Programação e modelagem básicas em biologia

Renato Marques de Oliveira

Universidade Federal do Ceará
Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular

09/03/2016

Sumário

Nível e Tipo

1. Máquina (Binário)
2. Assembly
3. Baixo nível
   - C
   - Fortran
4. Alto nível
   - Java
   - C++
5. Dinâmica (interpretada)
   - Python
   - Matlab

- Procedural
- OOP
- Funcional

Variáveis, funções e objetos

Um script é estruturado e partir de alguns elementos básicos. Destacam-se:

Objetos Objetos ou Classes são protótipos de elementos manipuláveis. São hierarquizados, maleáveis e podem estar presentes em diferentes scripts e arquivos, necessitando serem definidos apenas uma vez.

Variáveis São blocos da memória que armazenam algum valor ou elemento (fixo ou mutável). Esse elemento pode ser desde de um número até uma instância de uma classe.

Funções São blocos de código que executam comandos pré-determinados. Podem trabalhar a partir de entradas e fornecer valores de saída.

Exemplos

```
import numpy as np
import pylab as py

v1 = np.array([3,2,1])
v1.sort()

v2 = np.empty([2,2])
v2
```

Classes e namespaces

Namespace

Mapeameneto de nomes à objetos. Um *namespace* é gerado quando módulos e objetos são invocados ou instanciados. Não existem relações entre nomes pertencentes a *namespaces* diferentes.

Escopo

O **Escopo** é o bloco onde um *namespace* é diretamente acessível.

```
class Complex:
    def __init__(x, realpart, imagpart):
        x.r = realpart
        x.i = imagpart
x = Complex(2,1)
x.i,x.r
```

Stack

A *Stack*

A *stack* ou “Pilha” é uma região da memória que armazena variáveis temporárias criadas por cada função ou classe.

Call stack

A *Call stack* ou “Pilha de chamadas” é onde cada chamada de função é armazenada, por ordem de invocação, até que seja resolvida.

Variáveis e tipos

- Números

  int — Representam números inteiros entre 2^{32} e -2^{32}.

  long int — Representam números inteiros ilimitados, sujeitos à disponibilidade da memória virtual.

  float — Representam aproximações de números reais através de números inteiros. Se assemelham à notação científica, e são divididos em *significando* e *expoente*.

  boolean — Representam os valores **True** (1) ou **False** (0).

- Strings
- Listas
- Arrays

Floats

Type	Sign	Exponent	Significand field	Total bits		Exponent bias	Bits precision	Number of decimal digits
Half (IEEE 754-2008)	1	5	10	16		15	11	~3.3
Single	1	8	23	32		127	24	~7.2
Double	1	11	52	64		1023	53	~15.9
x86 extended precision	1	15	64	80		16383	64	~19.2
Quad	1	15	112	128		16383	113	~34.0

Figura: Informações gerais sobre diferentes tipos de *floating point numbers*

Declarações

```
import numpy as np
import pylab as py

def f(x,c):
    return x**2 + c

x = np.linspace(-2,2,30)

py.plot(x, f(x,.05))
py.plot([0,2],[0,2])
py.show()
```

Exercício 1

Alerta!

Antes de fazer testes, é sempre bom resetar o *kernel* do seu Jupyter notebook.

1. Visite a documentação do Numpy.
2. Abra um terminal de Python.
3. Execute os comandos abaixo, tente exibir e recuperar elementos das variáveis v1, v2 e v3.

```
v1 = [1,2,3]
v2 = [v1,v1]
v3 = range(10)
```

Exercício 1

1. Crie vetores que guardem o seno e o logaritmo natural de `v1`, `v2` e `v3`.
2. Descubra a média, a variância e o desvio padrão de `v1`, `v2` e `v3`.
3. Crie um vetor unidimensional de 5 zeros.
4. Crie uma matriz 3x3 de uns.

Controle de Fluxo

O loop For

```
for i in <lista ou array>:
    <comandos>
    ...
```

O bloco If

```
if x <operador comparativo> <boolean>:
    <comandos>
    # operadores comparativos: <, <=, ==, =>, >, !=
elif x <operador comparativo> <boolean>:
    <comandos>
else:
    <comandos>
```

Exercício 2

1. Crie um vetor numérico ao seu gosto.
2. Escreva um código que imprima (**print**) na tela todos os elementos do vetor cujo seno seja maior que 0.5.

Exemplo

```
x = np.ones(10)
for i in x:
    if np.sin(i) > .5:
        print(i)
```

Exercício 3

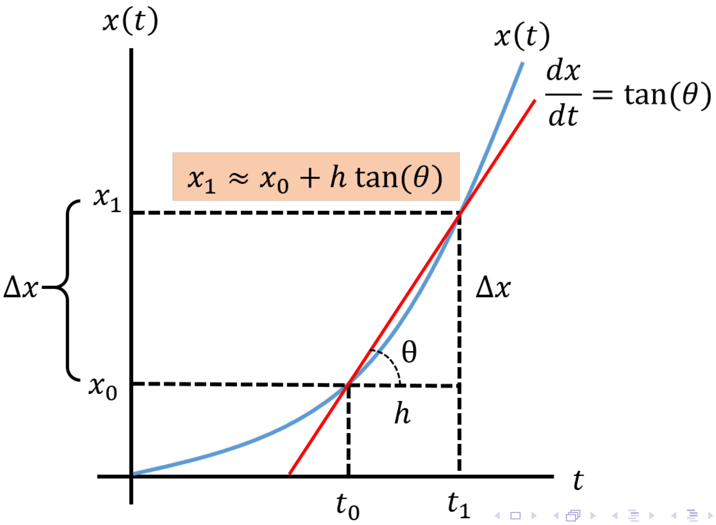
1. Crie um vetor numérico unidimensional a seu gosto.
2. Ignore a função **mean** do **Numpy** e defina uma nova função que retorne a média de um vetor unidimensional e aplique ao vetor que você criou.
3. Crie uma matriz de pelo menos dez linhas a seu gosto, e um vetor com um número correspondente de colunas.
4. Neste último vetor, armazene a saída da função que você definiu quando aplicada à matriz que você criou. Plote este vetor.

Exemplo

Exemplo

```
x = np.ones(10)

def media(vetor):
    return np.sum(vetor)/len(vetor)

a = np.random.rand(30,3)
#y = np.zeros(30)

y = [media(i) for i in a] #opa! Trapaça!

py.plot(y)
```

Método de Euler



Método de Euler

Teorema do Valor Médio

$$F(b) - F(a) = F'(c)(b - a)$$

Método de Euler

$$F(t_n) - F(t_{n-1}) = h = F'(c)(t_n - t_{n-1})$$
$$F(t_n) = F(t_{n-1}) + h = F(t_1) + F'(c)(\Delta t)$$

$$F(t_n) \approx F(t_{n-1}) + F'(t_{n-1})(\Delta t) \tag{1}$$

A estabilidade e a precisão são razoáveis enquanto for satisfeita a condição de Courant-Friedrichs-Lewy, que determina que não se deve tomar um intervalo de tempo maior do que alguma quantidade computável (dada uma discretização do espaço).

Método de Runge-Kutta

$$
\begin{gathered}
F'(t_n) = f(t, x) \\
F(t_{n+1}) \approx F(t_n) + \frac{h}{6}(a + 2b + 2c + d) \\
\text{onde} \\
a = f(t_n, x_n) \\
b = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}a) \\
c = f(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{h}{2}b) \\
d = f(t_n + h, x_n + hc)
\end{gathered} \tag{2}
$$

Exercício 4

Defina um método em Python que resolva uma equação diferencial ordinária de primeira ordem.
Teste esse método com várias equações diferenciais.

Sistemas dinâmicos

Wikipedia

A Teoria de sistemas dinâmicos é a área da matemática utilizada para descrever o comportamento de sistemas dinâmicos complexos, geralmente através da aplicação de equações diferenciais ou equações de diferença. Um sistema dinâmico é um sistema em que uma função descreve a dependência temporal de um ponto situado num espaço geométrico. Exemplos incluem modelos de pêndulos de relógios, o fluxo de água dentro um tubo e a quantidade de peixes em um lago durante a primavera.

Wolfram MathWorld

[Sistema dinâmico] é um modo de descrever como um estado evolui para outro ao longo do tempo. Tecnicamente, um sistema dinâmico é uma ação comportada dos reais ou inteiros sobre outro objeto (normalmente uma *variante*).

Órbitas

Definição

A órbita de um sistema é o conjunto de pontos por ele visitados a cada intervalo de tempo. (Tecnicamente, uma órbita é uma sequência de iterações da regra de evolução de um sistema dinâmico a partir dos valores iniciais das variáveis dependentes)

Para observar a órbita do nosso sistema, precisamos escolher um valor inicial x_0. Em seguida, calculamos a posição do sistema no instante seguinte por $x_1 = F(x_0)$. Depois, repetimos o procedimento, $x_2 = F(x_1)$ e assim por diante, até o instante n. A posição no instante n é dada por

$$\underbrace{F(F(...(F(x_0))))}_{n \text{ vezes}} = \underbrace{F \circ F \circ ... \circ F(x_0)}_{n \text{ vezes}} = F^n(x_0)$$

Teorema do Valor Médio

Teorema

Seja $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$ e F uma função real contínua em $[a, b]$ e diferenciável em (a, b). Então existe $c \in (a, b)$ tal que

$$F(b) - F(a) = F'(c)(b - a) \tag{3}$$

Prova (Esboço)

Defina

$$G(x) = f(x) - f(a) - \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \cdot (b - a)$$

$G(a) = 0$ e $G(b) = 0$ e portanto deve existir algum $c \in (a, b)$ tal que

$$G'(c) = f'(c) - \frac{f(b) - f(a)}{b - a} = 0$$

Teorema do Ponto Fixo

Teorema

Suponha uma função real $F : [a, b] \longrightarrow [a, b]$ *diferenciável no intervalo* $[a, b]$ *e um número real não-negativo* $k < 1$ *e* $|F'(p)| \leq k$ *tal que para qualquer* $p, q \in [a, b]$ *tenhamos*

$$|F(p) - F(q)| \leq k|p - q|$$

Então existe um P *em* $[a, b]$ *tal que* $F(P) = P$*. Adicionalmente, para* $p_0 \in [a, b]$*,*

$$\lim_{n \to \infty} F^n(p_0) = P$$

Esboço de prova

$F^n(p_0)$ é uma forma abreviada de expressar "n iterações de F sobre o valor inicial p_0", e não serve para representar uma potência.

Mas como descobrir um ponto fixo? Uma dica: observe a derivada de F. Se $|F'(p)| < 1$, a distância

$$|F^{n+1}(p) - F^n(p)| = |F'(p_n)||(p_{n+1} - p_n)|$$

tende a diminuir a cada iteração de F, para p_n próximos de P, pois

$$\lim_{n\to\infty} |p_{n+1} - p_n| = \lim_{n\to\infty} k^n |p_1 - p_0| = 0$$

Outro Teorema do Ponto Fixo

Teorema

Suponha uma função real $F : [a, b] \longrightarrow [a, b]$ *contínua. Existe um ponto fixo para* F *em* $[a, b]$.

Prova

Tome $x \in [a, b]$ *e defina* $H(x) = F(x) - x$. *Então*

$$H(a) = F(a) - a \geq 0$$
$$H(b) = F(b) - b \leq 0$$

portanto existe $H(c) = F(c) - c = 0$

Pontos fixos

Definição

Um ponto fixo atrator é um ponto X dentro de um intervalo aberto I para o qual, se $x_0 \in I$, então $F^n(x_0) \in I$ para todo n, além disso $F^n(x_0) \to X$ quando $n \to \infty$.

Definição

Um ponto fixo repulsor é um ponto X dentro de um intervalo I para o qual, se $x_0 \in I$ e $x_0 \neq X$, existe n tal que $F^n(x_0) \notin I$.

Autovalores

Sistema linear homogêneo de 2 dimensões

$$\frac{dx}{dt} = f(x,y) = \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}x + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}y$$
$$\frac{dy}{dt} = g(x,y) = \frac{\partial g(x,y)}{\partial x}x + \frac{\partial g(x,y)}{\partial y}y$$

Representação matricial

Representação matricial

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial g(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial g(x,y)}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Representação matricial no equilíbrio

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} - \lambda & \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial g(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial g(x,y)}{\partial y} - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Equação característica

$$\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} - \lambda\right)\left(\frac{\partial g(x,y)}{\partial y} - \lambda\right) - \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\frac{\partial g(x,y)}{\partial x} = 0$$

Estudo de caso - Sekerci & Petrovskii (2015)

Mathematical Modelling of Plankton–Oxygen Dynamics Under the Climate Change

Yadigar Sekerci[1] · Sergei Petrovskii[1]

Received: 27 June 2015 / Accepted: 12 November 2015

Figura: Modelo populacional de plâncton

Motivação

O plâncton é formado por dois tipos básicos em constante interação: o fitoplâncton produtor de oxigênio e o zooplâncton que é seu predador direto. O fitoplâncton é responsável por aproximadamente 70% do oxigênio da atmosfera via fotossíntese. Antes de chegar à atmosfera, esse oxigênio é antes liberado na água e consumido pelo fitoplâncton durante a noite via respiração. Tanto o consumo de oxigênio pelo fitoplâncton quanto a taxa de difusão do oxigênio da água para a atmosfera são função da temperatura, portanto, variações significativas de temperaturas podem influenciar ambos os processos e seu monitoramento é se vital importância.

Esquema do modelo simples

Fig. 1 Structure of our conceptual model describing the interactions between oxygen, phytoplankton, and zooplankton. *Arrows* show flows of matter through the system. Phytoplankton produces oxygen through photosynthesis during the daytime and consumes it during the night. Zooplankton feeds on phytoplankton and consumes oxygen through breathing; more details are given in the text

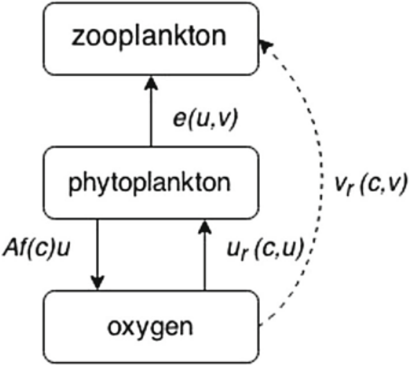


Figura: Dinâmica do oxigênio (dissolvido na água)

Modelo esquemático

$$\frac{dc}{dt} = Af(c)u - u_r(c,u) - v_r(c,v) - mc \tag{4}$$

$$\frac{du}{dt} = g(c,u) - e(u,v) - \sigma u \tag{5}$$

$$\frac{dv}{dt} = \kappa(c)e(u,v) - \mu v \tag{6}$$

c Concentração de oxigênio

u Densidade de fitoplâncton

v Densidade de zooplâncton

Parâmetros

Termos	Descrição
A	Fator ambiental na produção de O_2
$f(c)$	Dissolução de O_2 do citosol para a água
$g(c,u)$	Taca de crescimento do fitoplâncton
$u_r(c,u)$	Taxa de consumo de O_2 por fitoplâncton
$v_r(c,v)$	Taxa de consumo de O_2 por zooplâncton
m	Declínio natural de O_2
$e(u,v)$	Taxa de consumo fitoplâncton por zooplâncton
σ	Coeficiente de mortalidade de fitoplâncton
$\kappa(c)$	Eficiência de conversão de biomassa
μ	Coeficiente de mortalidade de zooplâncton

Modelo expandido

Modelo sem zooplâncton ($v(t) \equiv 0$)

$$\frac{dc}{dt} = \frac{Au}{c+1} - \frac{\delta uc}{c+c2} - c \tag{7}$$

$$\frac{du}{dt} = \left(\frac{Bc}{c+c_1} - u\right) u - \sigma u \tag{8}$$

Isóclinas nulas

$$u\left(\frac{Bc}{c+c_1}-u\right)-\sigma u=0 \Rightarrow u=0$$

$$\text{ou, assumindo} \quad u>0$$

$$\left(\frac{Bc}{c+c_1}-u\right)u\times\frac{1}{u}=-\sigma u\times\frac{1}{u}$$

$$\frac{Bc}{c+c_1}-u=\sigma$$

$$u=\frac{Bc}{c+c_1}-\sigma$$