

# Fernanda de Freitas Ventura



Mestranda em Química, Instituto de Química - USP O título da minha tese é “Avaliação da toxicidade de metais e compostos orgânicos para fungos com ensaio bioluminescente”, orientada pelo Prof. Dr. Cassius Vinicius Stevani. E-mail: fernandaf.ventura@gmail.com

## Exercícios

[Exercício 1](#)

[Exercício 2](#)

[Exercício 3](#)

[Exercício 4](#)

[Exercício 5](#)

[Exercício 6](#)

[Exercício 7](#)

[Exercício 9](#)

## Trabalho Final

### Plano A

Meu mestrado é sobre o estudo da toxicidade de metais pesados a fungos bioluminescentes através do cálculo da inibição da bioluminescência após aplicação do agente tóxico. Uma das vertentes do projeto, depois de estabelecidos os valores de EC50 de cada metal individualmente, é descobrir se há efeitos de interação entre os metais em misturas binárias. Para isso, é utilizada uma equação para calcular o valor teórico de EC50 para a mistura, e esse valor é comparado com o EC50 experimental. A minha proposta é criar uma função que calcule esse EC50 teórico e o relacione com o EC50 obtido nos ensaios toxicológicos, retornando um valor numérico que me permita descobrir qual o tipo de interação ocorreu entre os agentes tóxicos na mistura binária (aditiva, mais que aditiva, sinérgica ou antagônica).

### Plano B

A bioluminescência varia, entre outros fatores, de acordo com a composição do meio e a temperatura ambiente. A proposta do plano B é criar uma função que calcule a variação da emissão de luz (em porcentagem) na comparação entre as diferentes condições dos fatores citados acima. Dessa forma,

será mais fácil analisar a dependência da bioluminescência com tais fatores externos.

## Comentários

Cara Fernanda,

Uma dos pontos envolvendo as funções e que elas devem ser colocadas em um contexto mais geral. Acho que é lícito e desejável que resolva algum problema específico do seu trabalho, mas deve tentar, ao menos em princípio fazer a o mais flexível possível. Algo como: uma função para verificar a interação soluções de mistura binárias de metais pesados em bioensaios. Outra coisa: precisamos saber quais os tipos de objetos (dados) de entrada, quais argumentos a função terá e como será a saída para podermos avaliar as propostas. Aguardamos reformulação. — [Alexandre Adalardo de Oliveira](#) 2012/04/04 14:56

## Resposta aos comentários

Prof. Alexandre,

Obrigada pela revisão da proposta. Segue resposta:

A função poderá ser empregada para qualquer bioensaio. Me referi aos fungos porque trabalho com eles, mas o modo de fazer o cálculo e as variáveis da equação que quero empregar não mudam para demais organismos (ainda que não sejam bioluminescentes).

Os dados de entrada serão as concentrações de metais nas soluções puras (soluções individuais de cada metal) e na mistura; EC50 do metal A, EC50 do metal B (os dois últimos são obtidos experimentalmente, aplicando os metais separadamente no organismo de estudo) e EC50 experimental da mistura. A equação inserida na função para encontrar o EC50 teórico é  $EC50(T) = CM / [(CA/EC50(A)) + (CB/EC50(B))]$ , onde CM = conc. mistura; CA = conc. metal A; CB = conc. metal B; EC50(A) = EC50 do metal A; EC50(B) = EC50 do metal B. Feito o cálculo de EC50 teórico, será feita a divisão deste pelo EC50 experimental e, de acordo com o valor obtido (existem faixas de valores que delimitam cada tipo de interação entre os metais), a função fornecerá o nome da interação (vou colocar, dentro da função, um comando para identificar em qual faixa de valores o resultado foi inserido e, em virtude disso, a função também retornará a categoria de interação - antagônica para valores  $\leq 0.7$ ; aditiva para uma faixa de valores maiores que 0.7 e menores ou iguais a 1.3; mais que aditiva para valores maiores que 1.3 e menores ou iguais a 1.8; sinérgico para  $> 1.8$ ). Desse modo, na saída serão apresentados o EC50 teórico, o resultado da divisão pelo EC50 experimental e o nome da interação.

O plano B é realmente um pouco mais específico, mas ainda assim pode ser aplicado no processo de desenvolvimento de outros bioensaios (como os que empregam culturas de bactérias e algas, um pouco mais comuns que os fungos). O usuário inseriria dados de fótons emitidos pelo organismo (mas poderia ser inserido, alternativamente, valores de crescimento radial ou de biomassa, no caso de espécies que não emitem luz) e especificaria as temperaturas e o teor de nutrientes inseridos no meio (em porcentagem m/m). A função retornaria uma tabela com a síntese das emissões de luz em cada condição de temperatura e composição do meio. A função retornaria também o valor máximo dessa tabela.

Tudo bem? Ah, estou partindo do pressuposto que o usuário já terá feito os experimentos de EC50. O objetivo da função do plano A é apenas juntar os dados experimentais e fazer os cálculos para chegar a uma conclusão final sobre o tipo de interação na mistura.

## Resposta

Tudo bem! Pode tocar. Precisando de ajuda use o Fórum.

Bom trabalho!

— [Alexandre Adalardo de Oliveira](#) 2012/04/05 12:57

## Trabalho final

### Página de ajuda

interacao package: unknown R Documentation

Cálculo de EC50 e determinação do tipo de interação entre compostos em uma mistura binária.

Description:

A função calcula valores de EC50 teóricos para misturas binárias de agentes tóxicos, obtidos através das concentrações dos contaminantes em solução (tanto nas formas puras quanto na mistura) e dos EC50 individuais e experimentais de cada composto. Adicionalmente, a função divide o EC50 teórico calculado pelo EC50 experimental da mistura e, conforme o resultado dessa relação, retorna o nome do tipo de interação existente entre os agentes tóxicos.

Usage:

interacao(CA, CB, CM, EC50A, EC50B, EC50M)

Arguments:

CA Concentração do composto A

CB Concentração do composto B

CM Concentração total dos compostos A e B na mistura

EC50A EC50 do composto A

EC50B EC50 do composto B

EC50M EC50 experimental da mistura binária

Author(s):

Fernanda de Freitas Ventura

References:

Timbrell J. (2000) Principles of biochemical toxicology. Taylor & Francis, Londres.

Borgert C.J., Quill T.F., McCarty L.S., Mason A.M. (2004) Can mode of action predict mixture toxicity for risk assessment? Tox and Appl Pharm, 201: 85-96.

Crawley, M. J. (2007) The R Book. Wiley, New York.

## Details/Values:

Retorna um data frame, onde: a primeira coluna (denominada "EC50 teórico") apresenta o valor de EC50 teórico calculado pela função, a segunda coluna (denominada "EC50(t)/EC50(e)") mostra o valor de EC50 teórico dividido pelo EC50 experimental da mistura binária e a terceira coluna (denominada "Tipo de interação") dá nomes aos tipos de efeitos entre os elementos das misturas.

As faixas de valores que retornam os tipos de efeitos entre os agentes tóxicos e os nomes dos efeitos, utilizadas no desenvolvimento da função, seguem o proposto por Timbrell (2000).

## Warnings:

Para que a função seja executada devidamente, não é possível ter dados faltantes (NA) entre os dados inseridos.

## Examples:

```
teste<-interacao(50,200,25,10,20,2)
teste
```

## Para rodar o próximo exemplo, faça o download do arquivo "Pastal.csv", anexado na mesma página onde essa publicação é exibida.

```
teste2<-read.table("Pastal.csv", header=T, as.is=T, sep=";")
interacao(teste2$CA, teste2$CB, teste2$CM, teste2$EC50A, teste2$EC50B,
teste2$EC50M)
teste2
```

## Código da função

```
interacao<-function(CA, CB, CM, EC50A, EC50B, EC50M)
{
  EC50.teorico=round(CM/((CA/EC50A)+(CB/EC50B)), digits=1)
  relacao.EC50=round(EC50.teorico/EC50M, digits=1)
  v=""
  for(i in 1:(length(relacao.EC50)))
  {
    if(relacao.EC50[i]<=0.7)
    {
      v[i]="Efeito antagônico"
    }
    if(relacao.EC50[i]>0.7&relacao.EC50[i]<=1.3)
    {
      v[i]="Efeito aditivo"
    }
    if(relacao.EC50[i]>1.3&relacao.EC50[i]<=1.8)
    {
      v[i]="Efeito mais que aditivo"
    }
  }
}
```

```
    if(relacao.EC50[i]>1.8)
    {
      v[i]="Efeito sinérgico"
    }
  }
r.EC50<-data.frame(EC50.teorico, relacao.EC50, v)
names(r.EC50)=c("EC50 teórico", "EC50t/EC50e", "Tipo de interação") ##EC50t
= EC50 teórico; EC50e = EC50 experimental
return(r.EC50)
}

## Teste 1: Ok
teste<-interacao(50,200,25,10,20,2)
teste

## Teste 2: usando uma tabela como fonte de dados (arquivo disponível na
página do trabalho final):

teste2<-read.table("Pastal.csv", header=T, as.is=T, sep=";")
interacao(teste2$CA, teste2$CB, teste2$CM, teste2$EC50A, teste2$EC50B,
teste2$EC50M) ##Ok
teste2
```

## Arquivos

[Código da função Pasta 1 \(arquivo do exemplo de utilização da função\)](#)

From:

<http://ecor.ib.usp.br/> - **ecoR**

Permanent link:

[http://ecor.ib.usp.br/doku.php?id=05\\_curso\\_antigo:alunos2012:alunos:trabalho\\_final:fernanda.ventura:start](http://ecor.ib.usp.br/doku.php?id=05_curso_antigo:alunos2012:alunos:trabalho_final:fernanda.ventura:start)

Last update: **2020/08/12 06:04**