



---

## Trabalho 2

O Trabalho 2 tem o objetivo de avaliar os seus conhecimentos acerca das bibliotecas Numpy e Matplotlib. **Dessa forma, evite usar laços de repetição, priorizando a utilização das funcionalidades das bibliotecas, quando possível.**

- O trabalho será realizado durante a aula de 07/05/2019;
- A realização do trabalho será individual;
- A consulta ao material de aula é livre.
- É vetada a utilização do Google Colab para a realização do trabalho.
- Crie um arquivo notebook no Jupyter para desenvolver os códigos. Nomeie o arquivo com seu nome e sobrenome e submeta o arquivo ipynb no Moodle. **Submeta também o arquivo de dados que você utilizou.**
- Após as submissões, as professoras poderão solicitar explicações do desenvolvimento do trabalho.

### Enunciado:

Após a administração de um medicamento, amostras sanguíneas podem ser recolhidas do paciente em intervalos de tempo específicos, e o seu conteúdo em fármaco analisado. Os dados resultantes podem ser apresentados graficamente de modo a obter um gráfico da concentração do fármaco no sangue em função do tempo. Tipicamente, o eixo vertical apresenta a concentração de fármaco no sangue e o eixo horizontal os tempos para os quais foram obtidas as amostras após administração do fármaco. Quando  $p$  (tempo zero), a concentração no sangue também deverá ser zero. Assim que um fármaco administrado oralmente passa pelo estômago e/ou intestino, é libertado da sua forma de dosagem, e dissolve-se totalmente ou parcialmente, e é absorvido. Com a continuação, as amostras de sangue revelam concentrações aumentadas de fármaco até atingirem um pico máximo de concentração. Depois, os níveis sanguíneos de fármaco decrescem progressivamente.

(Referência: Paiva, S.; Duarte, S. Farmacologia: Exercícios teóricos e práticos. Universidade do Minho, Portugal, 2011.)

O estudo da absorção de um novo fármaco foi realizado, de modo que uma certa dose do medicamento foi administrada à 4 pacientes, caracterizados conforme a tabela abaixo:

Paciente 1	82kg	Feminino
Paciente 2	73kg	Masculino
Paciente 3	85kg	Masculino
Paciente 4	68kg	Feminino

Ao longo de 3 horas, amostras de sangue de cada paciente foram coletadas e analisadas. Os dados foram armazenados no arquivo "**dados\_farmacos.txt**". A primeira coluna desta matriz de dados refere-se ao instante (em minutos) no qual a amostra foi coletada. As demais colunas são as concentrações medidas (em  $\mu g/ml$ ) para os Pacientes 1,2,3 e 4, respectivamente.

1) Utilizando os dados experimentais, faça um gráfico relacionando o tempo transcorrido e a concentração de fármaco no sangue de cada paciente.

2) Construa uma figura contendo 3 gráficos de barras da seguinte forma:

**Gráfico 1:** Gráfico de barras contendo a concentração média das 20 primeiras amostras coletadas de cada paciente.

**Gráfico 2:** Gráfico de dispersão relacionando o peso de cada paciente à sua máxima concentração atingida. Use cores diferentes para diferenciar o sexo do paciente.

**Gráfico 3:** Gráfico de barras contendo o instante no qual a máxima concentração de cada paciente ocorre. (lembre-se que para localizar um elemento você deve converter o numpy array em uma lista e localizar o índice através do comando `lista.index(valor)`).

3) Um pesquisador propôs 3 modelos matemáticos para representar os dados de concentração do paciente 3, à partir dos valores de tempo:

$$\text{Modelo 1: } C = \frac{0.065t}{(0.063t)^2 + 2.5}$$

$$\text{Modelo 2: } C = \frac{0.028t}{(0.03t)^4 + 2.1}$$

$$\text{Modelo 3: } C = \frac{t}{9[(0.077t)^2 + 2.1]}$$

Onde  $C$  é a concentração ( $\mu g/ml$ ) e  $t$  é o tempo após a ingestão ( $min$ ). Faça um gráfico de concentração *versus* tempo contendo os dados experimentais do paciente 3 e o resultado estimado por cada modelo. Com base na análise visual, qual modelo melhor representa os dados?

4) Uma métrica utilizada para a verificação da acurácia de modelos matemáticos é a raiz quadrada do erro quadrático médio, dada pela equação:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{exp_i} - y_{est_i})^2}$$

onde  $N$  corresponde ao número de amostras,  $y_{exp_i}$  são os dados experimentais medidos e  $y_{est_i}$  os dados estimados pelo modelo. Deum modo geral, quanto menor o RMSE, melhor a qualidade do modelo. Calcule o RMSE para os modelos apresentado no item anterior considerando os dados do Paciente 3 e indique qual o melhor modelo para representar esses dados.

**Em todos os gráficos coloque título, nomeie os eixos e coloque legenda, quando apropriado.**