzzy K-means, de modo a suavizar a interseção dos agrupamentos, permitindo que um elemento possa pertencer a mais de um grupo. Wang et al. (2023) utilizaram essa abordagem para realizar análise de comportamento de preservação de privacidade em redes inteligentes, tendo alcançado resultados semelhantes aos do método tradicional, centrado em dados independentes, além de permitir a preservação da privacidade dos participantes.

Dentre os trabalhos mais recentes que estão relacionados com a utilização de SBRF e com métodos de aprendizado de máquinas, podemos destacar duas abordagens muito interessantes.

Em Sharaff et al. (2023) temos a utilização da ferramenta VADER em conjunto com sistema não supervisionado baseado em regras fuzzy, para fins de classificação das avaliações. A ferramenta VADER (*Valence Aware Dictionary and sEntiment Reasoner*), consiste em uma biblioteca de processamento de linguagem natural, utilizada para fazer a análise de textos escritos.

Assim, tal ferramenta foi utilizada para realizar a classificação das avaliações realizadas na *Amazon Fine foods*, atribuindo a cada palavra uma categorização positiva e uma negativa, podendo estas serem alta, média ou baixa. Essas duas são relacionadas através de um sistema experimental não supervisionado baseado em regras fuzzy, que consiste em nove regras para classificar as avaliações em positivas ou negativas.

Alcañiz et al. (2023) faz um comparativo da utilização de algoritmos de aprendizado de máquinas em conjunto com outras metodologias, para realizar a predição de energia fotovoltaica. O estudo avalia publicações realizadas entre 2000 e meados de 2022 e dentre essas, a abordagem fuzzy apareceu apenas duas vezes, de modo que a única vez na qual foi empregada com o método de *K-means*, foi utilizada para incluir uma interseção gradativa entre dois clusteres.

Embora seja um recorte dos trabalhos que utilizam aprendizado de máquinas para predição, esse trabalho nos dá uma dimensão de como estudos envolvendo lógica fuzzy e aprendizado de máquinas são escassos, além de não usufruir da interpretabilidade fornecida por métodos não supervisionados para fazer análises fuzzy.

No geral, podemos notar que há uma lacuna em relação a trabalhos que ofereçam uma alternativa para automatizar a geração de regras, bem como de trabalhos que relacionam sistemas p-fuzzy e algoritmos de aprendizado de má-

quinas. Neste sentido, nosso trabalho visa preencher esses hiatos e se apresenta com alternativa para geração automática de regras fuzzy, para descrição de campos vetoriais de sistemas dinâmicos.

### 3. Sistemas p-fuzzy

Utilizaremos um Sistema de Base de Regras *Fuzzy* (SBRF), que consiste em um mapeamento do tipo  $\Phi(\cdot) = D(I(F(\cdot)))$ , em que  $F$  é o módulo de fuzzificação,  $I$  é o módulo de inferência e  $D$  o módulo de defuzzificação (Pedrycz e Gomide, 2007). No módulo de fuzzificação, contaremos com o método de inclusão canônica, que consiste em uma função que associa cada vetor  $x \in \mathbb{R}^n$  com o subconjunto *fuzzy*  $\{x\} \in \mathcal{F}(\mathbb{R}^n)$ .

Para o módulo de inferência, estamos tomando o método (TSK) de Takagi-Sugeno-Kang (Takagi e Sugeno, 1985), que obedecerá ao formato (3.1)

$$y = \frac{\sum_{j=1}^K w_j g_j(x_1, \dots, x_n)}{\sum_{j=1}^K w_j}, \quad \forall j = 1, \dots, K, \quad (3.1)$$

de modo que  $w_j$  indica o grau de pertinência de  $(x_1, \dots, x_n)$  no  $j$ -ésimo antecedente,  $g_j$  a  $j$ -ésima função abordada que, neste caso, são retas, com  $j = 1, \dots, K$ , sendo  $K$  o número de regras do SBRF.

Já para a defuzzificação, tomamos o método do centro de massa  $D(B)$  (Castro e Delgado, 1996). Mais precisamente, seja  $B$  um subconjunto *fuzzy*, no caso contínuo, o centro de massa  $D(B)$  é dado por

$$D(B) = \frac{\int_X x B(x) dx}{\int_X B(x) dx}.$$

Cabe ainda ressaltar que utilizamos regras conjuntivas  $R_i$ , com  $i = 1, \dots, K \in \mathbb{N}$  (Zadeh, 1994), que obedecem a estrutura

$$R_i : \textbf{If } x \textbf{ is } A_i \textbf{ then } y = g_i(x), \quad i = 1, \dots, K \in \mathbb{N}$$

E por fim, para a obtenção da solução do sistema *p-fuzzy*, utilizaremos o método numérico de Euler (Barros et al., 2016).

$$x_{n+1} = x_n + \tilde{f}(t_n, x_n)h,$$

em que  $h$  é o tamanho do passo tomado e  $\tilde{f}(t_n, x_n)$  é a saída do SBRF para a entrada  $(t_n, x_n)$ .

## 4. Aprendizado de máquinas

O aprendizado de máquinas (*machine learning*) consiste em uma série de tarefas que são “ensinadas” para a máquina sem que esta tenha sido explicitamente programada para realizar aquela tarefa (Bishop e Nasrabadi, 2006). Na maioria das vezes, tal processo de aprendizado se dá por exemplos.

Existem três grandes grupos de algoritmos de aprendizado de máquinas: o aprendizado supervisionado, o não supervisionado e o por reforço (Jane e Ganesh, 2019). Aqui será utilizado um método do tipo não supervisionado. Nesse tipo de abordagem, os dados processados não possuem qualquer tipo de rotulação prévia, buscando por padrões ocultos que serão úteis para auxiliar na resolução de problemas.

Essa capacidade de encontrar padrões nos fornece interpretabilidade, o que tem grande importância na presente proposta, pois permite ao especialista dar significado aos grupos gerados, por isso o interesse nesse tipo de método.

Sendo mais específico, utiliza-se o método de *K-means*, que requer como entrada apenas o número de agrupamentos desejados ( $K$ ) e o conjunto de dados que se quer analisar. Então, ele realiza a separação dos elementos em  $K$  grupos disjuntos, indicando os elementos mais próximos por rótulos em comum (aqui, optamos por utilizar cores), além de indicar seus respectivos centroides, de modo que os centroides são os pontos que minimizam a distância dos elementos do grupo em relação a ele, e maximiza a distância em relação aos pontos não pertencentes ao grupo em questão.

Na figura 1 temos um exemplo da aplicação do método, em que à esquerda temos uma dispersão de pontos. Ao utilizar esses elementos como dados de entrada, junto com o número de agrupamentos desejados (tomamos  $K = 4$ ), obtemos a imagem à direita, de modo que os elementos que pertencem ao mesmo grupo estão assinalados em cores iguais, além da indicação do centroide de cada grupo em cinza.

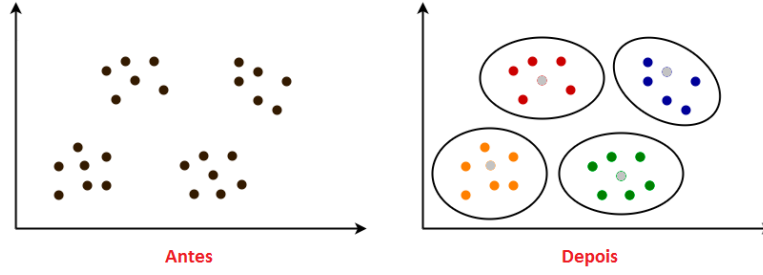


Figura 1: Exemplo de aplicação do método de *K-means*.

Note que o algoritmo não realiza qualquer mudança em relação aos elementos, apenas os identifica e mostra quais pertencem a qual grupo os sinalizando com o mesmo rótulo. Além disso, algumas configurações de dispersão podem não ser triviais e mesmo assim o método sempre converge (Bishop e Nasrabadi, 2006).

## 5. Metodologia

Neste estudo, estamos interessados em partir de um campo vetorial cujo formato seja semelhante ao da curva de crescimento populacional de Verhust, uma vez que esta é bastante conhecida na literatura, proporcionando meios de verificar e validar os resultados obtidos. Assim, precisamos organizar os dados para que a realização de comparações seja possível.

Logo, podemos partir de dados referentes a um sistema dinâmico ( $y$ ), que possuam uma distribuição semelhante à curva de Verhult, ou podemos iniciar tomando um campo referente à média móvel de um evento, pois o acumulado desses fornecerá um gráfico análogo ao que buscamos.

Em seguida, definido o conjunto de dados ( $y$ ) a ser tratado, encontramos a sua derivada  $\left(\frac{dy}{dt}\right)$  utilizando o coeficiente angular fornecido pelo método dos quadrados mínimos. Assim, podemos obter um gráfico que relaciona o sistema dinâmico com a sua derivada  $\left(y \times \frac{dy}{dt}\right)$ . Esse gráfico contém os dados que, juntamente com o número de agrupamentos desejados ( $K$ ), servirão como entrada para o método de *K-means*.

Então, o método de *K-means* fornece  $K$  clusterizações e podemos realizar suas projeções no eixo horizontal de modo a obter os conjuntos antecedentes, cujo centroide indica o ponto de maior pertinência da regra e também o ponto

cujas regras vizinhas não têm pertinência, de modo que estamos utilizando conjuntos trapezoidais para os extremos e triangulares para os demais.

Já para definir os conjuntos consequentes, tomamos o ajuste de retas fornecido pelo método dos quadrados mínimos, em relação a cada grupo. Agora, as regras antecedentes e consequentes são relacionadas através de regras fuzzy do tipo conjuntivas, com a utilização da inferência de Takagi-Sugeno-Kang, e tomamos o método de Euler para nos auxiliar a observar a solução obtida pelo sistema p-fuzzy. Por fim, a medida de RMSE auxilia a comparar o resultado com a curva original ( $y$ ), com o intuito de ter um indicativo de quão próximos ou distantes estamos do esperado.

## 6. Resultados

O emprego do nosso método versa sobre os dados de um campo que representa um sistema dinâmico referente ao número de óbitos decorrentes da COVID-19, no período que corresponde de 25 de fevereiro de 2020 até 20 de junho de 2022. Fonte: <https://covid.saude.gov.br/>.

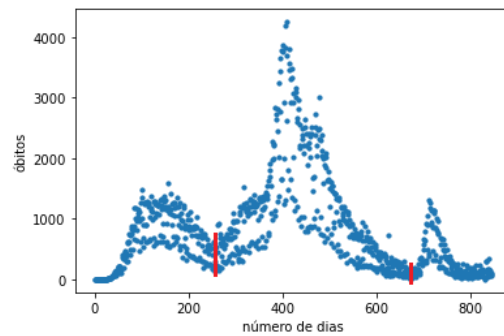
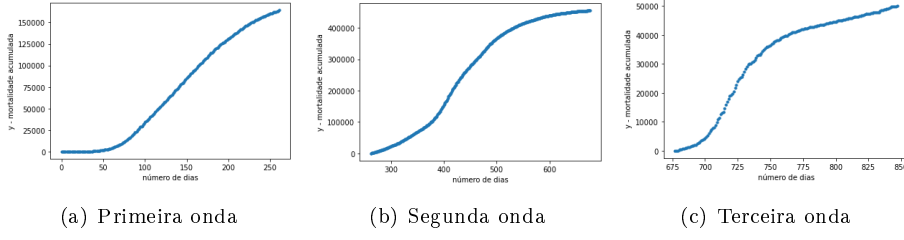
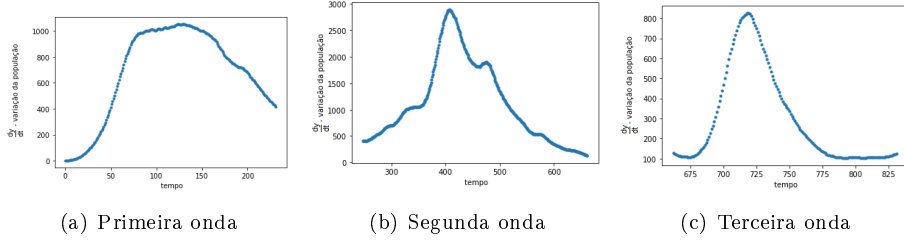


Figura 2: Gráfico de mortalidade populacional

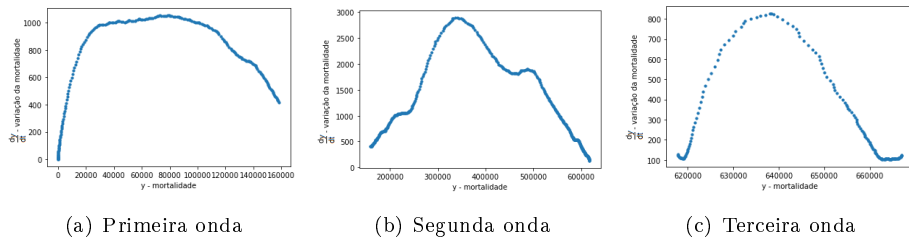
Os dados foram separados de acordo com as três curvas principais que correspondem cada uma a uma “onda” da doença, indicadas por barras verticais. A finalidade com essa divisão é fazer uma investigação mais profunda dos dados. Assim, uma vez que tais dados são análogos à média diária de óbitos, colocamo-nos em sequência, obtendo para cada onda estruturas semelhantes à curva de Verhulst, como podem ser verificadas na figura 3.

Figura 3: Número de óbitos ( $y$ ).

Assim, aplicamos o método dos quadrados mínimos aos elementos da figura 3 a fim de estimar suas respectivas derivadas temporais através dos coeficientes angulares fornecidos pelo método, resultando estão na figura 4.

Figura 4: Derivadas temporais estimadas  $\left(\frac{dy}{dt}\right)$ .

A seguir, relacionamos os gráficos da figura 3 com os da figura 4, obtendo então três gráficos do tipo  $\left(y \times \frac{dy}{dt}\right)$ , ilustrados na figura 5.

Figura 5: Número de óbitos ( $y$ ) pela derivada temporal  $\left(\frac{dy}{dt}\right)$ .



Os gráficos presentes na figura 5 são importantes pois são utilizados como dados de entrada para o método de *K-means*, juntamente com o número de agrupamentos desejados. Após a aplicação do algoritmo de agrupamento, recebemos um gráfico semelhante, com os grupos de interesse sinalizados por cores distintas. Esses grupos serão a base dos nossos conjuntos *fuzzy* antecedentes e consequentes. Logo, após utilizarmos o método de aprendizado de máquinas, chegamos à figura 6.

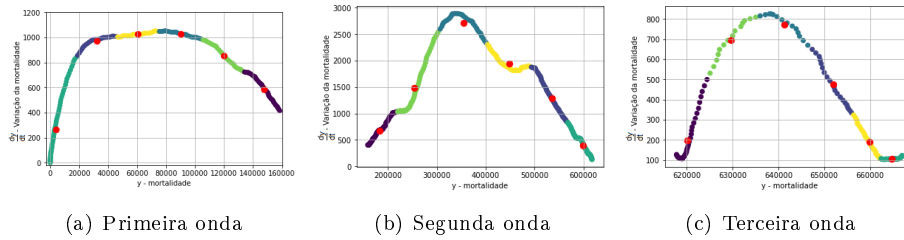


Figura 6: Aplicação do método de *K-means*.

Na figura 6, tomamos o número  $K = 6$  para a realização dos agrupamentos, de modo que esse número foi obtido empiricamente, através de testes que utilizavam diferentes números de grupos e diferentes configurações para os conjuntos *fuzzy* consequentes, e esse número de agrupamentos apresentou maior estabilidade e resultados mais próximos ao campo original. Esses experimentos são melhor detalhados em Queiroz (2023).

Ainda sobre a figura 6, fizemos a projeção dos conjuntos obtidos no eixo horizontal, de modo que o centroide de cada grupo indica o ponto de pertencimento máximo da regra, e o limite das mesmas será dado pelo tamanho da projeção de cada grupo, compondo assim as regras antecedentes, tal como na figura 7.

Já para encontrar os consequentes, utilizamos o método de Takagi-Sugeno, cujas regras são dadas pelos ajustes de retas que passam por cada grupo, de modo que cada grupo é descrito por uma reta diferente. Para esse ajuste de curvas linear, utilizamos o método dos quadrados mínimos.

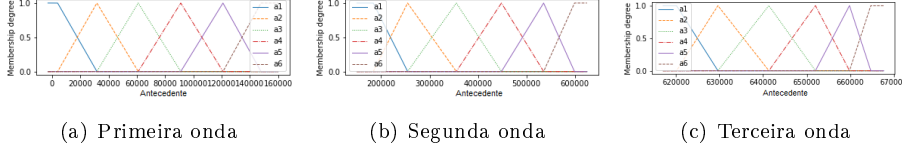


Figura 7: Conjuntos antecedentes.

Podemos então relacionar os conjuntos antecedentes e consequentes, obendo então um SBRF, com a inferência de Takagi-Sugeno e o método de defuzzificação do centroide. Com o auxílio do método numérico de Euler, obtemos a saída do SBRF, correspondendo a três curvas de Verhulst ajustadas. Os resultados podem ser conferidos na figura 8.

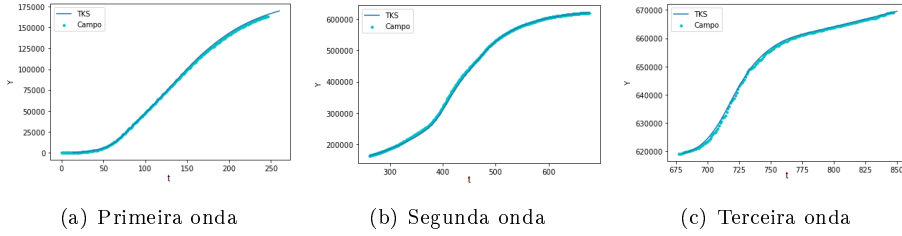


Figura 8: Soluções obtidas.

Para comparar os resultados na figura 8 com os originais que estão descritos na figura 3, foi utilizada a Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE, acrônimo do termo em inglês *Root Mean Squared Error*), que nos indica a proximidade entre ambas, sendo obtida pela fórmula:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{n}},$$

em que  $x_i$  corresponde aos valores reais e  $y_i$  é referente aos valores obtidos através do nosso método, considerando série com  $n$  elementos. Os RMSEs resultantes das análises da primeira, segunda e terceira ondas foram  $RMSE = 11.261,39$ ,  $RMSE = 4.695,17$  e  $RMSE = 1.601,82$  respectivamente, que são valores pequenos levando em consideração que estamos trabalhando com dados na ordem de  $10^6$ .

Além desse aspecto quantitativo, também podemos notar que as curvas

geradas preservam todas as nuances das curvas originais. Logo, podemos considerar que tratam-se de boas aproximações também qualitativamente falando.

## 7. Conclusões

Para quantificar os resultados obtidos e ilustrados na figura 8 tomamos o cálculo do RMSE. Uma vez que resultaram em valores baixos de RMSE, isso é um indicativo de que as curvas adquiridas através da metodologia proposta geraram curvas próximas às originais. Assim, temos que a utilização de um SBRF com inferência de Takagi-Sugeno cujas regras são obtidas com o auxílio do método de aprendizado de máquinas *K-means* mostrou-se coerente e uma alternativa viável para a realização de modelagem de campos vetoriais para sistemas dinâmicos.

## Referências

- Alcañiz, A., Grzebyk, D., Ziar, H., e Isabella, O. (2023). Trends and gaps in photovoltaic power forecasting with machine learning. *Energy Reports*, 9:447–471.
- Arora, S., Vadhera, R., e Chugh, B. (2021). A decision-making system for corona prognosis using fuzzy inference system. *Journal of fuzzy extension and applications*, 2(4):344–354.
- Barros, L. C., Bassanezi, R. C., e Lodwick, W. A. (2016). *First Course in Fuzzy Logic, Fuzzy Dynamical Systems, and Biomathematics*, volume 347 of *Studies in Fuzziness and Soft Computing*. Springer.
- Bishop, C. M. e Nasrabadi, N. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*, volume 4. Springer.
- Castro, J. L. e Delgado, M. (1996). Fuzzy systems with defuzzification are universal approximators. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B (Cybernetics)*, 26(1):149–152.
- Jane, J. B. e Ganesh, E. (2019). A review on big data with machine learning and fuzzy logic for better decision making. *International Journal of Scientific & Technology Research*, 8(10):1121–1125.

- Pedrycz, W. e Gomide, F. (2007). *Fuzzy Systems Engineering: Towards Human-Centric Computing*. Wiley, IEEE Press, New York.
- Queiroz, G. O. (2023). Utilização de aprendizado de máquinas na identificação de campos vetoriais em sistemas p-fuzzy. Dissertação de Mestrado, IMECC–Unicamp, Campinas/SP.
- Sharaff, A., Rajput, N., e Papatla, S. R. (2023). Unsupervised sentiment analysis of amazon fine food reviews using fuzzy logic. In *International Conference on Computing, Communication and Learning*, páginas 126–137. Springer.
- Takagi, T. e Sugeno, M. (1985). Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. *IEEE transactions on systems, man, and cybernetics*, SMC-15(1):116–132.
- Wang, Y., Ma, J., Gao, N., Wen, Q., Sun, L., e Guo, H. (2023). Federated fuzzy k-means for privacy-preserving behavior analysis in smart grids. *Applied Energy*, 331:120396.
- Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Information and control*, 8(3):338–353.
- Zadeh, L. A. (1994). Soft computing and fuzzy logic. *IEEE software*, 11(6):48–56.

# Comparação entre modelos teóricos e dados experimentais do sistema planta-polinizador

Isadora Marcondes<sup>1</sup>, Marcos C. Leite<sup>2</sup>, Paola Ferrari<sup>3</sup>, Pedro Sophia<sup>4</sup>,  
Ilum Escola de Ciência, CNPEM – 13.085-903, Campinas/SP.

**Resumo.** Este estudo aborda a adaptação de um modelo matemático que simula a dinâmica do sistema planta-polinizador. O trabalho se baseia em dados experimentais e modelos anteriores que levam em consideração a interação complexa entre dois tipos de plantas e um polinizador, levando em conta a influência da memória dos polinizadores em relação à presença de néctar nas plantas. Para simplificar o modelo e adequá-lo às necessidades deste estudo, removemos interações secundárias e considerações sobre a memória dos polinizadores. O modelo simplificado resultante consiste em um sistema de equações diferenciais que descrevem a interação entre uma planta e um polinizador em relação ao mutualismo. Este trabalho visa validar a viabilidade e a precisão do modelo simplificado, com o intuito de determinar se os dados disponíveis podem ser adequadamente representados por este novo modelo. Além disso, apresentamos uma solução numérica para comparar os resultados aos obtidos por dados experimentais.

**Palavras-chave:** *Biomatemática; sistema dinâmico; equações diferenciais.*

## 1. Introdução

Polinização é um processo que ocorre na natureza e consiste em levar os grãos de pólen da parte masculina da flor para feminina, esse transporte pode ser feito pela própria planta, água, vento e/ou animais (Lima, 2016). No caso

---

<sup>1</sup>isadora220051@ilum.cnpem.br

<sup>2</sup>marcos220057@ilum.cnpem.br

<sup>3</sup>paola220041@ilum.cnpem.br

<sup>4</sup>pedro2200451@ilum.cnpem.br

de animais, a relação ecológica entre os seres envolvidos é o mutualismo, já que tanto as plantas como os animais se beneficiam, já que as plantas podem fecundar e os animais recebem pólen e néctar. A polinização é importante pois ela é responsável por gerar grande parte de frutas, flores e alimentos disponíveis para consumo humano e por isso, a perda dos animais polinizadores pode gerar desequilíbrio nos ecossistema terrestres, afetar diversidade produção alimentícia, colocar em risco segurança de plantas e gerar crises alimentícias que podem se tornar financeiras. Logo, o sistema de polinização afeta diretamente a vida de muitos animais, assim como dos humanos (Abrol, 2012).

A partir da importância desse sistema, diversos estudos vêm sendo feitos de modo que a dinâmica planta-polinizador possa ser simulada e descrito matematicamente (Mitchell et al., 2009).

O modelo que iremos validar aborda a interação entre dois tipos de plantas e um polinizador, levando em consideração o efeito de memória adquirido pelos polinizadores em relação às plantas que não oferecem néctar, mas ainda precisam ser polinizadas. Assim, esses polinizadores, em sua maioria insetos, recordam-se de que essa planta específica não possui néctar e deixam de visitá-la. No entanto, com o passar do tempo, esses animais tendem a esquecer e retornam a essas plantas, resultando em um comportamento oscilatório periódico. Vale a pena ressaltar que a relação com as plantas que não são polinizadas não pode ser chamada de parasitismo, como dito em Vázquez e Barradas (2018), pois relações parasíticas consistem na sobrevivência e reprodução do parasita a custa da saúde do hospedeiro (Solomon et al., 2014), o que não é o caso descrito no modelo.

Assim, o grupo de seres vivos foi dividido em três:

- (1) as plantas com relações mutualísticas com os insetos;
- (2) as plantas com relações ecológica negativa (que “enganam” os insetos) e
- (3) a população de insetos.

O trabalho visa adaptar esse modelo de equações diferenciais, já descrito na literatura (Vázquez e Barradas, 2018), para algo mais simples, levando em consideração uma planta e um polinizador, em mutualismo e sem efeito de memória, e validar essa mudança com um conjunto de dados adquiridos experimentalmente por Erickson et al. (2022).

## 2. Preliminares

O presente artigo aborda o método de Runge-Kutta de quarta ordem como solução numérica a fim de verificar a aplicação do modelo descrito na literatura (Mitchell et al., 2009) em problemas simplificados.

Esse método é um dos modelos numéricos para solução de EDOs, principalmente usado quando soluções analíticas precisas são difíceis de obter. Ele consiste em estimativas iterativas para solução da EDO em pontos discretos ao longo de um intervalo.

Seja um problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0,$$

o método Runge-Kutta de ordem quatro é dado pelas seguintes equações

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

em que

$$t_{n+1} = t_n + h,$$

sendo  $y_{n+1}$  a aproximação pelo modelo de  $y(t_{n+1})$ , e

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, y_n), \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \\ k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right), \\ k_4 &= f(t_n + h, y_n + hk_3). \end{aligned}$$

Como o método é de quarta ordem o erro associada a cada passo é da ordem de  $h^5$  e erro total acumulado é da ordem  $h^4$  (Ruggiero e Lopes, 2000).

Para a solução numérica é necessário utilizar de métricas de avaliação do modelo, a fim de constatar sua eficiência. Neste estudo, empregamos o Root Mean Square Error (RMSE), traduzido como Erro Quadrático Médio. Essa métrica quantifica a discrepância entre os dados experimentais e as previsões do modelo numérico, conforme expresso pela seguinte equação:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y'_i)^2}{n}}.$$

Aqui,  $n$  representa o número total de observações,  $y_i$  são os dados experimentais, e  $y'_i$  são os dados previstos pelo modelo. O cálculo de RMSE inclui a diferença entre valores experimentais e previstos ao quadrado,  $(y_i - y'_i)^2$ , sem considerar a direção da discrepância (positiva ou negativa). Além disso, incorpora a raiz quadrada da média.

É necessário minimizar o valor do RMSE, uma vez que valores menores indicam uma concordância mais precisa entre as previsões do modelo e os dados reais. Este princípio norteia a otimização do modelo, visando aprimorar sua acurácia.

Enquanto o RMSE fornece uma medida de quão próximas as previsões do modelo estão dos valores reais em termos absolutos, o coeficiente de determinação ( $R^2$ ) oferece uma perspectiva diferente, focalizando a proporção da variância nos dados explicada pelo modelo. O  $R^2$  é calculado como:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y'_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2},$$

sendo  $\bar{y}$  a média dos valores observados ( $y_i$ );  $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$  representa a variância total dos dados e o numerador a soma dos quadrados dos resíduos, que também aparece no cálculo do RMSE.

Um  $R^2$  próximo de 1 indica que o modelo explica uma grande parte da variância nos dados, sugerindo um bom ajuste. Por outro lado, um  $R^2$  baixo sugere que o modelo não captura bem as tendências nos dados.

É importante notar que, enquanto um RMSE baixo indica previsões precisas em termos de magnitude, um  $R^2$  alto indica que a variação dos dados é bem explicada pelo modelo. Portanto, essas duas métricas oferecem visões complementares sobre o desempenho do modelo: o RMSE avalia a precisão, enquanto o  $R^2$  avalia a adequação do modelo em termos de explicação da variação dos dados (Ruggiero e Lopes, 2000).

### 3. Metodologia

Alterações do modelo planta-polinizador, tornando-o mais simples, e validação com conjunto de dados observacionais do fenômeno.



### 3.1. Modelagem

O modelo descrito na literatura (Mitchell et al., 2009) é escrito dessa forma, com três equações:

$$\frac{dx_1}{dt} = -\mu x_1(x_1 + x_2) + \frac{(1 - \sigma)a(x_1 + x_2)x_3}{1 + \alpha x_1 + \beta(x_2) + \gamma x_3},$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -\mu x_2(x_1 + x_2) + \frac{\sigma a(x_1 + x_2)x_3}{1 + \alpha x_1 + \beta(x_2) + \gamma x_3},$$

$$\frac{dx_3}{dt} = x_3(r_3 - \mu_3 x_3) + \frac{bx_1 x_3}{1 + \alpha x_1 + \beta(x_2) + \gamma x_3} - \frac{cx_2 x_3}{1 + \alpha x_1 + \beta(x_2) + \gamma x_3},$$

sendo  $\mu$  fator de competição entre as plantas;  $r_3$  e  $\mu_3$  são os fatores de crescimento intrínseco e de competição intraespecífica, respectivamente;  $\sigma$  é a taxa de novos descendentes de  $x_2$ , os outros parâmetros estão explicados na tabela 1. A dinâmica pode ser visualizada no diagrama da figura 1.

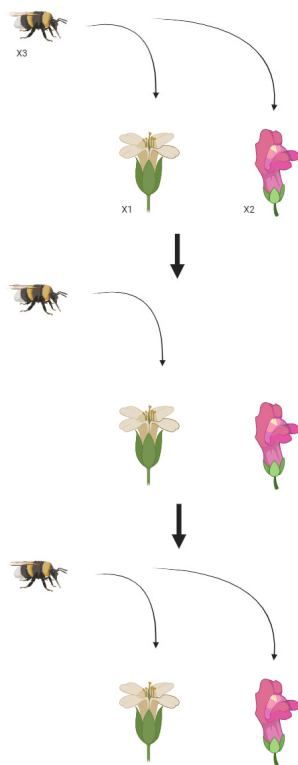


Figura 1: Diagrama que representa o sistema planta-polinizador, no qual o inseto ( $x_3$ ), nesse caso a abelha, aprende que a flor rosa ( $x_2$ ) não possui néctar e para de visitá-la, mas passado um período ela volta a polinizá-la.

Tabela 1: Sumário dos diferentes parâmetros dentro do modelo e suas dimensões (Mitchell et al., 2009).

Parâmetro	Significado	Dimensões
$\mu$	Taxa de competição intraespecífica entre plantas	$1/(\text{tempo} \times \text{número de plantas})$
$\mu_3$	Taxa de competição intraespecífica entre insetos	$1/(\text{tempo} \times \text{número de insetos})$
$r_3$	Taxa de crescimento intrínseco dos polinizadores	$1/\text{tempo}$
$a$	Taxa de encontros efetivos entre insetos e plantas multiplicada pelo benefício que um inseto proporciona à planta	$1/(\text{tempo} \times \text{número de insetos})$
$b$	Taxa de encontros efetivos entre insetos e plantas multiplicada pelo benefício que uma planta proporciona ao inseto	$1/(\text{tempo} \times \text{número de plantas})$
$c$	Taxa de encontros efetivos entre insetos e plantas multiplicada pelo custo incorrido por um inseto a cada visita	$1/(\text{tempo} \times \text{número de plantas})$
$\alpha$	Taxa de saturação que mede a capacidade do inseto de visitar uma flor	$1/\text{número de plantas}$
$\gamma$	Taxa de saturação de visitas às plantas por insetos devida à comunicação intraespecífica entre polinizadores	$1/\text{número de insetos}$
$\beta$	Função que indica a diminuição do número de visitas por inseto devido ao aprendizado. Um exemplo pode ser $\beta(x) = \lambda x$	Adimensional
$\sigma$	Fração de novos descendentes do tipo $x_2$	Adimensional

A adaptação do modelo consiste na retirada dos termos que descrevem as interações com a segunda planta  $x_2$  e o fator de memória, ficando assim:

$$\frac{dx_1}{dt} = -\mu x_1^2 + \frac{ax_1x_3}{1 + \alpha x_1 + \gamma x_3}$$

e

$$\frac{dx_3}{dt} = x_3(r_3 - \mu_3 x_3) + \frac{bx_1x_3}{1 + \alpha x_1 + \gamma x_3}.$$

Além disso, o sistema observado continha cada população de polinizador e sua interação com um único indivíduo da planta, por isso podemos considerar

$$\frac{dx_1}{dt} = 0.$$

A verificação desse novo modelo, escrito a cima, será feita por comparação dos resultados obtidos pela solução numérica com resultados dos dados experimentais.

### 3.2. Verificação numérica

Para verificar a aplicabilidade da simplificação proposta para o modelo de equações diferenciais, vamos utilizar de uma solução numérica das equações diferenciais acopladas através do método de Runge-Kutta. Ou seja, o ponto

inicial  $(x_1(0), x_3(0))$  é determinado pelos dados experimentais, e o restante é calculado iterativamente através do método de Runge-Kutta, conforme descrito na seção Preliminar. Essa solução numérica será comparada com os dados experimentais (Erickson et al., 2022), substituindo os valores iniciais e ajustando os parâmetros  $\mu$ ,  $\mu_3$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $r_3$ ,  $\alpha$  e  $\gamma$ .

### 3.3. Dados experimentais da literatura

Os dados experimentais utilizados foram obtidos a partir do artigo “Measuring Plant Attractiveness to Pollinators: Methods and Considerations” que investigou a dinâmica entre polinizadores e plantas em ecossistemas naturais (Erickson et al., 2022). No entanto, neste trabalho, optamos por restringir nossa análise às populações de abelhas em diversas espécies de plantas.

Os dados consistem em séries temporais que descrevem a evolução das populações de abelhas ao longo do tempo, observadas em diferentes cultivares de plantas. A escolha desses dados permitirá uma análise mais específica da interação entre abelhas e plantas, contribuindo para uma compreensão mais profunda dos processos de polinização. A solução das equações diferenciais descritas na seção 3.1 será ajustada aos dados experimentais, permitindo-nos estimar os parâmetros e avaliar como o modelo se adapta às observações empíricas. A figura 2 exemplifica o número de abelhas em função do tempo para a espécie *Veronica ‘Purple Candles’*.

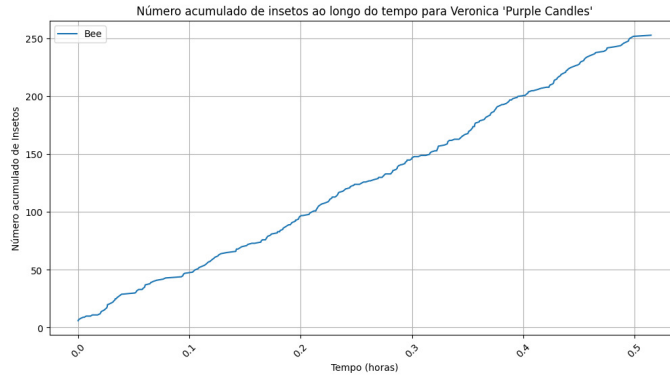


Figura 2: Exemplo de dados experimentais do número de abelhas  $\times$  tempo.

Os dados representam a função que descreve o comportamento da população de abelhas no tempo, ou seja,  $x_3(t)$ . Com o intuito de tornar a função

facilmente manipulável, os dados devem ser ajustados a uma função conhecida, o ajuste será descrito na seção 3.4.

### 3.4. Ajuste do modelo ao polinômio

Uma etapa fundamental neste estudo envolve o ajuste do modelo de equações diferenciais aos dados observacionais das populações de abelhas. O objetivo é determinar os parâmetros do modelo que melhor descrevem as dinâmicas observadas na natureza e validar empiricamente a eficiência do modelo.

Para isso, ajustamos primeiramente uma função polinomial aos dados, para comparar a derivada da mesma função com o campo de derivadas proveniente do modelo. A ordem 3 foi escolhida para o ajuste polinomial com base no erro quadrático médio, conforme a figura 3. O ajuste polinomial se mostra importante por conta das manipulações a serem feitas na função que descreve o comportamento da população de abelhas no tempo.

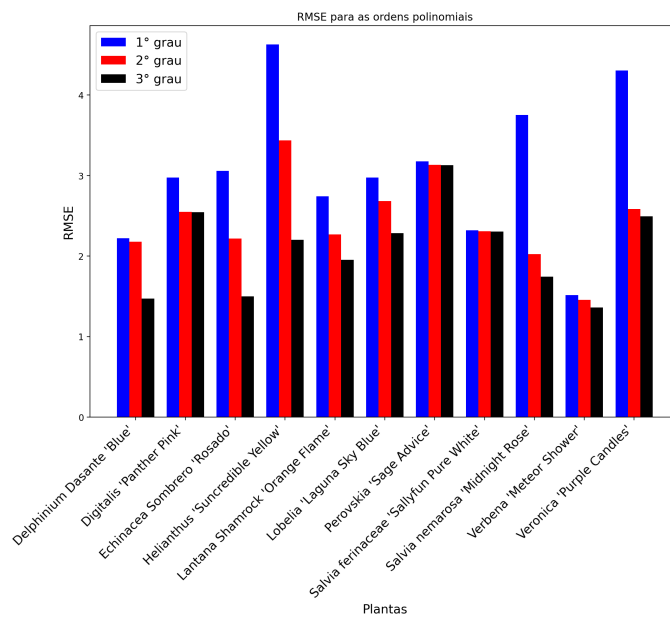


Figura 3: RMSE dos ajustes polinomiais para diferentes espécies.

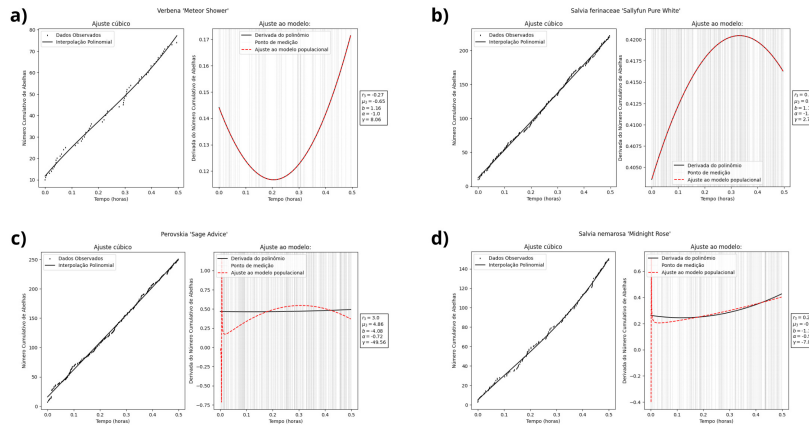


Figura 4: À esquerda de cada imagem temos o ajuste para os dados de polinizadores com o tempo e à direita o ajuste do modelo da derivada dessa função. Os gráficos referem-se as espécies: a) Verbena ‘Meteor Shower’; b) Salvia ferri-naceae ‘Sallyfun Pure White’; c) Perovskia ‘Sage Advice’; d) Salvia nemarosa ‘Midnight Rose’.

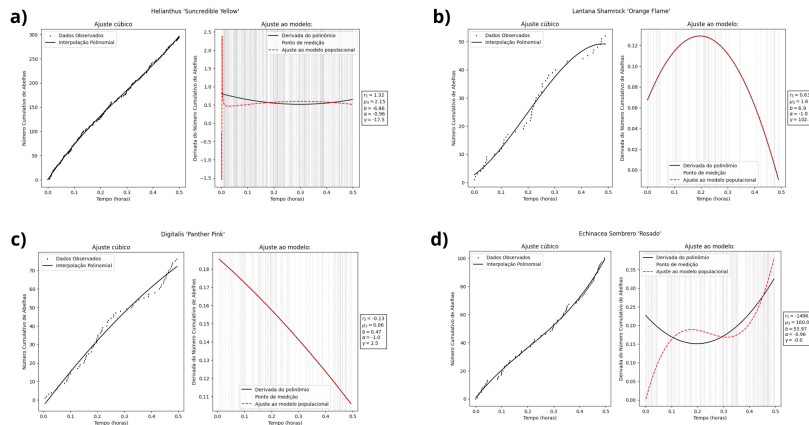


Figura 5: À esquerda de cada imagem temos o ajuste para os dados de polinizadores com o tempo e à direita o ajuste do modelo da derivada dessa função. Os gráficos referem-se as espécies: a) Helianthus ‘Suncredible Yellow’; b) Lantana Shamrock ‘Orange Flame’; c) Digitalis ‘Panther Pink’; d) Echinacea Sombrero ‘Rosado’.

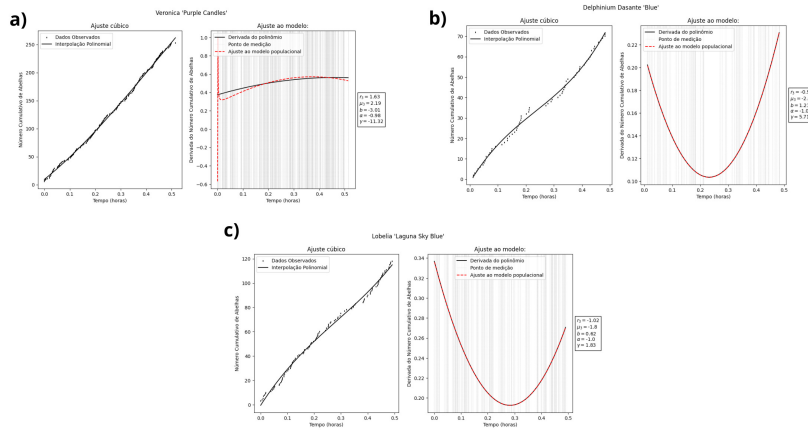


Figura 6: À esquerda de cada imagem temos o ajuste para os dados de polinizadores com o tempo e à direita o ajuste do modelo da derivada dessa função. Os gráficos referem-se as espécies: a) Veronica ‘Purple Candles’; b) Delphinium dasante ‘Blue’; c) Lobelia ‘Laguna Sky Blue’.

As figuras 4, 5 e 6 mostram resultados do ajuste do modelo às séries temporais das populações de abelhas para cada cultivar considerado no estudo. Discutiremos os valores estimados dos parâmetros do modelo e a qualidade do ajuste obtida. Essa análise nos permitirá tirar conclusões sobre a eficácia de como o modelo descreve as dinâmicas das populações de abelhas e como os parâmetros influenciam essas dinâmicas.

## 4. Resultados

Observamos nas figura 4, 5 e 6 que as espécies representadas nos gráficos na figura 4: **a)**, **b)**, na figura 5: **b)**, **c)** e na figura 6: **b)** e **c)** resultaram em um ajuste satisfatório dos dados experimentais. No entanto, os dados observados na figura 4: **c)**, **d)**, na figura 5: **a)**, **d)** e na figura 6: **a)**, não correspondem ao modelo proposto. Sendo assim, 54% das espécies estudadas se mostraram ajustáveis ao modelo, quando consideramos somente as abelhas como agente polinizador.

## 5. Conclusões

Observamos que a maioria das espécies resultou em um ajuste satisfatório dos dados experimentais (54% das espécies analisadas), o que nos faz considerar que os ajustes feitos no modelo estudado da literatura são suficientes para prever dados experimentais de situações menos complexas. Uma hipótese a ser conferida para os dados que não se comportaram conforme o modelo é que possivelmente o algoritmo encontrou um mínimo local da função. Uma solução seria utilizar diferentes métodos de otimização ou mudar as condições iniciais.

## Referências

- Abrol, D. P. (2012). *Decline in Pollinators*, páginas 545–601. Springer Netherlands, Dordrecht.
- Erickson, E., Grozinger, C. M., e Patch, H. M. (2022). Measuring plant attractiveness to pollinators: Methods and considerations. *Journal of Economic Entomology*, 115(5):1571–1582.
- Lima, E. L. (2016). *Pollination Biology*. SpringerLink Netherlands, Dordrecht.
- Mitchell, R. J., Irwin, R. E., Flanagan, R. J., e Karron, J. D. (2009). Ecology and evolution of plant–pollinator interactions. *Annals of Botany*, 103(9):1355–1363.
- Ruggiero, M. e Lopes, V. L. D. R. (2000). *Cálculo numérico: Aspectos teóricos e computacionais*. Pearson Education do Brasil S.A.
- Solomon, N. U., James, I. M., Alphonsus, N. O.-O., e Nkiruka, R. U. (2014). A review of host-parasite relationships. *Annual Research & Review in Biology*, 5(5):372–384.
- Vázquez, V. e Barradas, I. (2018). A plant–pollinator system: How learning versus cost-benefit can induce periodic oscillations. *International Journal of Biomathematics*, 11(2):1850024.



# Equação de Gompertz: um estudo sobre a evolução de tumores

Otávio S. Macedo<sup>1</sup>, Gilcélia R. Souza<sup>2</sup>

DEFIM, CAP, UFSJ – 36.495-000, Ouro Branco/MG.

**Resumo.** Este artigo investiga o modelo matemático de Gompertz para descrever o crescimento de tumores, uma extensão da equação logística que captura o crescimento inicial rápido seguido por um crescimento mais lento à medida que o tumor se aproxima da capacidade máxima. Iniciamos com a resolução da equação de Gompertz como um problema de valor inicial, explorando suas soluções gerais e particulares. Em seguida, realizamos uma análise gráfica utilizando parâmetros experimentais, ilustrando como o modelo pode ser aplicado para entender o crescimento tumoral em estudos com ratos. Comparamos nossos resultados com dados biológicos reais, destacando a utilidade do modelo de Gompertz na previsão e análise de crescimento tumoral. Este estudo contribui significativamente para a Biomatemática ao integrar teoria matemática com dados experimentais, oferecendo indicadores valiosos para a pesquisa em Biomatemática.

**Palavras-chave:** Crescimento tumoral; modelagem matemática; equações diferenciais.

## 1. Introdução

Ao estudar o conteúdo de equações diferenciais, em especial no estudo das equações logísticas nos deparamos com a equação de Gompertz. O livro de Zill (2011) relata que a equação em questão é “uma modificação na equação logística, conhecida como equação diferencial de Gompertz” que é capaz de representar crescimento ou decrescimento de populações, além de modelar o

---

<sup>1</sup>otavio.matematica@hotmail.com

<sup>2</sup>gilcelia@ufsj.edu.br

crescimento de tumores malignos em determinados tipos celulares (Zill, 2011, p.101). O que nos aguçou a curiosidade de conhecer mais sobre o modelo.

O modelo de Gompertz surgiu de estudos realizados pelo matemático inglês Benjamin Gompertz, que realizou sua pesquisa a partir da taxa de mortalidade na companhia de seguros de sua família. Os feitos de Gompertz resultaram na famosa Lei da Mortalidade, como pode ser encontrado em Boyce e Dprima (2010); MT MacTutor (2021).

O modelo de crescimento populacional proposto por Gompertz descreve uma taxa de crescimento grande no início e converte, de forma rápida, em um crescimento mais lento, por este fato, ele consegue modelar diversos crescimentos celulares.

Este modelo é representado por diferentes equações, adotaremos a equação de acordo com as referências Boyce e Dprima (2010); Cavalcanti Filho e Silva (2018), a saber:

$$\frac{dN}{dt} = rN \ln \frac{k}{N} \quad (1.1)$$

sendo  $N$  a função que expressa o número de células de acordo com o tempo  $t$  e com as constantes  $r$  para velocidade de multiplicação das células (com  $r > 0$ ) e  $k$  para o tamanho máximo que um tumor pode atingir.

## 2. Análise da equação de Gompertz

Repare que o modelo de Gompertz, representado pela equação (1.1), é não linear e se trata de uma equação autônoma. Resolvendo essa equação e considerando  $N_0$  como sendo a população inicial de células tumorais, podemos escrever a equação como um problema de valor inicial (PVI) com  $N(0) = N_0$ , segue:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = rN \ln \left( \frac{k}{N} \right) \\ N(0) = N_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

O PVI acima é solúvel por separação de variáveis, basta fazer uma manipulação algébrica simples e em seguida a integral:

$$\int \frac{dN}{N \ln \left( \frac{k}{N} \right)} = \int r dt$$

Resolvendo a equação obtemos a solução geral:

$$N(t) = ke^{e^c e^{-rt}} \quad (2.3)$$

Aplicando a condição inicial,  $N(0) = N_0$  na equação (2.3) chegamos no valor da constante  $e^c$ , dada por

$$e^c = \ln \frac{N_0}{k}$$

Com isso, a solução particular é:

$$N(t) = ke^{\left(\ln \frac{N_0}{k}\right) e^{-rt}} \quad (2.4)$$

## 2.1. Análise gráfica do modelo de crescimento tumoral de Gompertz usando parâmetros experimentais

Para elucidar sobre o crescimento de um tumor no organismo capaz de oferecer condições suficientes e necessárias para seu desenvolvimento, buscou-se na literatura sobre o assunto os parâmetros que serão aplicados à equação (2.4). Usaremos os valores apresentados por Domingues (2011) como parâmetros para o esboço das curvas de interesse, são eles:

$$r = 0,0060; k = 10^{13}; N_0 = N(0) = 10^9$$

O valor de  $k$ , como estabelecido, é a capacidade de suporte do tumor e foi baseado no fato de que a partir de  $10^6$  células é necessário a ampliação dos vasos sanguíneos (angiogênese) para que o tumor receba nutrientes em toda sua extensão, podendo atingir a carga máxima de  $10^{13}$  células, como descrito em Friberg e Mattson (1997).

Usaremos o *software MATLAB On-line*<sup>1</sup> para esboçar as curvas de nosso interesse. Todos os gráficos nesta sequência foram elaborados pelo autor.

Considerando os parâmetros apresentados e substituindo-os na equação (2.4) chegamos na seguinte equação:

$$N(t) = 10^{13} e^{\ln \frac{10^9}{10^{13}} e^{-0,0060t}} \quad (2.5)$$

---

<sup>1</sup> *MATLAB On-line* é um *software* de computação numérica de análise e visualização de dados e se trata de um ambiente de programação sofisticado e de fácil entendimento, podendo ser utilizado em <https://www.mathworks.com/products/matlab-online.html>. Acesso em 24 de outubro de 2021.

Para a variável tempo ( $t$ ), é necessário não interpretá-las em unidades de tempo, pois não tivemos acesso aos pontos para que estes números fossem estimados, para tanto, vamos usá-la em contagem de períodos iguais. O gráfico a seguir foi plotado com base na equação (2.5).

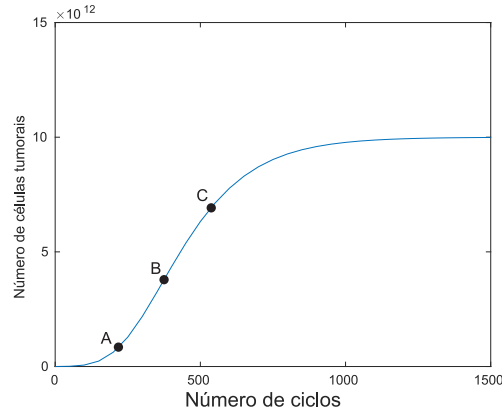


Figura 1: Gráfico do número de células tumorais  $\times$  ciclos.

Por fim, deseja-se adicionar um fator de tratamento que agirá na tentativa de reduzir o crescimento no gráfico (figura 1) e, conseqüentemente, reduzir a velocidade de crescimento tumoral e sua aceleração, como pode ser verificado em Domingues (2011).

## 2.2. Determinação dos parâmetros da equação de Gompertz de um experimento com ratos

O modelo de Gompertz pode ser exemplificado usando os dados encontrados no artigo “Monitoramento por imagem de ressonância magnética do crescimento tumoral no modelo C6 de glioblastoma com perspectivas de avaliação da terapia de magnetohipertemia” (Silva et al., 2012), para modelar o crescimento de tumores. O artigo trata de um experimento realizado em ratos Wistar (*Rattus norvegicus*)<sup>2</sup> que foram submetidos à aplicação de células

<sup>2</sup> Acredita-se que o rato Wistar foi o primeiro organismo desenvolvido para uso em pesquisa biomédica. Mais da metade de todas as linhagens de ratos de laboratório são descendentes da colônia de ratos Wistar original. Um dos principais motivos da utilização desta espécie, se deve a semelhança fisiológica humana e dos períodos de gestação serem curtos UNIFESP (2021).

tumorais. O artigo tem como objetivo pesquisar um padrão de crescimento dos tumores, em volume, nos ratos Wistar submetidos ao modelo C6 de *Glioblastoma Multiforme (GBM)*<sup>3</sup>. Este mesmo considera importante conhecer os parâmetros da progressão do tumor para implementação de terapias, em especial da hipertermia, que é o aquecimento tumoral, podendo ser realizada pela inserção de nanopartículas magnéticas que aquecem a região tumoral (magnetohipertermia) mediante a um campo magnético alternado.

Para continuidade dos nossos estudos elencamos os seguintes itens, retirados de Silva et al. (2012), que serão úteis a aplicação do modelo.

- A concentração de células GBM implantadas no córtex frontal direito dos roedores foi de  $10^5 \text{ células}/10\mu\text{L}$  e a quantidade da solução aplicada foi de  $10\mu\text{L}$ , desta forma inseriu-se  $10^5$  células tumorais em cada rato;
- Foram realizadas três ressonâncias magnéticas (RM) nos 14<sup>o</sup>, 21<sup>o</sup> e 28<sup>o</sup> dias após a implementação das células e foi possível medir o volume médio dos tumores nos ratos, apresentados na tabela 1;

Tabela 1: Evolução tumoral de acordo com os dias, fonte: dados retirados de Silva et al. (2012).

Observação	RM realizada após o dia de implantação	Volume [ $\text{mm}^3$ ]
1	14 dias	$13,7 \pm 2,5$
2	21 dias	$31,7 \pm 6,5$
3	28 dias	$122,1 \pm 11,8$

- Os ratos separados para o grupo de controle receberam apenas o meio de cultura celular (sem as células) e não apresentaram crescimento tumoral findado os 28 dias de observação, comprovando que o crescimento tumoral se deve às células tumorais implantadas;

Precisamos agora estabelecer a quantidade de células presentes nesses estágios expostos na tabela 1, para isso usaremos os dados a seguir:

<sup>3</sup>“O glioblastoma multiforme (GBM) é um tipo de tumor maligno de crescimento rápido, se trata de um tumor cerebral mais comum em adultos [...] Pacientes diagnosticados com GBM têm um prognóstico ruim e geralmente sobrevivem menos de 15 meses após o diagnóstico” (NCI, 2021).

- “Quando um tumor maligno alcança cerca de 1 cm de diâmetro, torna-se detectável pelos métodos diagnósticos disponíveis e contém cerca de  $10^9$  células” (Instituto Nacional do Câncer, 2008, p.39).

A partir desses dados e considerando que o tumor maligno seja uma esfera perfeita e que seu raio seja de 5mm, conclui-se que seu volume é:

$$V = \frac{4}{3}\pi(5)^3 \approx 523,6mm^3$$

Logo, sabemos que em  $523,6mm^3$  há  $10^9$  células. Fazendo a proporção desse dado com os dados da tabela 1, apresentamos a tabela 2:

Tabela 2: Número de células por observação

Observação	Tempo (dias)	Volume ( $mm^3$ )	Número de células
1	14 dias	$13,7 \pm 2,5$	$2,62 \cdot 10^7 \pm 4,77 \cdot 10^6$
2	21 dias	$31,7 \pm 6,5$	$6,05 \cdot 10^7 \pm 1,24 \cdot 10^7$
3	28 dias	$122,1 \pm 11,8$	$2,33 \cdot 10^8 \pm 2,25 \cdot 10^7$

A partir da tabela 2 podemos gerar três pares ordenados do tipo (dias de observação, números de células), são eles:

- $N_0 = 10^5$  com  $t = 0$
- Ponto: (14 ,  $2,62 \times 10^7$ )
- Ponto: (21 ,  $6,05 \times 10^7$ )
- Ponto: (28 ,  $2,33 \times 10^8$ )

Infelizmente, a quantidade de pontos obtidos experimentalmente, não é suficiente para uma precisão a uma curva ideal que contivesse todos os pontos de forma satisfatória e com minimização dos erros na determinação dos parâmetros  $r$  e  $k$  da equação (2.4).

Por ora, uma solução encontrada para finalizarmos essa modelagem de forma mais simplificada é usar uma relação proporcional para encontrar a capacidade de carga dos tumores nos ratos de laboratório. Considere a quantidade inicial de  $10^9$  células quando  $t = 0$  e a capacidade de carga do tumor como  $10^{13}$  células (dados abordados na seção 2.1). Desejamos descobrir a capacidade de

carga dos tumores nos ratos, para isso usaremos  $10^5$  células como quantidade inicial de células inseridas nos roedores. Segue a proporção:

$$\frac{10^9}{10^5} = \frac{10^{13}}{k_r}$$

Resolvendo essa relação obtemos  $k_r = 10^9$ .

Usando os dados obtidos na tabela 2, construímos a tabela 3.

Tabela 3: Logaritmo natural do número de células por tempo

Tempo (dias)	$\ln(\text{Número de células})$
0 dia	11,51293
14 dias	17,07993
21 dias	17,91885
28 dias	19,26738

Agora trabalharemos com a equação (2.4), exprimindo o logaritmo natural dos dois membros da equação, temos:

$$\ln N(t) = \ln k e^{\ln \frac{N_0}{k} e^{-rt}}$$

Aplicando algumas propriedades dos logaritmos, chegamos a seguinte equação:

$$\ln N(t) = \ln k + \ln \frac{N_0}{k} e^{-rt}$$

Substituindo  $N_0 = 10^5$  e  $k = k_r = 10^9$  na equação anterior, obtemos:

$$\ln N(t) = \ln 10^9 + \ln 10^{-4} \cdot e^{-rt} \quad (2.6)$$

A equação (2.6) pode ser vista como uma função exponencial transladada no eixo  $y$ . Considere  $y = \ln N(t)$  e a nova função:

$$y = \ln 10^9 + \ln 10^{-4} \cdot e^{-rt} \quad (2.7)$$

Usando o *software* *SciDAVis*<sup>4</sup> e os dados da tabela 3 plotamos o gráfico  $y \times t$ , segue:

<sup>4</sup>*SciDAVis* é um acrônimo para Scientific Data Analysis and Visualization é um programa de computador de código aberto e multiplataforma para a plotagem interativa de gráficos científicos e análise de dados. O *software* pode ser obtido em <http://scidavis.sourceforge.net/>. Acessado em 23 de outubro de 2021.

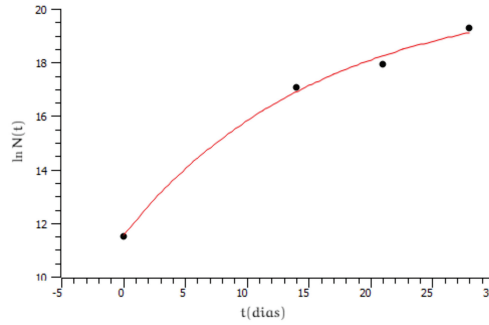


Figura 2: Gráfico  $\ln(N(t))$  x  $t(dias)$

Usando o mesmo *software* anterior, a partir da curva apresentada pela figura 2, aplicamos um ajuste de crescimento exponencial à curva. Os dados fornecidos pelo programa se encontram na figura 3.

```
Exponential growth fit of dataset: Table1_2, using function:  $y_0 + A \cdot \exp(x/t)$ 
A (amplitude) = -9,12462695085294 +/- 1,53150978072263
t (lifetime) = -15,7697015372378 +/- 0,0230802021309025
y0 (offset) = 20,6534952642341 +/- 1,53064604408908
-----
Chi^2 = 0,164652030992261
R^2 = 0,995277652700679
```

Figura 3: Resultados do ajuste de crescimento exponencial

Repare que o valor de  $\ln 10^9 \approx 20,73$  e está dentro do valor estimado para  $y_0 = 20 \pm 1$  e que  $\ln 10^{-4} \approx -9,21$  está de acordo com o valor de  $A = -9 \pm 1$ , dados combinados na comparação da equação (2.7) e pela figura 3, com isso, podemos estimar que

$$-\frac{x}{15,76} = -rx \Rightarrow r \approx 0,06$$

Portanto, inferimos que a velocidade de multiplicação de células tumorais é  $r = 0,06$  para  $N_0 = 10^5$  e capacidade de carga  $k = 10^9$ . Esses dados sugerem que o crescimento tumoral segue um padrão exponencial que se estabiliza ao se aproximar da capacidade de carga. No entanto, sabemos que um tumor com  $10^9$  células possui aproximadamente 1 cm de diâmetro, segundo dados de (Instituto Nacional do Câncer, 2008, p.39). Portanto, é improvável que um



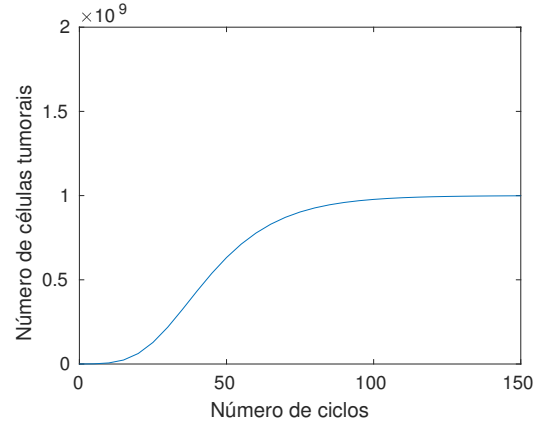
tumor em um rato Wistar atinja a capacidade de carga, dado que o crânio desses roedores é aproximadamente igual ao tamanho de um tumor com capacidade de carga. Mesmo que isso fosse possível, haveria escassez de recursos para o crescimento do tumor e elevada pressão craniana, o que poderia afetar outras funções cerebrais e levar ao óbito.

### 3 Resultados

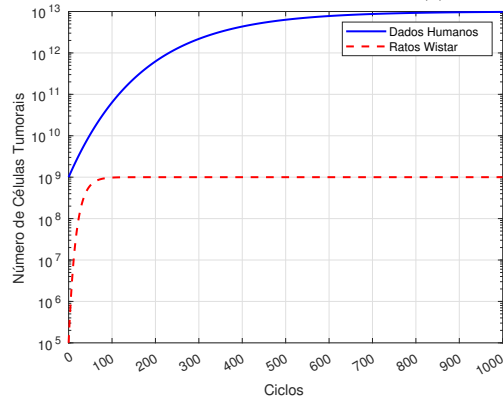
Calculamos o valor  $r \approx 0,06$ . Este resultado nos sugere que o crescimento tumoral será mais rápido em ratos que em humanos, é natural que seja, pois eles vivem de 2 a 3,5 anos. Não há uma relação de proporção direta entre a idade humana e a idade dos ratos. Andreollo et al. (2012) faz uma relação entre essas idades, 6 meses de vida do rato é correspondente a 18 anos de idade humana e 12 meses da vida de um rato corresponde à 30 anos da vida humana, mostrando que não há relação direta à qual podemos nos basear. Araújo ainda ressalta que em diferentes fases da vida do rato há diferentes correspondências para as idades humana, um exemplo disso é a fase de puberdade do rato que é de 4,3 dias e de 1 ano no ser humano, ainda conclui que “Ratos e modelos animais nas pesquisas em geral podem ser ferramentas muito importantes e úteis; seus resultados podem ser aplicáveis nos seres humanos, entretanto, não podem ser interpretados como pessoas em miniatura.”

Tendo em vista a exposição no parágrafo anterior, já era esperado que a curva de Gompertz tivesse maior velocidade de crescimento para os ratos do que para os humanos pois um rato gasta menos tempo que um humano para que o tumor atinja a capacidade de carga.

Considerando os valores de  $r$ ,  $N_0$  e  $k_r$  para os ratos e usando a aplicação construída no *MATLAB On-line*, como expomos anteriormente, apresentamos o gráfico 4 a seguir.

Figura 4: Gráfico  $N(t) \times t$ 

No gráfico 5 a seguir, comparamos as curvas de desenvolvimento tumoral utilizando parâmetros para humanos e aqueles obtidos em experimentos com ratos.

Figura 5: Gráfico comparativo  $N(t) \times t$ 

No gráfico 5, comparamos as curvas de desenvolvimento tumoral utilizando parâmetros para humanos e aqueles obtidos em experimentos com ratos Wistar. As curvas mostram que o crescimento tumoral para humanos, com uma taxa de crescimento  $r = 0,006$ , é mais lento comparado aos ratos Wistar, em que a taxa é  $r = 0,06$ . Isso indica um crescimento mais rápido dos tumores em ratos. Além disso, a capacidade de carga para humanos ( $k = 10^{13}$ ) é muito maior do que para ratos Wistar ( $k = 10^9$ ), sugerindo que os tumores humanos

podem crescer mais. Ambas as curvas seguem um padrão exponencial inicial antes de se estabilizarem à medida que o número de células se aproxima da capacidade de carga, refletindo a limitação dos recursos disponíveis. A diferença nas taxas de crescimento e capacidades de carga entre humanos e ratos destaca a importância de considerar essas variáveis ao aplicar resultados experimentais e desenvolver terapias, garantindo que as abordagens sejam ajustadas para as características específicas de cada organismo.

## 4. Conclusões

Por meio deste artigo, foi possível potencializar os conhecimentos a cerca da equação de Gompertz, que tem um papel muito relevante dentro da Biomatemática. Com esse intuito foi possível analisar a equação por meio de valores reais, podendo trabalhar com os parâmetros com significado biológico, atrelando os parâmetros já verificados em pesquisas médicas a uma pesquisa biológica que tinha como um de seus objetivos medir o desenvolvimento de tumores em ratos, complementando a literatura com um estudo de parâmetros para a pesquisa.

## Referências

- Andreollo, N. A., Santos, E. F., Araújo, M. R., e Lopes, L. R. (2012). Idade dos ratos versus idade humana: qual é a relação? *ABCD. Arquivos Brasileiros de Cirurgia Digestiva (São Paulo)*, 25(1):49–51.
- Boyce, W. e DiPrima, R. (2010). *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. LTC.
- Cavalcanti Filho, G. F. e Silva, C. M. (2018). Simulação numérica de crescimento de tumores malignos da próstata usando a equação diferencial de gompertz. *Revista Nucleus*, 15(2):105–116.
- Domingues, J. (2011). Análise do modelo de gompertz no crescimento de tumores sólidos e inserção de um fator de tratamento. *Biomatemática IMECC - UNICAMP, Brasil*.
- Friberg, S. e Mattson, S. (1997). On the growth rates of human malignant

- tumors: Implications for medical decision making. *Journal of Surgical Oncology*, 65:284–297.
- Instituto Nacional do Câncer (2008). *Ações de enfermagem para o controle do câncer: uma proposta de integração ensino-serviço*. Ministério da Saúde, Brasília, 3 edição.
- MT MacTutor (2021). Arquivo de história da matemática mactutor. <https://mathshistory.st-andrews.ac.uk/Biographies/Gompertz/>. Acessado em 20/04/2021.
- NCI (2021). National cancer institute. <https://www.cancer.gov/about-nci/organization/ccg/research/structural-genomics/tcga/studied-cancers/glioblastoma>. Acessado em 20/05/2021.
- Silva, A. C. d., Cabral, F. R., Mamani, J. B., Malheiros, J. M., Polli, R. S., Tannus, A., Vidoto, E., Martins, M. J., Sibov, T. T., Pavon, L. F., et al. (2012). Monitoramento por imagem de ressonância magnética do crescimento tumoral no modelo c6 de glioblastoma com perspectivas de avaliação da terapia de magnetohipertemia. *einstein (São Paulo)*, 10:11–15.
- UNIFESP (2021). Wistar epm-1. <https://www.unifesp.br/campus/sao/cedeme/modelos-animais/ratos/heterogenicos/92-wistar>. Acessado em 20/05/2021.
- Zill, D. (2011). *Equações Diferenciais com aplicações em modelagem*. Cengage Learning, 9 edição.

# Modelagem matemática para descrever interações entre espécies mediante a dispersão de poluente em corpos aquáticos

Carlos F. L. Santos<sup>1</sup>,

Dept de Matemática, UEA - 69.050-010, Manaus/AM.

**Resumo.** O presente estudo visa descrever a evolução da poluição no corpo aquático do Igarapé do Pantanal e suas influências nas dinâmicas interativas entre presas e predadores. Com o objetivo de avaliar diferentes cenários do efeito da poluição sobre o sistema ecológico em estudo. Para a modelagem do fenômeno evolutivo da poluição utilizou-se uma equação diferencial parcial não-linear, considerada clássica no contexto da modelagem que descrevem fenômenos difusivos-advectivos. Para as dinâmicas interativas entre presas e predadores se considerou um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares acopladas, com dinâmicas vitais de Verhulst e a clássica dinâmica de Lotka-Volterra. Assim, o modelo matemático proposto será um sistema dinâmico com três equações diferenciais parciais acopladas entre si. O modelo e o domínio foram discretizados visando uma aproximação das soluções pelo método de diferenças finitas centrais para a variável espacial e diferenças finitas de Crank-Nicolson na discretização temporal. Quanto aos resultados numéricos computacionais obtidos, se pode destacar formações de diferentes cenários, causados pelos impactos do poluente nas dinâmicas interativas das espécies.

**Palavras-chave:** Biomatemática; impacto ambiental, métodos numéricos.

## 1. Introdução

A poluição em meios aquáticos é uma contaminação por resíduos na água dos rios, lagos, igarapés, por meio de elementos físicos, químicos entre outros,

---

<sup>1</sup>cflsantos16@gmail.com

que podem ser prejudiciais aos organismos e a sobrevivência humana. Trata-se de um problema sócio-ambiental de alto risco a vida, visto que, a água é vital à sobrevivência no planeta. Entre os motivos da poluição em meio aquáticos destacam-se as ações antrópicas relativas às atividades econômicas. Entre as várias consequências causadas pela poluição em corpos aquáticos, destacam-se: a redução dos níveis de oxigênio dissolvidos, formação de correntes ácidas, intoxicação de organismos presentes no ecossistema, entre outros, (Manoel Neto, 2014).

Nas alterações ambientais, como mudanças de áreas conservadas para áreas degradadas, podem surgir efeitos ecológicos, ambientais e modificações nas características dos cenários, que afetam diretamente a biodiversidade, o equilíbrio ecológico, entre outros.

Diante disso, se faz necessário desenvolver ações de preservação e de recuperação dos corpos aquáticos afetados pela poluição, sendo assim, o objetivo desse estudo é desenvolver uma modelagem matemática que permita avaliar diferentes cenários do efeito da dispersão da poluição no meio aquático e sua influência nas dinâmicas interativas entre presas e predadores, no Igarapé do Pantanal em São Sebastião do Uatumã-AM.

A proposta deste estudo é modelar matematicamente a dispersão poluição no Igarapé do Pantanal, a fim de descrever futuros cenários, estimar o tempo de degradação dessa região e o efeito da poluição nas dinâmicas das espécies que ali convivem. O modelo matemático será descrito por um sistema de equações diferenciais parciais (EDP), não-lineares.

O modelo considera fenômenos de dispersão, difusão-advecção, decaimento, acopladas às dinâmicas vitais de Verhulst e a modelagem clássica no sentido de Lotka-Volterra. Simulações computacionais foram executadas a fim de mostrar possíveis e prováveis cenários da região impactada pela poluição. Os resultados numéricos computacionais, obtidos via discretização do modelo pela técnica de diferenças finitas centrais para variável espacial e diferenças finitas de Crank-Nicolson no tempo mostram que a dispersão da poluição apresenta forte influência nas dinâmicas entre as espécies estudadas e na degradação do sistema ecológico em estudo.

Em relação aos cenários resultantes da dispersão da poluição, é importante modelar, aproximar as soluções numericamente e simular computacionalmente cenários, além do tempo que levará para degradação no meio. Os cenários mostram que há grandes prejuízos a biodiversidade e ao equilíbrio

ecológico apresentado no local de estudo.

## 2. Metodologia

### 2.1. O modelo matemático

O sistema de  $EDP_s$  que descreve as dinâmicas entre a presa Cará  $C = C(x, y, t)$  e o predador Tucunaré  $T = T(x, y, t)$ , sob a influência da poluição  $P = P(x, y, t)$ , em cada ponto  $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$  no instante  $t \in (0, \tau]$ , sendo  $\tau$  o tempo final, é dado por:

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial t} = \alpha_1 \left( \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) - u_1 \frac{\partial P}{\partial x} - v_1 \frac{\partial P}{\partial y} - \mu_1 P + \lambda_1 P + \beta_1 PT - \gamma_1 PC \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_2 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - u_2 \frac{\partial T}{\partial x} - v_2 \frac{\partial T}{\partial y} - \mu_2 T + \lambda_2 T \left[ 1 - \frac{\sigma_2 T - \gamma_2 C + \sigma_2 P}{K_t} \right] \\ \frac{\partial C}{\partial t} = \alpha_3 \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - u_3 \frac{\partial C}{\partial x} - v_3 \frac{\partial C}{\partial y} - \mu_3 C + \lambda_3 C \left[ 1 - \frac{\sigma_3 C + \gamma_3 T + \sigma_3 P}{K_c} \right] \end{cases} \quad (2.1)$$

O modelo por EDP (2.1) considera os seguintes fenômenos:

- **Difusão:** será considerada a difusão efetiva no sentido de Marchuk (1986) e Okubo (1980). Descritos pelos parâmetros  $\alpha_i$ ,  $i = 1, \dots, 3$ , considerados constantes neste trabalho;
- **Advecção:** se considera a correnteza da água como um campo advectivo, cuja direção predominante e magnitude são representadas, respectivamente,  $u_i$ ,  $v_i$ ,  $i = 1, \dots, 3$ ,  $\text{div}(\mathbf{V})=0$  e considerados de acordo com Prestes e Meyer (2013);
- **Dcaimento:** representados pelos coeficientes  $\mu_i$ ,  $i = 1, \dots, 3$ ;
- **Taxa de crescimento:** descritas por  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  e  $\lambda_3$ , o aumento do poluente e das espécies de predadores e presas, respectivamente;
- **Coeficientes de predação:** representados pelos termos  $\pm \frac{\lambda_i \gamma_i}{K_{t,c}}$ ,  $i = 2, 3$ , na segunda e terceira equações;
- **Influências do poluente nas espécies:** são os termos  $-\frac{\lambda_i \sigma_i}{K_{t,c}}$ ,  $i = 2, 3$ , na segunda e terceira equações;
- **Competições intraespecíficas:** são caracterizados por  $-\frac{\lambda_i}{K_{t,c}}$ ,  $i = 2, 3$ , na segunda e terceira equações do sistema (2.1);

- **Contribuição do predador para poluição:** representada pelo coeficiente  $\beta_1$ ;
- **Influência da população de presas na poluição:** representada pelo coeficiente  $\gamma_1$ ;
- **Capacidade suporte:** aqui representadas pelos termos  $K_t$  e  $K_c$ .

## 2.2. Condições de contorno

Para as fronteiras, se recorre às condições homogêneas de Robin que considera  $\Gamma_i$ ,  $i = 1, \dots, 8$ , uma partição da fronteira  $\partial\Omega$  e descreve a variação de  $P$ ,  $C$  e  $T$  na fronteira (Santos e Martins, 2022).

As condições de contorno de Robin são definidas por:

$$\begin{cases} -\alpha \frac{\partial P}{\partial \eta}|_{\Gamma_i} = b_i P \\ -\alpha \frac{\partial T}{\partial \eta}|_{\Gamma_i} = t_i T \\ -\alpha \frac{\partial C}{\partial \eta}|_{\Gamma_i} = c_i C \end{cases} \quad (2.2)$$

Em que,  $b_i$ ,  $t_i$ ,  $c_i$ ,  $i = 1, \dots, 8$ , são as constantes de proporcionalidade adequadas para as condições escolhidas em cada parte  $\Gamma_i$  da fronteira,  $\eta$  é o vetor unitário normal em cada parte  $\Gamma_i$  da fronteira. Assim, se entende que há variação de densidade de poluente e das espécies na fronteira.

## 2.3. Condições iniciais

Para o domínio espacial bidimensional  $\Omega$  se considera inicialmente que não há poluição em nenhum ponto da malha espacial, se considera ainda que todos os pontos estão sob as mesmas condições de serem poluídos. Nestas condições, as espécies consideradas para este estudo também estão sob equilíbrio ecológico e condições estáveis de convívio ambiental.

$$\begin{cases} P(x, y, 0) = P_0(x, y) \\ T(x, y, 0) = T_0(x, y) \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y) \end{cases} \quad (2.3)$$

Dessa forma, considerando as condições de contorno e iniciais definidas em (2.2) e (2.3), respectivamente, o modelo matemático (2.1) será reescrito por:



$$\left\{ \begin{array}{l}
\frac{\partial P}{\partial t} = \alpha_1 \left( \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) - u_1 \frac{\partial P}{\partial x} - v_1 \frac{\partial P}{\partial y} - \mu_1 P + \lambda_1 P + \beta_1 PT - \gamma_1 PC \\
\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_2 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - u_2 \frac{\partial T}{\partial x} - v_2 \frac{\partial T}{\partial y} - \mu_2 T + \lambda_2 T \left[ 1 - \frac{\sigma_2 T - \gamma_2 C + \sigma_2 P}{K_t} \right] \\
\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha_3 \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - u_3 \frac{\partial C}{\partial x} - v_3 \frac{\partial C}{\partial y} - \mu_3 C + \lambda_3 C \left[ 1 - \frac{\sigma_3 C + \gamma_3 T + \sigma_3 P}{K_c} \right] \\
-\alpha \frac{\partial P}{\partial \eta} |_{\Gamma_i} = b_i P \\
-\alpha \frac{\partial T}{\partial \eta} |_{\Gamma_i} = t_i T \\
-\alpha \frac{\partial C}{\partial \eta} |_{\Gamma_i} = c_i C \\
P(x, y, 0) = P_0(x, y) \\
T(x, y, 0) = T_0(x, y) \\
C(x, y, 0) = C_0(x, y)
\end{array} \right. \quad (2.4)$$

## 2.4. Esquemas numéricos

Para obter aproximações computacionalmente do sistema (2.4), o modelo e o domínio foram discretizados visando aproximação numérica da solução pelo método de diferenças finitas centrais para a variável espacial e o método de diferenças finitas de Crank-Nicolson para a variável temporal, ambos os métodos são de segunda ordem. Para as fronteiras considerou-se as condições de Robin (Prestes e Meyer, 2013). A escolha dos métodos devem-se à estabilidade numérica se comparados aos outros de mesma ordem e margens de erros, que são de ordem quadrática em ambas as variáveis.

## 2.5. Discretização da variável temporal

Aqui será apresentado o método de Crank-Nicolson (Prestes e Meyer, 2013), de segunda ordem de aproximação para a variável temporal.

Este esquema numérico consiste em, primeiramente, particionar o intervalo de tempo  $[0, \tau]$  em  $r$  subintervalos regulares de tamanho  $\Delta t$ , de modo que a partição uniforme resultante dessa discretização seja dada por  $\{t_0 = 0, t_1, t_2, \dots, t_r = \tau\}$ , sendo  $t_{n+1} - t_n = \Delta t$ , para  $n = 1, \dots, r - 1$ .

De acordo com Prestes e Meyer (2013), para se obter a densidade da

poluição  $P$  ao longo do tempo  $P^n$  e  $P^{n+1}$  no ponto  $P_i$ , se calcula por:

$$P_i^n = P_i^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{(-\frac{\Delta t}{2})^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + 0(\Delta t)^3 \quad (2.5)$$

$$P_i^{n+1} = P_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{(\frac{\Delta t}{2})^2}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + 0(\Delta t)^3. \quad (2.6)$$

Fazendo (2.6) – (2.5) obtêm-se:  $P_i^{n+1} - P_i^n = \frac{\Delta t \partial P}{\partial t}$  que resulta em

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{\Delta t}. \quad (2.7)$$

Agora fazendo (2.6) + (2.5) se obtém  $P_i^{n+1} + P_i^n = 2P_i^{n+\frac{1}{2}}$  que resulta em

$$P_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{P_i^{n+1} + P_i^n}{2}, \quad (2.8)$$

para encontrar a concentração da poluição no instante  $t = n + \frac{1}{2}$ .

Deste modo, se chega à discretização da variável temporal (Prestes e Meyer, 2013).

Vale lembrar que:

$\Delta x$  e  $\Delta y$  são os tamanhos das malhas da discretização espacial nos eixos das abscissas e das ordenadas, respectivamente,  $\Delta t$  será o incremento no tempo,  $P_{i,j}^n$  aproxima o valor de  $P(x_i, y_j)$  no instante  $t_n$ .

## 2.6. Discretização do termo espacial

O ponto  $P_{i,j}$  é o valor aproximado da concentração de  $P$  em  $(x_i, y_j) \in \Omega$ . Uma idéia geométrica do método de diferenças finitas centrais é representado na figura 1.

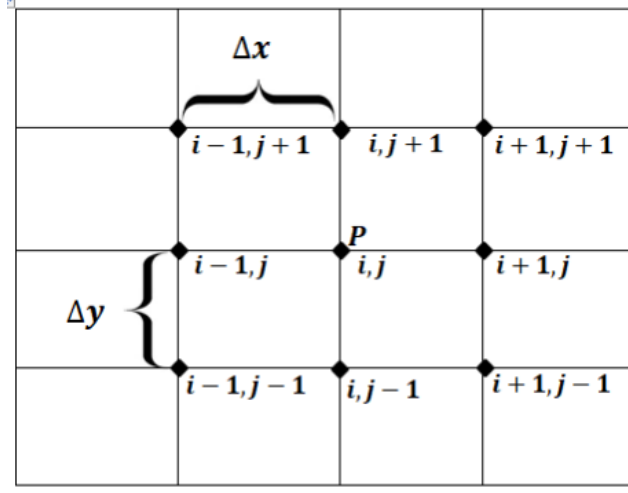


Figura 1: Esquema geométrico do método de diferenças finitas centrais.

A aproximação da solução numérica para o modelo (2.4) será pelo método de diferenças finitas centrais para variável espacial (Leveque, 2007).

Escrevendo as aproximações de primeira e segunda ordem dos pontos  $x_{i+1}$  e  $x_{i-1}$  da expansão em série de Taylor, tem-se:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + r_2(h) \quad (2.9)$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)(x_{i-1} - x_i)^2}{2} + r_2(h) \quad (2.10)$$

Fazendo (2.9) - (2.10) se obtém:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad (2.11)$$

que equivale a escrever

$$\frac{\partial P}{\partial x} \approx \frac{P_{i_{es}} - P_{i_{di}}}{2\Delta x} \quad (2.12)$$

e

$$\frac{\partial P}{\partial y} \approx \frac{P_{i_{ab}} - P_{i_{ac}}}{2\Delta y}. \quad (2.13)$$

Fazendo (2.9) + (2.10) se obtém:

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (2.14)$$

que equivale a

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \approx \frac{P_{ies} - 2P_i + P_{idi}}{\Delta x^2}, \quad (2.15)$$

e

$$\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \approx \frac{P_{iab} - 2P_i + P_{iac}}{\Delta y^2}, \quad (2.16)$$

## 2.7. Discretização do domínio da aplicação

O modelo matemático (2.4) e o domínio  $\Omega$  foram discretizados visando uma solução por aproximação numérica pelo método de diferenças finitas de Crank-Nicolson no tempo e diferenças finitas centrais na dimensão espacial (Prestes e Meyer, 2013).

Se considerou o domínio retangular  $\Omega = (a, b) \times (a, c) \subset \mathbb{R}^2$  aberto, não vazio e fronteira suficientemente regular que contém em seu interior o Igarapé do Pantanal com aproximadamente  $18.000 \text{ m}^2$  de superfície, no município de São Sebastião do Uatumã-AM, afetada pela poluição. Além disso, se considerou  $\Omega$  uma região plana com dimensões  $60\text{m} \times 300\text{m}$ .

O processo de discretização do domínio visando o uso do método de diferenças finitas centrais para a variável espacial é feito da seguinte forma: considere os intervalos  $(a, b)$  e  $(a, c)$  particionados, respectivamente, em  $mx$  e  $my$  subintervalos. A figura 2 ilustra uma malha para o domínio bidimensional  $\Omega$ , usando um espaçamento  $\Delta x = 0,3$  e  $\Delta y = 0,09$ .

Os nós da malha são enumerados, considerando-se  $nnx = mx + 1$  e  $nnx = my + 1$  como sendo o número de nós nos eixos  $x$  e  $y$ , respectivamente.

A discretização do domínio bidimensional está apresentada na figura 2, a seguir.

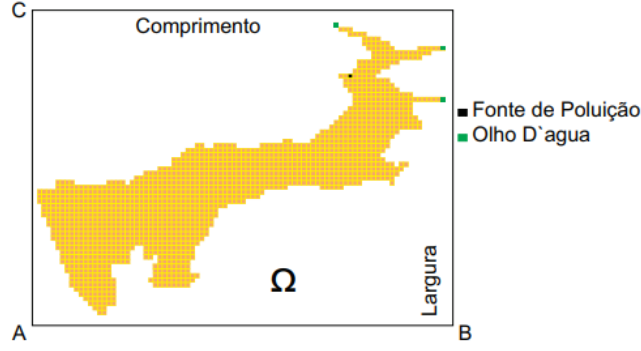


Figura 2: Discretização espacial pelo método de diferenças finitas centrais.

## 2.8. Discretização do modelo (2.4)

Nesta seção, são apresentados os processos de discretização nas variáveis temporais e espaciais do modelo (2.4).

A discretização da primeira equação do modelo (2.4) pelo método de diferenças finitas centrais para pontos interiores da malha espacial, consiste em substituir a equação (2.15) no termo de difusão em  $x$ , (2.16) no termo de difusão em  $y$ , (2.12) no termo de advecção em  $x$  e (2.13) no termo de advecção em  $y$  para um tempo  $t = n + \frac{1}{2}$  resultando em:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = & \alpha_1 \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + P_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + \frac{P_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - 2P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + P_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right] - \\
 & -u_1 \left[ \frac{P_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - P_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x} \right] - v_1 \left[ \frac{P_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - P_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y} \right] - \\
 & (\mu_1 - \lambda_1) P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} - \lambda_1 P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} \left( -\beta_1 T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + \gamma_1 C_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Para a variável temporal a discretização do modelo (2.4) será realizada pelo método de diferenças finitas de Crank-Nicolson. Este processo equivale substituir em (2.17) as equações (2.7) na variação temporal e (2.8) nos termos  $P_i^{n+\frac{1}{2}}$ , resultando em:

$$\begin{aligned}
\frac{P_{(i)}^{n+1} - P_{(i)}^n}{\Delta t} = & \alpha_1 \left[ \frac{\frac{P_{(i+m)}^{n+1} + P_{(i+m)}^n}{2} - 2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} + \frac{P_{(i-m)}^{n+1} + P_{(i-m)}^n}{2}}{\Delta x^2} + \right. \\
& + \left. \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^n}{2} - 2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} + \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^n}{2}}{\Delta y^2} \right] - \\
u_1 & \left[ \frac{\frac{P_{(i+m)}^{n+1} + P_{(i+m)}^n}{2} - \frac{P_{(i-m)}^{n+1} + P_{(i-m)}^n}{2}}{2\Delta x} \right] \\
-v_1 & \left[ \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^n}{2} - \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^n}{2}}{2\Delta y} \right] - (\mu_1 - \lambda_1) \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} \\
-\lambda_1 & \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} \left[ -\beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right]
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Após alguns procedimentos algébricos em (2.18) se obtém:

$$\begin{aligned}
P_{(i)}^{n+1} - P_{(i)}^n = & \Delta t \alpha_1 \left[ \frac{\frac{P_{(i+m)}^{n+1} + P_{(i+m)}^n}{2} - 2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} + \frac{P_{(i-m)}^{n+1} + P_{(i-m)}^n}{2}}{2\Delta x^2} + \right. \\
& + \left. \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^n}{2} - 2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} + \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^n}{2}}{2\Delta y^2} \right] - \\
\Delta t u_1 & \left[ \frac{\frac{P_{(i+m)}^{n+1} + P_{(i+m)}^n}{2} - \frac{P_{(i-m)}^{n+1} + P_{(i-m)}^n}{2}}{4\Delta x} \right] \\
-\Delta t v_1 & \left[ \frac{\frac{P_{(i+1)}^{n+1} + P_{(i+1)}^n}{2} - \frac{P_{(i-1)}^{n+1} + P_{(i-1)}^n}{2}}{4\Delta y} \right] - \Delta t (\mu_1 - \lambda_1) \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} \\
-\Delta t \lambda_1 & \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} \left[ -\beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right]
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Agrupando os termos em (2.19) no mesmo passo de tempo de modo conveniente, se chega a:

$$\begin{aligned}
& P_{(i-1)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v_1}{4\Delta y} \right) + P_{(i)}^{n+1} \left( 1 + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t \mu_1}{2} \right) + \\
& P_{(i-m)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+1)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v_1}{4\Delta y} \right) \\
& + P_{(i+m)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^{n+1} \left[ \beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} - \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right] \\
= & P_{(i-1)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v_1}{4\Delta y} \right) + P_{(i)}^n \left( 1 - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t \mu_1}{2} \right) + \\
& P_{(i-m)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+1)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v_1}{4\Delta y} \right) \\
& + P_{(i+m)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) - \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^n \left[ -\beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right]
\end{aligned}$$

As aproximações das soluções nos pontos interiores da malha discretizada para as demais equações do sistema (2.4) é análoga ao apresentado para primeira equação do referido sistema. Para ver mais detalhes consultar Santos (2023); Prestes e Meyer (2013).

Para obter estimativa das derivadas nas fronteiras da concentração de poluente  $P$ , se considera:

1. **Fronteira horizontal superior** Nesse caso,  $\frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{\partial P}{\partial y}$ . Daí, considerando  $\partial_y \notin \Omega$ , segue que  $\frac{\partial P}{\partial \eta} = -b_1 \frac{P}{\alpha_1}$ .

Com alguns procedimentos algébricos se tem que a aproximação da solução na fronteira horizontal superior é dada por:

$$\begin{aligned}
& P_{(i-mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + \\
& P_{(i)}^{n+1} \left( 1 + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t \mu_1}{2} + \frac{b_1 \Delta t}{\Delta y} - \frac{b_1 \Delta t v_1}{2\alpha_1} \right) + \\
& P_{(i-1)}^{n+1} \left( -\frac{\alpha_1 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) + \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^{n+1} \left[ \beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} - \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right] \\
& = P_{(i-mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + \\
& + P_{(i)}^n \left( 1 - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t \mu_1}{2} - \frac{b_1 \Delta t}{\Delta y} - \frac{b_1 \Delta t v_1}{2\alpha_1} \right) + \\
& + P_{(i-1)}^n \left( \frac{\alpha_1 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) - \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^n \left[ -\beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right]
\end{aligned}$$

## 2. Fronteira horizontal inferior

O tratamento dado às fronteiras horizontal inferior, vertical à esquerda e vertical à direita são análogos aos realizados na horizontal superior. Portanto, os procedimentos numéricos serão omitidos e apresentados apenas os resultados dos agrupamentos.

$$\begin{aligned}
& P_{(i-mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) \\
& + P_{(i)}^{n+1} \left( 1 + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t \mu_1}{2} + \frac{b_2 \Delta t}{\Delta y} + \frac{b_2 \Delta t v_1}{2\alpha_1} \right) + \\
& + P_{(i+1)}^{n+1} \left( -\frac{\alpha_1 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) + \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^{n+1} \left[ \beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} - \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right] \\
& = P_{(i-mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) + P_{(i+mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_1}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_1}{4\Delta x} \right) \\
& + P_{(i)}^n \left( 1 - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t \alpha_1}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t \mu_1}{2} - \frac{b_2 \Delta t}{\Delta y} - \frac{b_2 \Delta t v_1}{2\alpha_1} \right) + \\
& + P_{(i+1)}^n \left( \frac{\alpha_1 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) - \Delta t \frac{\lambda_1}{2} P_{(i)}^n \left[ -\beta_1 \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \gamma_1 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right]
\end{aligned}$$

Nas demais fronteiras o processo é semelhante.

Para a população  $T$  dos predadores que corresponde a segunda equação do modelo (2.4), nos pontos interiores da malha discretizada, o processo de discretização será da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = & \alpha_2 \left[ \frac{T_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - 2T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + T_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + \frac{T_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - 2T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + T_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right] - \\ & -u_2 \left[ \frac{T_{(i+mx)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{(i-mx)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x} \right] - v_2 \left[ \frac{T_{(i+1)}^{n+\frac{1}{2}} - T_{(i-1)}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y} \right] - (\mu_2 - \lambda_2)T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} - \\ & -\lambda_2 T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} \left[ \frac{T_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} - \gamma_2 C_{(i)}^{n+\frac{1}{2}} + \sigma_2 P_{(i)}^{n+\frac{1}{2}}}{K_t} \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

Aplicando em (2.20) o termo temporal de Crank-Nicolson similar ao realizado em (2.19), se obtém:

$$\begin{aligned} \frac{T_{(i)}^{n+1} - T_{(i)}^n}{\Delta t} = & \alpha_2 \left[ \frac{\frac{T_{(i+mx)}^{n+1} + T_{(i+mx)}^n}{2} - 2\frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \frac{T_{(i-mx)}^{n+1} + T_{(i-mx)}^n}{2}}{\Delta x^2} + \right. \\ & + \left. \frac{\frac{T_{(i+1)}^{n+1} + T_{(i+1)}^n}{2} - 2\frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} + \frac{T_{(i-1)}^{n+1} + T_{(i-1)}^n}{2}}{\Delta y^2} \right] - \\ & -u_2 \left[ \frac{\frac{T_{(i+mx)}^{n+1} + T_{(i+mx)}^n}{2} - \frac{T_{(i-mx)}^{n+1} + T_{(i-mx)}^n}{2}}{2\Delta x} \right] \\ & -v_2 \left[ \frac{\frac{T_{(i+1)}^{n+1} + T_{(i+1)}^n}{2} - \frac{T_{(i-1)}^{n+1} + T_{(i-1)}^n}{2}}{2\Delta y} \right] - (\mu_2 - \lambda_2) \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} \\ & -\lambda_2 \left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} \right) \left[ \frac{\left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2} \right)}{2K} - \gamma_2 \frac{\left( \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2} \right)}{2K} + \sigma_2 \frac{\left( \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2} \right)}{2K} \right] \end{aligned} \quad (2.21)$$

Após alguns procedimentos algébricos em (2.21) e agrupando os termos no mesmo passo de tempo de modo conveniente, se obtém:



$$\begin{aligned}
& T_{(i-mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i-1)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v_2}{4\Delta y} \right) + \\
& + T_{(i)}^{n+1} \left( 1 + \frac{\Delta t \lambda_2}{2} + \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t \mu_2}{2} \right) + \\
& + T_{(i+1)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v_2}{4\Delta y} \right) + T_{(i+mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + \\
& + \lambda_2 \frac{\Delta t}{2} T_{(i)}^{n+1} \left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2K} - \gamma_2 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2K} + \sigma_2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2K} \right) = \\
& T_{(i-mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i-1)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta y^2} + \frac{\Delta t v_2}{4\Delta y} \right) + \\
& + T_{(i)}^n \left( 1 - \frac{\Delta t \lambda_2}{2} - \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t \mu_2}{2} \right) + \\
& + T_{(i+1)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta y^2} - \frac{\Delta t v_2}{4\Delta y} \right) + T_{(i+mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) - \\
& - \lambda_2 \frac{\Delta t}{2} T_{(i)}^n \left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2K} - \gamma_2 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2K} + \sigma_2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2K} \right)
\end{aligned}$$

Para obter estimativa das derivadas nas fronteiras para espécie  $T$ , se considera:

### 1. Fronteira horizontal superior

Nesse caso,  $\frac{\partial T}{\partial \eta} = \frac{\partial T}{\partial y}$ . Daí, considerando  $\partial_y \notin \Omega$ , segue que  $\frac{\partial T}{\partial \eta} = -t_2 \frac{T}{\alpha_2}$ .

Com alguns procedimentos algébricos e agrupando os termos no mesmo passo de tempo se tem que a aproximação da solução na fronteira horizontal superior é dada por:

$$\begin{aligned}
& T_{(i-mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i+mx)}^{n+1} \left( -\frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i-1)}^{n+1} \left( -\frac{\alpha_2 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) \\
& + T_{(i)}^{n+1} \left( 1 - \frac{\Delta t \lambda_2}{2} + \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta y^2} + \frac{\Delta t \mu_2}{2} + \frac{t_2 \Delta t}{\Delta y} - \frac{t_2 \Delta t v_2}{2\alpha_2} \right) \\
& + \lambda_2 \frac{\Delta t}{2} T_{(i)}^{n+1} \left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2K} - \gamma_2 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2K} + \sigma_2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2K} \right) = \\
& T_{(i-mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} + \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i+mx)}^n \left( \frac{\Delta t \alpha_2}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t u_2}{4\Delta x} \right) + T_{(i-1)}^n \left( \frac{\alpha_2 \Delta t}{2\Delta y^2} \right) - \\
& + T_{(i)}^n \left( 1 + \frac{\Delta t \lambda_2}{2} - \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta x^2} - \frac{\Delta t \alpha_2}{\Delta y^2} - \frac{\Delta t \mu_2}{2} - \frac{t_2 \Delta t}{\Delta y} + \frac{t_1 \Delta t v_2}{2\alpha_2} \right) \\
& - \lambda_2 \frac{\Delta t}{2} T_{(i)}^n \left( \frac{T_{(i)}^{n+1} + T_{(i)}^n}{2K} - \gamma_2 \frac{C_{(i)}^{n+1} + C_{(i)}^n}{2K} + \sigma_2 \frac{P_{(i)}^{n+1} + P_{(i)}^n}{2K} \right)
\end{aligned}$$

Nas demais fronteiras o processo é semelhante.

Para contornar a não linearidade, o sistema foi resolvido aplicando os mesmos procedimentos adotados por Santos (2023).

De modo sucinto, se tem:

$$\begin{aligned} A_I (P^n, T^n, C^n, P^{n+1}, T^{n+1}, C^{n+1}) P_I^{n+1} = \\ B_I (P^n, T^n, C^n, P^{n+1}, T^{n+1}, C^{n+1}) P_I^n \end{aligned}$$

com condições iniciais  $P_I^{(0)} = (P_I^{(0)}, P_{I_2}^{(0)}, \dots, P_{I_n}^{(0)})$ ,  $I = 1, 2, 3$ .

Os processos iterativos são obtidos mediante o seguinte algoritmo:

1. Se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_1 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}) P^{(*)} = \\ B_1 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}) P^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $P^{(*)}$ ;

2. Agora, se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_2 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(0)}, C^{(0)}) T^{(*)} = \\ B_2 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(0)}, C^{(0)}) T^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $T^{(*)}$ ;

3. Em seguida, se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_3 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(*)}, C^{(0)}) C^{(*)} = \\ B_3 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(*)}, C^{(0)}) C^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $C^{(*)}$ ;

4. Então, se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_1 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(*)}, C^{(*)}) P^{(**)} = \\ B_1 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(*)}, T^{(*)}, C^{(*)}) P^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $P^{(**)}$ ;

5. Agora, se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_2 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(**)}, T^{(*)}, C^{(*)}) T^{(**)} = \\ B_2 (P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(**)}, T^{(*)}, C^{(*)}) T^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $T^{(**)}$ ;

6. Então, se resolve o sistema

$$\begin{aligned} A_3(P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(**)}, T^{(**)}, C^{(*)}) C^{(**)} = \\ B_3(P^{(0)}, T^{(0)}, C^{(0)}, P^{(**)}, T^{(**)}, C^{(*)}) C^{(0)} \end{aligned}$$

obtendo o vetor  $C^{(**)}$ ;

7. Procedendo de maneira análoga, se obtém, sucessivamente,  $P^{(***)}$ ,  $T^{(***)}$  e  $C^{(***)}$  até que se definam as aproximações dos vetores  $P^{(1)}$ ,  $T^{(1)}$  e  $C^{(1)}$ ;
8. Os procedimentos de 1 a 7 são repetidos para  $P^{(n)}$ ,  $T^{(n)}$  e  $C^{(n)}$  no lugar de  $P^{(0)}$ ,  $T^{(0)}$  e  $C^{(0)}$ , após as iterações internas, para se obter o  $(n+1)$ -ésimo termo da iteração temporal,  $P^{(n+1)}$ ,  $T^{(n+1)}$  e  $C^{(n+1)}$ .

Esse método denominado preditor-corretor, definido no âmbito de uma discretização para Crank-Nicolson, irá melhorar as aproximações da ordem de  $(\Delta t)^2$  em cada iteração temporal.

### 3. Resultados numéricos do modelo (2.4)

Nesta seção, são apresentados os resultados numéricos das simulações computacionais considerando o modelo (2.4), que descreve as dinâmicas do sistema presa-predador, diante da dispersão de poluição no corpo aquático.

#### 3.1. Resultados das dinâmicas temporais

Primeiramente, aqui são apresentados os resultados das dinâmicas temporais das espécies descritas no modelo (2.4) para as duas espécies de peixe (sendo uma espécie de presas  $C$  e a outra de predadores  $T$ ) diante da dispersão de poluente  $P$  no corpo aquático do Igarapé do Pantanal.

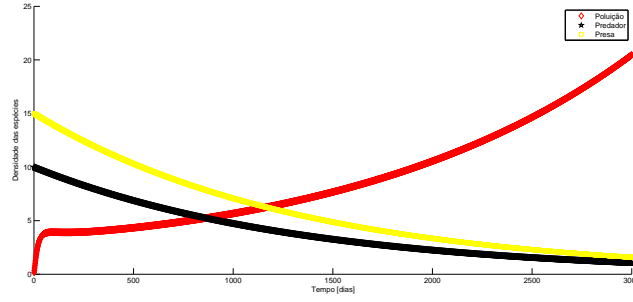


Figura 3: Dinâmicas temporais de  $P$  (vermelho),  $T$  (preto) e  $C$  (amarelo),  $\Delta t = 0,5$ .

As curvas apresentadas na figura 3 descrevem a partir das condições iniciais o comportamento no tempo das duas espécies de peixes  $T$ ,  $C$  diante da dispersão da poluição  $P$ , como resultado das simulações numéricas.

Os resultados mostram que, inicialmente, não havia poluição no meio e que as espécies  $T$  e  $C$  desenvolviam suas dinâmicas normalmente, com o passar do tempo o poluente  $P$  começa seu processo de dispersão causada pelo fenômeno difusivo-advectivo e se espalha ao longo do corpo aquático afetando as dinâmicas das espécies consideradas, ou seja, no decorrer do tempo essas espécies reduziram suas densidades populacionais devido a poluição.

Nesse cenário, é possível constatar que, ao longo do tempo, as densidades populacionais se reduzem, tendendo ambas as espécies para a extinção.

### 3.2. Resultados das dinâmicas espaciais

Aqui são apresentados os resultados das dinâmicas espaciais das espécies representadas no modelo (2.4) das duas espécies de peixe (sendo uma espécie de presas  $C$  e a outra de predadores  $T$ ) diante da dispersão de poluente  $P$  no corpo aquático do Igarapé do Pantanal.

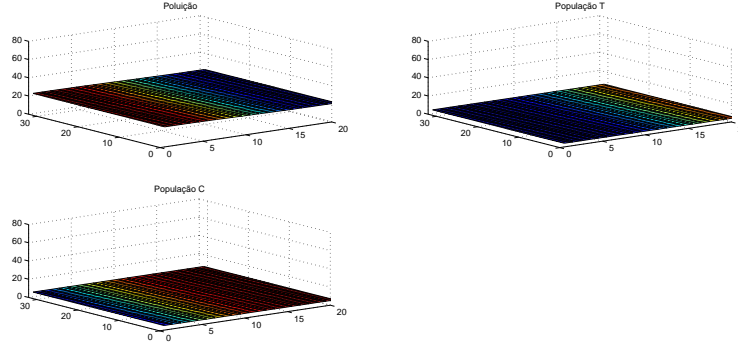


Figura 4: Dinâmica espacial de  $P$ ,  $T$  e  $C$ ,  $\Delta t = 0, 1$ .

Se nota que a dispersão da poluição  $P$  devido a difusão e a advecção afeta grande região do domínio bidimensional ocasionando sérios problemas às predominâncias espaciais das espécies de presas  $C$  e de predadores  $T$  em toda região considerada na simulação.

Vale resaltar que cores próximas do azul indicam baixa concentração das espécies e da poluição e próximas ao vermelho, alta concentração da espécie e da poluição.

A figura 4 descreve os efeitos da poluição descrita pela primeira equação do modelo (2.4) sobre as espécies  $T$  e  $C$ . Se pode observar o espalhamento natural de  $P$  por todo o domínio, devido aos efeitos da difusão e da advecção, o que provoca fortes alterações nas dinâmicas e a inibição no crescimento natural de ambas espécies. Ainda nessa figura, é possível notar uma região do domínio bidimensional em que a densidade de  $P$  é maior que em outra. Isso pode ser explicado pelo fenômeno advectivo que transporta o poluente em direção a fronteira (dependendo de sua direção).

É possível observar que na região do domínio em que a concentração da poluição é maior (cor vermelha) a concentração da espécie de presas  $C$  é menor quando comparada a outras regiões do domínio, e a concentração da população dos predadores  $T$  nessa mesma região onde a poluição é maior é ainda menor que a de presas  $C$ . Isso pode ser explicado pelo fato da poluição ser mais prejudicial a espécie  $T$  do que a  $C$ .

Pode ser considerado também que parte da população de presas  $C$  se alimente de alguns tipos de resíduos dessa poluição e, por isso, a concentração

de  $C$  próximo a região de maior concentração de  $P$  é maior que a de  $T$ .

## 4. Conclusões

Os resultados apontam que a dispersão de poluentes em corpos aquáticos é extremamente prejudicial à vida, à biodiversidade e ao equilíbrio ecológico a curto, médio e longo prazos, decorrentes de uma série de efeitos negativos de impactos ambientais. Dentre eles, a poluição em meios aquáticos afeta de modo catastrófico o delicado e instável equilíbrio do convívio entre espécies que se inter-relacionam no mesmo habitat.

Neste trabalho, o modelo matemático constituído por três equações diferenciais parciais não-lineares foi desenvolvido com o principal objetivo de descrever qualitativa e quantitativamente a dispersão de um poluente no Igarapé do Pantanal e sua influências nas dinâmicas interativas de presas e predadores, elucidando as futuras condições aquáticas e o tempo de propagação de  $P$  e sua influência nas interações inter e intraespecíficas de  $T$  e  $C$ . Assim, se conclui que o objetivo desse trabalho foi alcançado.

Nas simulações apresentadas nas figuras 3, 4, os resultados obtidos se mostraram de acordo com as expectativas para os fenômenos considerados no modelo (2.4), sendo que o comportamento do processo de dispersão com seus efeitos nas espécies que ali convivem, são coerentes com o que ocorre em situações reais no Igarapé do Pantanal em São Sebastião do Uatumã-AM.

Se pode inferir que, com base nas simulações apresentadas, seria conveniente que as fontes de poluentes que afetam o Igarapé do Pantanal, fossem erradicadas de forma adequada, a fim de se obter uma redução considerável no acúmulo de material impactante nos corpos aquáticos, que compõem a bacia hidrográfica amazônica.

O modelo foi analisado matematicamente e resolvido numericamente. A partir dos resultados obtidos nas simulações computacionais, se conclui o seguinte:

O modelo aqui apresentado pode contribuir para tornar mais eficientes as estratégias de mitigação da dispersão de materiais impactantes em corpos d'água.

O aumento da difusão de poluente provoca grande impacto nas dinâmicas populacionais das espécies;

O fenômeno advectivo é um fator determinante na direção e velocidade em que se propaga a poluição;

Os fenômenos de volatilização e lixiviação considerados no decaimento contribui para amenizar a concentração de poluente.

Se conclui que a matemática aplicada na subárea da ecologia matemática pode e deve ser trabalhada em prol preservação ambiental e do equilíbrio ecológico.

## Referências

- Leveque, R. J. (2007). *Finite volume methods for hyperbolic problems*, volume 1. Cambridge.
- Manoel Neto, F. (2014). Potencial poluidor e risco ambiental dos recursos hídricos de bacia hidrográfica do rio gramame, paraíba, brasil. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa/PB.
- Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16. North Holland.
- Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*, volume 1. Springer.
- Prestes, M. F. B. e Meyer, J. F. C. A. (2013). Dispersão de material impactante em meio aquático: modelo matemático, aproximação numérica e simulação computacional - reservatório do salto grande, americana/sp. *Biomatemática*, 23:43–56.
- Santos, C. e Martins, L. J. (2022). Modelagem matemática para descrever a dispersão de poluente no Igarapé do Pantanal-am. *Biomatemática*, 32:87–104.
- Santos, C. F. L. D. (2023). Modelagem matemática para descrever a recuperação de áreas degradadas na amazônia. *Biomatemática*, 33:41–60.





# Holling-type functional responses of fuzzy population models under cross operations

Beatriz Laiate<sup>1</sup>,

EMAp, FGV – 22.250-900, Rio de Janeiro, RJ.

José R. Alves<sup>2</sup>, João F. C. A. Meyer<sup>3</sup>,

IMECC, Unicamp – 13.083-859, Campinas/SP.

**Abstract.** This paper provides an introductory study on Holling-type functional responses, namely, Holling-types I and II, described in a fuzzy environment. The environment considered is the space of  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy numbers, established from the structure of vector spaces embedded in the class of fuzzy numbers. The arithmetic structure is given by the induced, and cross, arithmetic operations. The parameters involved are written as fuzzy quantities, as well as the population. A brief analysis of the choice of the underlying strongly linearly independent set is made considering the fuzziness associated with the Holling term encloses the work.

**Key words:** *Holling functional responses; fuzzy parameters; strong linear independence;  $\mathcal{S}$ -linearly correlated fuzzy numbers; cross operations.*

## 1. Introduction

Multi-species interactions are known for having very complex dynamics. The classical prey-predator model, originally proposed by Lotka (1925) and Volterra (1926), have been extensively studied in the last decades from several points of view. The original model predicts that the predator population increases proportionally to the encounter with the prey population which, in turn, decreases proportionally to this encounter. As a result, the solution to

---

<sup>1</sup>Beatriz.Laiate@fgv.br, beatrizlaiate@gmail.com

<sup>2</sup>j261237@dac.unicamp.br

<sup>3</sup>joni@ime.unicamp.br

the model depicts fluctuating populations in an ecosystem (May and McLean, 2007). Several rereadings on the prey-predator dynamics were done all over the years. Okubo and Levin (2001), for instance, dealt with two and multispecies population dynamics with spatial dispersion - including prey-predator model. His focus were mainly for the ecological point of view of the phenomenon.

Holling (1959b,a, 1965, 1966) introduced the families called Holling-type functional responses by considering the response of the consumption of prey by individual predators to changes of prey density. His studies involved the sawfly cocoons and small mammals dynamics, and the mathematical expressions:

$$f(x) = cx, \quad x > 0 \quad (1.1)$$

and

$$f(x) = \frac{c}{h+x}, \quad x > 0 \quad (1.2)$$

were provided, being denoted by Holling-Type I response, and Holling-Type II response, respectively. In both equations (1.1) and (1.2),  $x$  denotes the prey density. Holling's contributions still represent a remarkable contribution from the mathematical ecology until nowadays, once some dynamics, such as parasitoids in an ecosystem, for instance, are only well-described with Holling interactions (see (Fernández-Arhex and Corley, 2003) for details). Justified by its scientific relevance, Pervez et al. (2018) presented a study which explains how environmental factors produce different functional response of predators in a multi-species dynamics.

Peixoto et al. (2008), as one of the first studies on prey-predator dynamics using tools from fuzzy sets theory, used a fuzzy rule-based system to study the Holling-Tanner model, assuming a Holling Type II functional response. More recent contributions considered functional responses with uncertainty. Using granular derivative for fuzzy-valued functions, Das et al. (2022) considered prey-predator model under Ivlev's functional response - also known as Type V Holling response. Mondal et al. (2022) considered Holling-type II functional response and interval uncertainty to study prey-pradator model. Sukarsih et al. (2023) used Zadeh's extension principle applied to a Runge-Kutta method to provide numerical solutions to the dynamics.

This manuscript aims to study Holling-type functional responses considering the population and parameters as fuzzy quantities. To this end, a linear algebra approach is used, so that all fuzzy quantities are assumed to belong to vector spaces generated by a *Strongly linearly independent set* (Esmi et al.,

2021). The arithmetic operations employed are called  $\psi$ -arithmetic operations, given by induced and cross operations (Esmi et al., 2021; Laiate et al., 2021b). The structure is organized as follows: The section 2 presents the basic concepts on the algebra used all long the text. The section 3 derives the analytical expressions to represent both population and parameters in the Holling-type I and II functional responses. The section 4 provides a brief analysis on the basis of the vector space considered. The section 5 encloses the paper by presenting some final considerations.

## 2. Fuzzy sets theory

A fuzzy set  $A$  of a topological space  $\mathcal{U}$  is characterized by a function

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

where  $A(x)$  represents the membership degree of each  $x \in \mathcal{U}$  belongs to  $A$ . The application  $\mu_A(\cdot)$  is called the *membership function* of  $A$ , and the set of all fuzzy sets of  $\mathcal{U}$  is denoted by  $\mathcal{F}(\mathcal{U})$ . By notational convenience,  $\mu_A(\cdot)$  is usually written as  $A(\cdot)$ .

For a given topological space  $\mathcal{U}$ , each  $A \in \mathcal{F}(\mathcal{U})$  is completely described by the so-called  $\alpha$ -levels (or levelsets) of  $A$ , given by the relation:

$$[A]_\alpha = \begin{cases} \{x \in \mathcal{U} : A(x) \geq \alpha\}, & \alpha \in [0, 1) \\ \overline{\{x \in \mathcal{U} : A(x) > 0\}}, & \alpha = 0 \end{cases},$$

where  $\overline{X}$  denotes the closure of  $X \subset \mathbb{R}$ . Note that the levelsets of  $A \in \mathcal{F}(\mathcal{U})$  consist on classical subsets of  $\mathcal{U}$ , i.e,  $[A]_\alpha \in \mathcal{P}(\mathcal{U})$ ,  $\forall \alpha \in [0, 1]$ .

A fuzzy number is a normal fuzzy subset of  $\mathbb{R}$  whose  $\alpha$ -levels are compact intervals of  $\mathbb{R}$  (Barros et al., 2017). More specifically,  $A$  is a fuzzy number if the following conditions are fulfilled:

- i) There exists  $x \in \mathbb{R}$  such that  $A(x) = 1$  ( $A$  is normal);
- ii)  $[A]_\alpha \in \mathcal{K}_c$ , where  $\mathcal{K}_c$  is the set of all compact subsets of  $\mathbb{R}$ ;
- iii) The set  $\text{supp}(A) = \{x \in \mathbb{R} : A(x) > 0\}$  is compact.

The set of all fuzzy numbers is denoted by  $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ . It is immediate from definition above that for each  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ , there exist  $a_\alpha^- \leq a_\alpha^+$  such that  $[A]_\alpha = [a_\alpha^-, a_\alpha^+]$ ,  $\forall \alpha \in [0, 1]$ .

As we shall see in the following, the study of arithmetic operations on fuzzy numbers with the arithmetic operations on intervals.

The usual arithmetic operations on fuzzy numbers are given in terms of Zadeh's Extension Principle. In brief words, the standard arithmetic in  $\mathbb{R}_{\mathcal{A}}$  inherits the usual interval arithmetic operations in the following sense: let  $A, B \in \mathbb{R}_{\mathcal{A}}$  be fuzzy numbers given levelwise by  $[A]_{\alpha} = [a_{\alpha}^{-}, a_{\alpha}^{+}]$  and  $[B]_{\alpha} = [b_{\alpha}^{-}, b_{\alpha}^{+}]$ , for all  $\alpha \in [0, 1]$ , and  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Then, the sum, subtraction and scalar multiplication are given, respectively, by

$$\begin{aligned} [A + B]_{\alpha} &= [A]_{\alpha} + [B]_{\alpha} = [a_{\alpha}^{-} + b_{\alpha}^{-}, a_{\alpha}^{+} + b_{\alpha}^{+}] \\ [A - B]_{\alpha} &= [A]_{\alpha} + [B]_{\alpha} = [a_{\alpha}^{-} - b_{\alpha}^{+}, a_{\alpha}^{+} - b_{\alpha}^{-}], \end{aligned} \quad (2.3)$$

and

$$[\lambda A]_{\alpha} = \begin{cases} [\lambda a_{\alpha}^{-}, \lambda a_{\alpha}^{+}], & \lambda \geq 0 \\ [\lambda a_{\alpha}^{+}, \lambda a_{\alpha}^{-}], & \lambda < 0 \end{cases}, \quad (2.4)$$

$\forall \alpha \in [0, 1]$ . From (2.3) and (2.4), we conclude that the space of fuzzy numbers is quasilinear, so that  $(\lambda + \mu)A \leq \lambda A + \mu A$  for all scalar  $\mu, \lambda \in \mathbb{R}$ , where the equality holds whenever  $\mu\lambda \geq 0$  (Bede, 2013). In the meantime, the operations of product and division are given respectively by

$$\begin{aligned} [A \cdot B]_{\alpha} &= [A]_{\alpha} \cdot [B]_{\alpha} = [\min P_{\alpha}, \max P_{\alpha}] \\ [A \div B]_{\alpha} &= [A]_{\alpha} \div [B]_{\alpha} = [\min Q_{\alpha}, \max Q_{\alpha}] \end{aligned}$$

where  $P_{\alpha} = \{a_{\alpha}^{-}b_{\alpha}^{-}, a_{\alpha}^{+}b_{\alpha}^{-}, a_{\alpha}^{-}b_{\alpha}^{+}, a_{\alpha}^{+}b_{\alpha}^{+}\}$  and  $Q_{\alpha} = \left\{\frac{a_{\alpha}^{-}}{b_{\alpha}^{-}}, \frac{a_{\alpha}^{+}}{b_{\alpha}^{-}}, \frac{a_{\alpha}^{-}}{b_{\alpha}^{+}}, \frac{a_{\alpha}^{+}}{b_{\alpha}^{+}}\right\}$ ,  $\alpha \in [0, 1]$ .

As pointed out by several papers, these arithmetic operations are computationally expensive because of the computation of the indexed sets  $P_{\alpha}$  and  $Q_{\alpha}$  for all  $\alpha$ . In addition, as well as the usual sum, the usual product do not have an inverse in general, so that both relations  $A - A \neq 0$  and  $A \div A \neq 1$  hold in general for  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ . Other drawbacks are associated to the usual operation of product, including the impossibility of controlling the width, and the changing shape of the resulting fuzzy number.

The next subsection provides an alternative arithmetic structure for specific subclasses of fuzzy numbers contained in  $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ .

## 2.1. Induced fuzzy arithmetic operations: a vector space structure

As presented previously, the class of fuzzy numbers is not linear under the usual arithmetic operations of sum and scalar multiplication. In order to establish finite-dimensional vector spaces of fuzzy numbers, we recall the notion of symmetry of a fuzzy number.

Let  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  be a fuzzy number given. If there exists  $x \in \mathbb{R}$  so that  $A(x - y) = A(x + y)$ , we say that  $A$  is symmetric with respect to  $x \in \mathbb{R}$  (or simply *symmetric*), and we denote it by  $(A|x)$ .

Let  $\mathcal{A} = \{A_1, A_2, \dots, A_m\} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  be a set of  $m$  fuzzy numbers given. The set of all linear combinations (or *Minkowski combinations*) of  $A_i$  is denoted by the equation (2.5)

$$\mathcal{S}(\mathcal{A}) = \{q_1 A_1 + \dots + q_m A_m : q_1, \dots, q_m \in \mathbb{R}\}. \quad (2.5)$$

If  $B \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$ , then we can write by the equation (2.6)

$$[B]_{\alpha} = q_1 [A_1]_{\alpha} + \dots + q_m [A_m]_{\alpha}, \quad \alpha \in [0, 1]. \quad (2.6)$$

Next, we recall the notion of *Strong Linear Independence* of a set of fuzzy numbers.

**Definition 2.1 ((Esmi et al., 2021))** Let  $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_m\} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  be a set of fuzzy numbers given and  $B \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  be given by  $B = q_1 A_1 + \dots + q_m A_m$ . The set  $\mathcal{A}$  is *Strongly Linearly Independent* (SLI, for short) if, and only if, the following implication holds:

$$(B|0) \Rightarrow q_1 = \dots = q_m = 0.$$

The next theorem is particularly useful to identify if a finite  $\mathcal{A}$  of  $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  is SLI.

**Theorem 2.1 (Esmi et al. (2021))** The set  $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_m\} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  is SLI if and only if the function

$$\psi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$$

given by

$$\psi(x_1, \dots, x_m) = x_1 A_1 + \dots + x_m A_m \quad (2.7)$$

is an isomorphism, where “+” and “ $q_i A_i$ ” stand for the usual operations of sum and scalar multiplication in  $\mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ , respectively.

From Theorem 2.1, we can say that if  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  is SLI and  $B \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$ , then there exists a real-vector  $q = (q_1, \dots, q_m) \in \mathbb{R}^m$  such that  $B = \psi(q_1, \dots, q_m) = q_1 A_1 + \dots + q_m A_m$ . In this case,  $B$  is called an  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy number.

Theorem 2.1 allows us to define arithmetic operations induced from isomorphism  $\psi$  on  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy numbers. Let  $B, C \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  and  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Define

$$\begin{aligned} B +_{\psi} C &\doteq \psi(\psi^{-1}(B) + \psi^{-1}(C)) \\ \lambda \cdot_{\psi} B &\doteq \psi(\psi^{-1}(\lambda B)) \end{aligned} \quad (2.8)$$

For  $B = \psi(q_1, \dots, q_m)$  and  $C = \psi(p_1, \dots, p_m)$ , (2.8) yields the following three well-defined operations of sum, subtraction and scalar multiplication:

$$\begin{aligned} B +_{\psi} C &= (q_1 + p_1)A_1 + \dots + (q_m + p_m)A_m \\ B -_{\psi} C &= (q_1 - p_1)A_1 + \dots + (q_m - p_m)A_m. \\ \lambda \cdot_{\psi} B &= (\lambda q_1)A_1 + \dots + (\lambda q_m)A_m \end{aligned} \quad (2.9)$$

We observe from equation (2.9) that computing the induced arithmetic operations on  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$  is equivalent to computing the arithmetic operations on the real-valued coordinates of the fuzzy numbers involved. Moreover, the space  $(\mathcal{S}(\mathcal{A}), +_{\psi}, \cdot_{\psi})$  turns to be a vector space, with dimension equals to  $m$  (more details on this methodology can be seen in Esmi et al. (2022)).

We henceforth assume that  $\mathbb{R} \subseteq \mathcal{S}(\mathcal{A}) \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}^{\wedge}$ , where

$$\mathbb{R}_{\mathcal{F}}^{\wedge} = \{A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}} : [A]_1 \text{ has a unique element}\} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}.$$

Denote  $\text{core}(B) = [B]_1 = b$  and  $\text{core}(C) = [C]_1 = c$  with  $c \neq 0$ . Note that  $b$  and  $c$  exist and are unique since  $\mathcal{S}(\mathcal{A}) \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}^{\wedge}$ . The operations of product and division  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy numbers are given by

$$\begin{aligned} B \odot_{\psi} C &= c \cdot_{\psi} B +_{\psi} b \cdot_{\psi} C -_{\psi} b \cdot_{\psi} c \\ B \div_{\psi} C &= B \odot_{\psi} C_{\psi}^{-1} \end{aligned} \quad (2.10)$$

where  $C_{\psi}^{-1} = \left(\frac{2}{a_1 c} - \frac{p_1}{c^2}\right)A_1 - \frac{p_1}{c^2}A_2 - \dots - \frac{p_m}{c^2}A_m$  and  $a_1 = \text{core}(A_1)$  (Laiate et al., 2021b). The arithmetic operations defined by (2.10) can be seen as linearized operations of product and division (Laiate et al., 2021a), an ideal feature to make  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$  closed under the  $\psi$ -cross product  $\odot_{\psi}$  and the  $\psi$ -cross division  $\div_{\psi}$ .

The so-called  $\psi$ -arithmetic operations  $\otimes_{\psi} \in \{+_{\psi}, -_{\psi}, \odot_{\psi}, \div_{\psi}\}$  are direct extensions of the corresponding arithmetic operations in the classical case,

i.e.,  $\chi_{\{a\}} \otimes_{\psi} \chi_{\{b\}} = a \otimes b$  whenever  $a, b \in \mathbb{R}$ , which are regarded as singletons. The next lemma offers a different point of view to this argument:

**Lemma 2.1** (Adapted from Laiate et al. (2021b)) Let  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}^{\wedge}$  be SLI,  $B, C \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  and  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Then the following equality holds:

$$[B \otimes_{\psi} C]_1 = [B]_1 \otimes [C]_1 \quad \text{and} \quad [\lambda \cdot_{\psi} B]_1 = \lambda[B]_1$$

for all  $\otimes_{\psi} \in \{+_{\psi}, -_{\psi}, \odot_{\psi}, \div_{\psi}\}$ .

For notational convenience, we henceforth omit the symbol ' $\cdot_{\psi}$ ' when the scalar multiplication is referred in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ . The next section presents a brief study on the Holling-type functional responses as functions of the form  $f : \mathcal{S}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$ .

### 3. Holling-type functional responses in $\mathcal{S}(\mathcal{A})$

In this subsection, we assume the populations involved in the functional response are given by  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy functions. By hypothesis, let  $\mathcal{A} = \{1, A_2, \dots, A_m\} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}^{\wedge}$  be an SLI set, and denote  $\text{core}(A_i) = a_i$ , for each  $i = 1, \dots, m$ . In addition, let  $N : [0, T] \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$  the population of predators in a prey-predator dynamic. Thus, we are assuming there exists a real-vector valued function  $n : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^m$  given by

$$n(t) = (n_1(t), \dots, n_m(t)) \in \mathbb{R}^m, \quad t \in [0, T]$$

such that

$$N(t) = (\psi \circ n)(t) = n_1(t) + n_2(t)A_2 + \dots + n_m(t)A_m \quad \forall t \in [0, T],$$

where  $\psi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$  is given by (2.7).

Since the prey density of the ecosystem only assumes positive values in classical population dynamics, we consider that the coordinates of  $N(t)$  in the vector space  $(\mathcal{S}(\mathcal{A}), +_{\psi}, \cdot_{\psi})$  are positive in all instants  $t \in [0, T]$ , i.e.,  $n_i(t) > 0$ ,  $i = 1, \dots, m$ . A similar argument can justify the non-negativity of the coordinates corresponding to the fuzzy rate predation, given by (3.12), and the fuzzy half saturation constant, given by (3.17).

### 3.1. Fuzzy Holling-type I functional response

Let  $C, A \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  be fuzzy quantities given, or estimated according to some data set. The fuzzy Holling-type I functional response, given as in (1.1) for crisp populations, is described by the function  $f : \mathcal{S}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$  given by

$$f(N) = C \odot_{\psi} N, \quad (3.11)$$

where the *consumption rate of predator to prey* is given by the  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy number

$$C = c_1 + c_2 A_2 + \dots + c_m A_m \in \mathcal{S}(\mathcal{A}) \quad (3.12)$$

for some positive constants  $c_1, \dots, c_m > 0$  given. Let us denote  $c = (c_1, \dots, c_m) \in \mathbb{R}^m$ . From (3.12), we have that  $C = \psi \circ c = \psi(c_1, \dots, c_m)$ . In addition, from equation (2.6), we can write

$$[N(t)]_1 = n_1(t)[A_1]_1 + n_2(t)[A_2]_1 + \dots + n_m(t)[A_m]_1 = \sum_{i=1}^m n_i(t)a_i,$$

that is,

$$[N(t)]_1 = \langle n(t), \bar{a} \rangle, \quad (3.13)$$

where  $\bar{a} = (a_1, a_2, \dots, a_m) \in \mathbb{R}^m$  is the vector whose entries are given by  $a_i = \text{core}(A_i)$ ,  $i = 1, \dots, m$ . A similar reasoning leads us to

$$[C]_1 = \sum_{i=1}^m c_i a_i = \langle c, \bar{a} \rangle. \quad (3.14)$$

Since  $A_1 = 1 \in \mathbb{R}$ , from (3.13) and (3.14), we can write (3.11) as

$$\begin{aligned} f(N) &= [N(t)]_1 C +_{\psi} [C]_1 N -_{\psi} [N]_1 [C]_1 \\ &= \langle n(t), \bar{a} \rangle C +_{\psi} \langle c, \bar{a} \rangle N(t) -_{\psi} \langle n(t), \bar{a} \rangle \langle c, \bar{a} \rangle \\ &= \langle n(t), \bar{a} \rangle \psi(c_1, \dots, c_m) +_{\psi} \langle c, \bar{a} \rangle \psi(n_1(t), \dots, n_m(t)) -_{\psi} \langle n(t), \bar{a} \rangle \langle c, \bar{a} \rangle \end{aligned}$$

Therefore, (3.11) is written, in coordinates in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ , as

$$\begin{aligned} f(N) &= (\langle n(t), \bar{a} \rangle c_1 + \langle c, \bar{a} \rangle n_1(t) - \langle n(t), \bar{a} \rangle \langle c, \bar{a} \rangle) \\ &\quad + (\langle n(t), \bar{a} \rangle c_2 + \langle c, \bar{a} \rangle n_2(t)) A_2 \\ &\quad + \dots \\ &\quad + (\langle n(t), \bar{a} \rangle c_m + \langle c, \bar{a} \rangle n_m(t)) A_m \end{aligned} \quad (3.15)$$



Equation (3.15) reveals the Holling-type I functional response as a function in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$  can be decomposed into a Minkowski sum of a crisp contribution with a fuzzy contribution. In fact, (3.15) can be written as

$$f(N) = \underbrace{(b_1(t) - \langle n(t), \bar{a} \rangle \langle c, \bar{a} \rangle)}_{\in \mathbb{R}} + \underbrace{\sum_{i=2}^m b_i(t) A_i}_{\in \mathbb{R}_{\mathcal{F}} \setminus \mathbb{R}},$$

where  $b_i(t) = (\langle n(t), \bar{a} \rangle c_i + \langle c, \bar{a} \rangle n_i(t))$ , for each  $i = 1, \dots, m$ . It follows that, for each  $t \in [0, T]$ , we have

$$\text{diam}(f(N)) = \sum_{i=2}^m |b_i(t)| \text{diam}(A_i),$$

that is, the real-valued function  $b_i : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  are direct related to the diameter of the holling-type I response. Since each  $b_i$  is a function of  $c$  and  $\bar{a}$ , we conclude that the choice of the coordinates of  $C \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  and the SLI set  $\mathcal{A}$  corresponding to the core-vector  $\bar{a} = (a_1, \dots, a_m)$  determines intrinsically the uncertainty represented by the Holling term.

### 3.2. Fuzzy Holling-type II functional response

Similarly to the previous case, the fuzzy Holling-type II functional response, given as in (1.2) for crisp populations, is described by the function  $f : \mathcal{S}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$  given by

$$f(N) = C \div_{\psi} (H +_{\psi} N), \quad (3.16)$$

where  $C \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$  is given as in (3.12) and the *half saturation constant* is given by the  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy number

$$H = h_1 + h_2 A_2 + \dots + h_m A_m \in \mathcal{S}(\mathcal{A}), \quad (3.17)$$

for some positive constants  $h_1, \dots, h_m > 0$  given. Let us denote  $h = (h_1, \dots, h_m) \in \mathbb{R}^m$ , so that, from (3.17), we have  $H = \psi \circ h = \psi(h_1, \dots, h_m)$ . From (2.10), we have that (3.16) is equivalent to

$$\begin{aligned} f(N) &= C \odot_{\psi} (H +_{\psi} N)_{\psi}^{-1} \\ &= \left[ (H +_{\psi} N(t))_{\psi}^{-1} \right]_1 C +_{\psi} [C]_1 (H +_{\psi} C)_{\psi}^{-1} - \left[ (H +_{\psi} N(t))_{\psi}^{-1} \right]_1 [C]_1. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Using the fact that

$$\left[ (H + {}_\psi N(t))_\psi^{-1} \right]_1 = \frac{1}{[H + {}_\psi N(t)]_1} = \frac{1}{[H]_1 + [N(t)]_1},$$

a reasoning similar to that used in section 3.1 leads us to

$$[H]_1 = \langle h, \bar{a} \rangle,$$

and hence, from the linearity of the inner product  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , we have

$$\left[ (H + {}_\psi N(t))_\psi^{-1} \right]_1 = \frac{1}{\langle h, \bar{a} \rangle + \langle n(t), \bar{a} \rangle} = \frac{1}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle}.$$

Equation (2.10) assures that

$$(H + {}_\psi N(t))_\psi^{-1} = \psi \left( \frac{2}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle} - \frac{h_1 + c_1}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2}, \dots, -\frac{h_m + c_m}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2} \right).$$

Since  $A_1 = 1 \in \mathbb{R}$  and  $A_i \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{R}$  for  $i = 2, \dots, m$ , equation (3.18) can be written, in coordinates in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ , as

$$\begin{aligned} f(N) &= \frac{1}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle} \psi(c_1, \dots, c_m) \\ &+ {}_\psi \langle c, \bar{a} \rangle \psi \left( \frac{2}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle} - \frac{h_1 + c_1}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2}, \dots, -\frac{h_m + c_m}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2} \right) \\ &- {}_\psi \psi \left( \frac{\langle c, \bar{a} \rangle}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle}, 0, \dots, 0 \right) \end{aligned}$$

or, equivalently,

$$\begin{aligned} f(N) &= \left( \frac{c_1 + \langle c, \bar{a} \rangle}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle} - \frac{h_1 + c_1}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2} \right) \\ &- \frac{h_2 + c_2}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2} A_2 - \dots - \frac{h_m + c_m}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle^2} A_m. \end{aligned} \quad (3.19)$$

In resemblance to fuzzy Holling-type I functional response, equation (3.19) reveals the Holling-type II functional response as a function in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$  can be decomposed in a Minkowski sum of a crisp contribution with a fuzzy contribution. In fact, (3.19) can be written as

$$f(N) = \underbrace{\left( \frac{c_1 + \langle c, \bar{a} \rangle}{\langle h + n(t), \bar{a} \rangle} - w_1(t) \right)}_{\in \mathbb{R}} - \underbrace{\sum_{i=2}^m w_i(t) A_i}_{\in \mathbb{R} \setminus \mathbb{R}},$$

where  $w_i(t) = \frac{h_i + c_i}{(h + n(t), \bar{a})^2}$  for each  $i = 1, \dots, m$ . It follows that, for each  $t \in [0, T]$ , we have

$$\text{diam}(f(N)) = \sum_{i=2}^m |w_i(t)| \text{diam}(A_i), \quad (3.20)$$

that is, the real-valued function  $w_i : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  are direct related to the diameter of the holling-type I response. Since each  $w_i$  is a function of  $c$ ,  $h$ , and  $\bar{a}$ , we conclude that the choice of the coordinates of  $C$  and  $H \in \mathcal{S}(\mathcal{A})$ , as well as the SLI set  $\mathcal{A}$  corresponding to the core-vector  $\bar{a} = (a_1, \dots, a_m)$  determines intrinsically the uncertainty represented by the Holling term.

## 4. Analysis on the choice of SLI sets

SLI sets of fuzzy numbers can be built using the power hedges of a non-symmetric trapezoidal fuzzy number via fuzzy modifiers or Zadeh's Extension Principle. In fact, for a given fuzzy number  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  trapezoidal and non-symmetric, the sets given by

$$\{A^i\}_{i=0,1,\dots,m} \quad \text{and} \quad \{\hat{f}_i(A)\}_{i=0,1,\dots,m} \quad (4.21)$$

are SLI for all  $m \in \mathbb{N}$  (Esmi et al., 2021).

We can say that (4.21) shows us that vector spaces generated by linear combinations of SLI sets can be seen as a structure completely determined by a single fuzzy number  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ , when it is choosen to be non-symmetric. In this case, the following definition holds:

**Definition 4.1** (Adapted from Laiate et al. (2023)) *Let  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  be an SLI set given as in equation (4.21), for some  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ , and consider the first-order system of FIVPs*

$$\begin{cases} X_i'(t) = f_i(t, X_1, \dots, X_p) \\ X_i(t_0) = X_0 \in \mathcal{S}(\mathcal{A}) \end{cases}, \quad (4.22)$$

where  $X_i : [a, b] \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$  for  $i = 1, \dots, p$ . Then the fuzzy number  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$  is called a fuzzy basal number of (4.22).

The Holling-type functional responses, presented as functions in  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$  in (3.11) and (3.16), aim to be a tool to be used in fuzzy differential equations for  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy functions. Thus, assuming the SLI sets are

generated for some fuzzy basal number  $A \in \mathbb{R}_{\mathcal{F}}$ , we observe from (3.1) and (3.20) that the choice of  $A$  determines the fuzziness of Holling-term of both types. Moreover, the fuzzy basal number determinates the core-vector  $\bar{a} \in \mathbb{R}^m$  which, intuitively, shall be considered in first place from possible data set given. Note that the curve corresponding to the core of the fuzzy curve of a FDE under the  $\psi$ -arithmetic operations coincides with the classical solution to the corresponding differential equation. It is noteworthy that, in this case, the fuzzy basal number represents the source of uncertainty of an ecological phenomena in which the Holling-type functional response acts.

## 5. Final considerations

This manuscript provided a brief study on Holling-type functional responses as functions of the form  $f : \mathcal{S}(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{A})$ , where

$$\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_m\}$$

is a given finite SLI set. The expressions of the functional responses were deduced using the  $\psi$ -arithmetic operations, well defined in the space of  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy numbers.

Both Type I and Type II Holling terms were expressed in an expression decomposable into a Minkowski sum of a crisp term with a fuzzy term. Analytical relations between these expressions and the coordinates of the parameters involved were made. Here, the parameters and the population were considered as fuzzy quantities. In addition, an introductory analysis on the underlying SLI set was made from the point of view of the *fuzzy basal number* (Laiate et al., 2023). In this case, the fuzzy basal number appeared to be the source of uncertainty of the ecological phenomenon known as Holling-functional responses, widely studied in the literature in the last decades.

This work brings some theoretical novelties from the point of view of fuzzy arithmetic. The  $\psi$ -arithmetic operations maintain the relation called  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlation, well-defined between some families of fuzzy numbers. Thus, fuzzy differential equations associated to these families of functions can model ecological phenomena using the content of this paper, either from the point of view of Fréchet derivative (Esmi et al., 2022; Laiate, 2023), Hilger derivative in time scales (Shahidi et al., 2023), fuzzy fractional derivative (Son et al., 2021), or from control theory (Son et al., 2023).

Lastly, from the point of view of ecological modeling, a contribution is provided since some uncertainties and imprecisions associated with natural phenomena are partially described by parameters and/or populations given by fuzzy quantities. Future papers should include different Holling-types functional responses with numerical simulations to solutions of fuzzy differential equations associated to  $\mathcal{S}(\mathcal{A})$ -linearly correlated fuzzy functions.

## Acknowledgments

The authors would like to thank the School of Applied Mathematics from the Getúlio Vargas Foundation (EMAp/FGV), and the Institute of Mathematics, Statistics and Scientific Computing from the University of Campinas (IMECC/Unicamp).

## References

- Barros, L. C., Bassanezi, R. C., and Lodwick, W. (2017). *First Course in Fuzzy Logic, Fuzzy Dynamical Systems, and Biomathematics*. Studies in Fuzziness and Soft Computing. Springer, Berlin, Heidelberg.
- Bede, B. (2013). *Mathematics of Fuzzy Sets and Fuzzy Logic*. 295. Springer, Berlin, 1st. edition.
- Das, S., Biswas, S., and Das, P. (2022). Study of fear effect on prey–predator model with ivlev-type functional response in fuzzy environment. *New Mathematics and Natural Computation*, 18(03):715–745.
- Esmi, E., Barros, L. C., Santo Pedro, F., and Laiate, B. (2021). Banach spaces generated by strongly linearly independent fuzzy numbers. *Fuzzy Sets and Systems*, 417:110–129.
- Esmi, E., Laiate, B., Santo Pedro, F., and Barros, L. C. (2022). Calculus for fuzzy functions with strongly linearly independent fuzzy coefficients. *Fuzzy Sets and Systems*, 436:1–31.
- Fernández-Arhex, V. and Corley, J. C. (2003). The functional response of parasitoids and its implications for biological control. *Biocontrol Science and Technology*, 13(4):403–413.

- Holling, C. S. (1959a). The components of predation as revealed by a study of small-mammal predation of the european pine sawfly<sup>1</sup>. *The Canadian entomologist*, 91(5):293–320.
- Holling, C. S. (1959b). Some characteristics of simple types of predation and parasitism<sup>1</sup>. *The canadian entomologist*, 91(7):385–398.
- Holling, C. S. (1965). The functional response of predators to prey density and its role in mimicry and population regulation. *The Memoirs of the Entomological Society of Canada*, 97(S45):5–60.
- Holling, C. S. (1966). The functional response of invertebrate predators to prey density. *The Memoirs of the Entomological Society of Canada*, 98(S48):5–86.
- Laiate, B. (2023). On the properties of fuzzy differential equations under cross operations. *Computational and Applied Mathematics*, 42(6):293.
- Laiate, B., Barros, L. C., Santo Pedro, F., and Esmi, E. (2021a). Bidimensional fuzzy initial value problem of autocorrelated fuzzy processes via cross product: the prey-predator model. In *19th World Congress of the International Fuzzy Systems Association (IFSA), 12th Conference of the European Society for Fuzzy Logic and Technology (EUSFLAT), and 11th International Summer School on Aggregation Operators (AGOP)*, pages 171–178. Atlantis Press.
- Laiate, B., Longo, F., Alves, J. R., and Meyer, J. F. C. A. (2023). Numerical solutions of fuzzy population models: A case study for chagas’ disease dynamics. In *North American Fuzzy Information Processing Society Annual Conference*, pages 172–183. Springer.
- Laiate, B., Watanabe, R. A., Esmi, E., Santo Pedro, F., and Barros, L. C. (2021b). A cross product of s-linearly correlated fuzzy numbers. In *2021 IEEE International Conference on Fuzzy Systems (FUZZ-IEEE)*, pages 1–6. IEEE.
- Lotka, A. J. (1925). *Elements of physical biology*. Williams & Wilkins.
- May, R. and McLean, A. R. (2007). *Theoretical ecology: principles and applications*. Oxford University Press.

- Mondal, B., Rahman, M. S., Sarkar, S., and Ghosh, U. (2022). Studies of dynamical behaviours of an imprecise predator-prey model with holling type ii functional response under interval uncertainty. *The European Physical Journal Plus*, 137(1):1–20.
- Okubo, A. and Levin, S. A. (2001). *Diffusion and ecological problems: modern perspectives*, volume 14 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer, 2nd. edition.
- Peixoto, M. S., Barros, L. C., and Bassanezi, R. . C. (2008). Predator–prey fuzzy model. *Ecological Modelling*, 214(1):39–44.
- Pervez, A., Singh, P. P., and Bozdoğan, H. (2018). Ecological perspective of the diversity of functional responses. *European Journal of Environmental Sciences*, 8(2):97–101.
- Shahidi, M., Esmi, E., and Barros, L. C. (2023). A study on fuzzy volterra integral equations for s-correlated fuzzy processes on time scales. *Fuzzy Sets and Systems*, 471:108695.
- Son, N. T. K., Thao, H. T. P., Allahviranloo, T., and Long, H. V. (2023). State feedback control for fractional differential equation system in the space of linearly correlated fuzzy numbers. *Fuzzy Sets and Systems*, 453:164–191.
- Son, N. T. K., Thao, H. T. P., Dong, N. P., and Long, H. V. (2021). Fractional calculus of linear correlated fuzzy-valued functions related to fréchet differentiability. *Fuzzy Sets and Systems*, 419:35–66.
- Sukarsih, I., Supriatna, A., Carnia, E., and Anggriani, N. (2023). A runge-kutta numerical scheme applied in solving predator-prey fuzzy model with holling type ii functional response. *Frontiers in Applied Mathematics and Statistics*, 9:1096167.
- Volterra, V. (1926). *Variazioni e fluttuazioni del numero d’individui in specie animali conviventi*. Società anonima tipografica” Leonardo da Vinci”.