



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Instituto de Matemática e Estatística

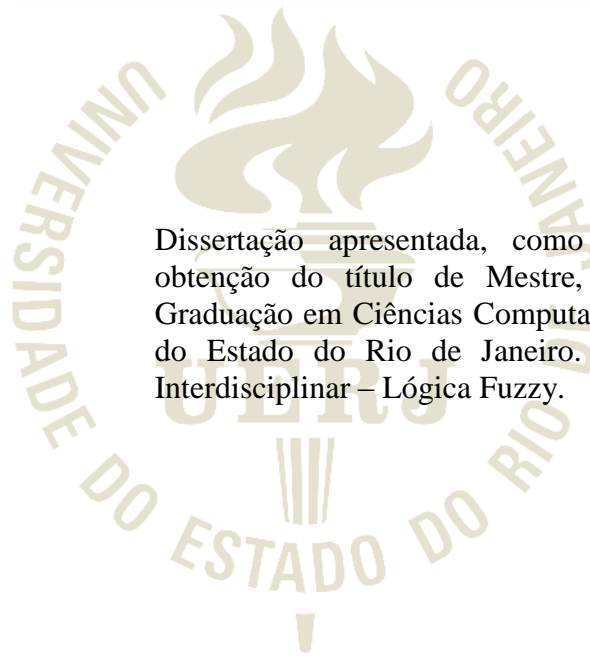
Márcio Coutinho Brandão Côrtes Filho

**Reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do ferro utilizando o
Algoritmo Fuzzy C-Means**

Rio de Janeiro
2012

Márcio Coutinho Brandão Cortes Filho

**Reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do ferro utilizando o Algoritmo Fuzzy
C-Means**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Interdisciplinar – Lógica Fuzzy.

Orientadora: Prof.^a Dra. Regina Serrão Lanzillotti

Rio de Janeiro

2012

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/BIBLIOTECA CTC/A

C828 Côrtes Filho, Márcio Coutinho Brandão.
Reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do Ferro utilizando o Algoritmo Fuzzy C-Means. / Márcio Coutinho Brandão Cortes Filho – 2012.
101f. : il.
Orientadora: Regina Serrão Lanzillotti.
Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Matemática e Estatística.
1. Algoritmos difusos – Teses. 2. Ferro – Análise - Teses.
I. Lanzillotti, Regina Serrão II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto de Matemática e Estatística. III. Título.

CDU 510.22:669.12

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação.

Assinatura

Data

Márcio Coutinho Brandão Cortes Filho

Reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do ferro utilizando o Algoritmo Fuzzy C-Means

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Computacionais, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Interdisciplinar – Lógica Fuzzy.

Aprovado em 15 de agosto de 2012.

Banca Examinadora:

Prof.^a Dra. Regina Serrão Lanzillotti (Orientadora)
Faculdade de Estatística da UERJ

Prof. Dr. Paulo Cezar Martins Ribeiro
Faculdade de Engenharia da UFRJ

Prof.^a Dra. Haydée Serrão Lanzillotti
Faculdade de Nutrição da UERJ

Rio de Janeiro

2012

DEDICATÓRIA

Aos meu avôs Murillo Brandão (*in memoriam*) e Giacomo Augusto Matera (*in memoriam*), pelos ensinamentos e exemplo de força, determinação e carinho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Márcio Coutinho Brandão Côrtes e Cristina Matera, por todo o carinho e dedicação durante esses anos, permitindo indiretamente que eu concretizasse meus sonhos.

À minha futura esposa, Giselle França da Costa, por estar sempre ao meu lado e por me incentivar mesmo nos momentos difíceis.

Ao meu incrível amigo Fellipe de Oliveira Pinto, pela ajuda e incentivo na realização desta dissertação, apesar das dificuldades que se impuseram na sua concretização.

À Professora Regina Serrão Lanzillotti, por sua paciência e dedicação e por me orientar de forma singular, mostrando todo o seu profissionalismo e conhecimento. E por me incentivar na busca pelo conhecimento da estatística, computação e ciência da nutrição.

Aos demais mestres que orientaram a estruturação básica dos conceitos em Biodisponibilidades de Nutrientes e à banca examinadora pelas sugestões que permitiram melhorar este trabalho convergindo ao objetivo proposto.

Ao Instituto de Nutrição da Universidade do Estado do Rio de Janeiro por disponibilizar o Banco de Dados e pelas sugestões apresentadas durante a primeira modelagem *fuzzy*.

RESUMO

CÔRTEZ FILHO, Márcio Coutinho Brandão. *Reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do ferro utilizando o Algoritmo Fuzzy C-Means, Brasil*. 2012. 101 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Computacionais) – Instituto de Matemática e Estatística, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

Este trabalho apresenta um método para reconhecimento do padrão na biodisponibilidade do ferro, através da interação com substâncias que auxiliam a absorção como vitamina C e vitamina A e nutrientes inibidores como cálcio, fitato, oxalato, tanino e cafeína. Os dados foram obtidos através de inquérito alimentar, almoço e jantar, em crianças de 2 a 5 anos da única Creche Municipal de Paraty-RJ entre 2007 e 2008. A Análise de Componentes Principais (ACP) foi aplicada na seleção dos nutrientes e utilizou-se o Algoritmo *Fuzzy C-Means* (FCM) para criar os agrupamentos classificados de acordo com a biodisponibilidade do ferro. Uma análise de sensibilidade foi desenvolvida na tentativa de buscar quantidades limítrofes de cálcio a serem consumidas nas refeições. A ACP mostrou que no almoço os nutrientes que explicavam melhor a variabilidade do modelo foram ferro, vitamina C, fitato e oxalato, enquanto no jantar o cálcio se mostrou eficaz na determinação da variabilidade do modelo devido ao elevado consumo de leite e derivados. Para o almoço, a aplicação do FCM na interação dos nutrientes, notou-se que a ingestão de vitamina C foi determinante na classificação dos grupos. No jantar, a classificação de grupos foi determinada pela quantidade de ferro heme na interação com o cálcio. Na análise de sensibilidade realizada no almoço e no jantar, duas iterações do algoritmo determinaram a interferência total do cálcio na biodisponibilidade do ferro.

Palavras-chave: Lógica *Fuzzy*. Análise de componentes principais. Reconhecimento de padrão. Algoritmo *Fuzzy C-Means*. Biodisponibilidade do ferro.

ABSTRACT

This dissertation presents a method for pattern recognition on the bioavailability of iron, through interaction with substances that help the absorption such as vitamin C and vitamin A and inhibitors as calcium, phytate, oxalate, tannin and caffeine. The database was obtained through dietary, lunch and dinner, in children 2-5 years in the Municipal Nursery of Paraty - Rio de Janeiro, between 2007 and 2008. The Principal Component Analysis (PCA) was applied in the selection of nutrients and used the Fuzzy C-Means Algorithm (FCM) to create the groups classified according to the bioavailability of iron. A sensitivity analysis was developed in an attempt to find neighboring amounts of calcium being consumed at meals. The PCA showed that at lunch the nutrients that best explained the variability of the model were iron, vitamin C, phytate and oxalate, while at dinner the calcium was effective in determining the variability of the model due to high consumption of dairy products. For lunch, the application of FCM in the interaction of nutrients, it was noted that the intake of vitamin C was decisive in the classification of groups. At dinner, the classification of groups was determined by the amount of iron in the interaction with calcium. In the sensitivity analysis performed for lunch and dinner, two iterations of the algorithm determined the total interference of calcium on iron bioavailability.

Keywords: Fuzzy Logic. Principal Component Analysis. Pattern Recognition. Fuzzy C-Means Algorithm. Bioavailability of Iron.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Estatísticas básicas das componentes dietéticas da refeição.....	62
Tabela 2 -	Distâncias de Mahalanobis das medidas ingeridas dos nutrientes que participam da biodisponibilidade do ferro para as refeições.....	63
Tabela 3 -	Contribuições das substâncias alimentares nos dois primeiros fatores da ACP no almoço.....	64
Tabela 4 -	Contribuições das substâncias alimentares nos três primeiros fatores da ACP no jantar.....	64
Tabela 5 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne e vitamina C.....	66
Tabela 6 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e oxalato.....	67
Tabela 7 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e fitato.....	69
Tabela 8 -	Pertinência conjunta para cada criança nas classes quanto à biodisponibilidade do ferro definidas para cada interação das substâncias alimentares selecionadas na análise de componentes principais do almoço.....	71
Tabela 9 -	Estatísticas básicas da interação ferro heme e cálcio.....	72
Tabela 10 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne e vitamina C.....	74
Tabela 11 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e fitato.....	75
Tabela 12 -	Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e cálcio.....	76
Tabela 13 -	Pertinência conjunta para cada criança nas classes quanto à biodisponibilidade do ferro definidas para cada interação das substâncias alimentares selecionadas na análise de componentes principais do jantar.....	77
Tabela 14 -	Teste 2 a 2 de Mann-Whitney entre as classificações após a primeira iteração no almoço.....	79
Tabela 15 -	Análise de sensibilidade na interação ferro e cálcio no almoço.....	79
Tabela 16 -	Análise de sensibilidade na interação ferro e cálcio no jantar.....	81

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 -	Rotação para o caso bivariado.....	24
Figura 2 -	Exemplo de gráfico <i>Scree Plot</i>	30
Figura 3 -	Concepção Clássica: “Números próximos a 10”.....	34
Figura 4 -	Concepção <i>Fuzzy</i> : “Números próximos a 10”.....	34
Figura 5 -	Função de pertinência triangular de parâmetros (a,m,b) , com $a \leq m \leq b$	35
Figura 6 -	Função de pertinência trapezoidal de parâmetros (a,m, n,b) , com $a \leq m, n \leq b, m \leq n$	35
Figura 7 -	Função de pertinência Gaussiana de parâmetros (m, σ) , com $\sigma > 0$, onde m é o centro e σ é o desvio padrão da gaussiana.....	35
Figura 8 -	Função de pertinência <i>Singleton</i> de parâmetros (m,h)	35
Figura 9 -	Suporte (SA), Núcleo (NA) e α -Corte (CaA).....	37
Figura 10 -	Representação da função de pertinência do operador de união entre os conjuntos A e B.....	37
Figura 11 -	Representação da função de pertinência do operador de interseção entre os conjuntos A e B.....	37
Figura 12 -	Representação da função de pertinência do operador de complemento do conjunto A.....	38
Figura 13 -	Granularização.....	39
Figura 14 -	Reconhecimento de padrões versus agrupamento de dados.....	40
Figura 15 -	Árvore de tipos de classificação.....	42
Figura 16 -	Modelo de um dendograma e seus componentes classificação.....	48
Figura 17 -	Sensibilidade do <i>K-means</i> à partição inicial.....	51
Figura 18 -	Exemplo de algoritmo <i>K-means</i>	52

LISTA DE QUADROS E GRÁFICOS

Quadro 1 - Classificação de Monsen quanto à biodisponibilidade do ferro.....	22
Gráfico 1 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme e vitamina C.....	66
Gráfico 2 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e oxalato.....	68
Gráfico 3 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e fitato.....	70
Gráfico 4 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro heme e cálcio.....	73
Gráfico 5 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme e vitamina C.....	74
Gráfico 6 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e fitato.....	75
Gráfico 7 - Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e cálcio.....	76

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

a.C.	Antes de Cristo
ACP	Análise de Componentes Principais
AI	<i>Adequate Intake</i>
ANVISA	Agência Nacional de Vigilância Sanitária
CP	Critério de Parada
CPs	Componentes Principais
CV	Coeficiente de Variação
DP	Desvio Padrão
DRI	<i>Dietary Reference Intakes</i>
EAR	<i>Estimated Average Requirement</i>
FCM	<i>Fuzzy C-means</i>
g	Gramas
HA	Altura
ID	Índice de Desempenho
mg	Miligrama
NA	Núcleo
NC	Número de Classes
OMS	Organização Mundial de Saúde
RDA	<i>Recommended Dietary Allowance</i>
SA	Suporte
TCF	Teoria dos Conjuntos <i>Fuzzy</i>
UL	<i>Tolerable Upper Intake Level</i>
UERJ	Universidade do Estado do Rio de Janeiro
UFRJ	Universidade Federal do Rio de Janeiro

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	13
1	FERRO	15
1.1	Anemia Ferropriva	16
1.2	Biodisponibilidade do Ferro e Necessidade de Ferro em Indivíduos	16
1.2.1	<u>Biodisponibilidade de Elementos Traços</u>	17
1.2.2	<u>Absorção de Ferro</u>	18
1.3	Referências Nutricionais	21
1.4	Estudos Referentes à Absorção de Ferro	21
1.4.1	<u>Classificação de Mosen</u>	21
1.4.2	<u>Algoritmo de Hallberg</u>	22
2	ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS	24
2.1	Componentes Principais Populacionais	25
2.2	Critérios para Determinação do Número “k” de Componentes Principais	29
2.3	Escores das Componentes Principais	31
2.4	Comunalidades	31
3	LÓGICA FUZZY	33
3.1	Tipos de Funções de Pertinência	34
3.2	Operações com Conjuntos Nebulosos	37
3.2.1	<u>Variáveis Lingüísticas</u>	38
3.3	Reconhecimento de Padrões	39
3.4	Agrupamento de Dados	40
3.5	Normas e Critérios de Distância	45
3.6	Definição de Espaço Métrico	45
3.7	Exemplos de Métricas	45
3.8	Categorias de Algoritmos de Agrupamento	46
3.8.1	<u>Tipo de Dados</u>	46
3.8.2	<u>Parâmetros do Algoritmo</u>	47
3.8.3	<u>Critérios de Similaridade ou Dissimilaridade que Determinam um Grupo</u>	47
3.8.4	<u>Conceitos e Fundamentos</u>	48
3.9	Princípio de Extensão	49
4	ALGORITMO K-MEANS	50
5	ALGORITMO FUZZY C-MEANS (FCM)	53
6	OBJETIVOS	57
6.1	Objetivo Geral	57
6.2	Objetivos Específicos	57
7	METODOLOGIA	58

8	RESULTADOS	62
8.1	Classificação dos Grupos	65
8.1.1	<u>Almoço</u>	65
8.1.2	<u>Jantar</u>	72
8.2	Análise de Sensibilidade	78
8.2.1	<u>Almoço</u>	78
8.2.2	<u>Jantar</u>	80
9	CONCLUSÃO	82
	REFERÊNCIAS	84
	APÊNDICE - Algoritmo em Linguagem R Utilizado no Estudo.....	92
	ANEXO A – Parecer COEP.....	98
	ANEXO B – Tabela com a Ingestão dos Nutrientes no Almoço.....	100
	ANEXO C – Tabela com a Ingestão dos Nutrientes no Jantar.....	101

INTRODUÇÃO

Estima-se que quase 40% da população mundial apresentam carência de ferro ou níveis baixos de hemoglobina, o que totaliza dois bilhões de pessoas e estabelecendo uma situação de risco que inclui indivíduos tanto dos estratos sociais mais privilegiados como dos mais carentes, especialmente o grupo materno-infantil: lactentes, pré-escolares, escolares, gestantes e nutrizes (MOURA; CANNIATTI-BRAZACA, 2006).

Em 2003, os dados da Organização Mundial da Saúde (OMS) apontaram que dois milhões e cento e cinquenta mil crianças na idade pré-escolar estavam em risco de deficiência do ferro, com reflexos no desenvolvimento mental, incluindo apatia, irritabilidade, redução da capacidade de concentração e aprendizado (COZZOLINO, 2005). No Brasil, estudos pontuais realizados apontam várias causas para esta alta prevalência, que são: o hábito alimentar e a biodisponibilidade do ferro como fatores principais; as condições sócio-culturais; as doenças; o sexo e a idade também devem ser considerados (CHAUD; FREITAS, 1994).

Na Índia, onde a ancilostomíase é prevalente e o vegetarianismo é obrigatório em muitas religiões, a deficiência de ferro atinge a grande maioria. Nos Estados Unidos, nos últimos trinta anos, a qualidade da nutrição em ferro diminuiu dado o consumo excessivo de “*fast foods*”, lanches, pizza e refrigerante. No entanto, a fortificação de alimentos básicos, vem contribuindo para a redução desta deficiência. No norte da Europa, a população branca de classe média vem apresentando alta prevalência na deficiência de ferro e anemia, apesar do enriquecimento de ferro na farinha de trigo. Nos países em desenvolvimento como o Brasil, a fortificação da farinha de trigo e do milho pode contribuir para a redução dos níveis de prevalência (ANVISA, 2007).

A manifestação mais característica da deficiência de ferro é a anemia ferropriva microcítica. Entretanto, as deficiências subclínicas de ferro, por causarem desordens no metabolismo oxidativo, podem determinar prejuízos à saúde em todos os estágios da vida, estando associadas as alterações no desempenho oxidativo, função muscular, atividade física, produtividade no trabalho ou na escola, acuidade mental e capacidade de concentração (GUYTON, 1989). Além disso, pode haver alterações na termogênese, na pele, nas unhas e mucosas, bem como diminuição na resposta imunológica, que, por sua vez, aumenta a morbidade por doenças infecciosas (UNICEF; UNU; WHO; MI, 1998). Na fase mais avançada, a anemia está associada a sintomas clínicos, como fraqueza, diminuição da capacidade respiratória e tontura (PAIVA *et al.*, 2000).

A quantidade de ferro absorvida no intestino é determinada pelo sistema reticuloendotelial, pelo catabolismo eritrocitário e pelos estoques do hepatócito. Alterações fisiológicas ocorrem com o déficit de ferro, tanto pela inadequada oxigenação dos tecidos durante o exercício, quanto pela ação anormal das enzimas. (DIETARY REFERENCE INTAKES, 2002)

Geralmente, essa deficiência é o resultado de um longo período de balanço negativo de ferro. O balanço corporal de ferro pode ser negativo se houver carência alimentar, aumento das necessidades (infância, adolescência, gestação e lactação), sangramento anormal, perdas crônicas pelo trato gastrointestinal ou má absorção intestinal (LAMPE, 1996). Nessas situações ocorre diminuição do ferro corporal armazenado, as hemácias apresentam-se microcíticas e hipocrômicas, os níveis circulantes de hemoglobina, de ferro e ferritina diminuem e há aumento de transferrina, caracterizando a anemia ferropriva (SZARFARC; SOUZA, 1997).

1 FERRO

Elementos minerais presentes em baixas concentrações nos tecidos são denominados de elementos-traço, micro elementos ou micro minerais; sendo considerados essenciais e benéficos ao organismo. O ferro é o micro elemento mais abundante no organismo humano (NIELSEN, 1986; CARPENTER; MAHONEY, 1992).

O ferro do organismo encontra-se associado a duas categorias de componentes: aqueles que têm função metabólica ou enzimática (componentes funcionais) e aqueles associados ao armazenamento (DALLMAN *et al.*, 1980; FAO; WHO, 1988; GARCIA-CASAL; LAYRISSE, 1998). Os componentes funcionais são a hemoglobina e a mioglobina, em menor quantidade nos tecidos corporais, e várias outras proteínas que atuam no transporte, armazenamento e utilização do oxigênio. O ferro também participa de uma variedade de processos bioquímicos, incluindo o transporte de elétrons na mitocôndria, metabolismo das catecolaminas e síntese de DNA (DE VIZIA *et al.*, 1995).

A maior parte do ferro está presente na hemoglobina (70-80%), uma cromoproteína que tem como grupo prostético o radical heme, presente nos eritrócitos e cuja função é o transporte de oxigênio (FAIRBANKS, 1994). Cerca de 10 a 12% do ferro encontra-se na mioglobina, uma cromoproteína globular presente no músculo, que tem a função de fixar o oxigênio proveniente da hemoglobina dos glóbulos vermelhos circulantes, permitindo assim as reações de oxidação que liberam energia (DE ANGELIS; CTENAS, 1993).

Os componentes de armazenamento não têm nenhuma função fisiológica, servindo apenas como reserva para repor as perdas dos componentes funcionais. São eles: a ferritina e a hemossiderina, presentes no fígado, baço e medula óssea. Quando a oferta de ferro na dieta é inadequada, este é mobilizado dos componentes de armazenamento para manter a produção de hemoglobina e outros compostos de ferro que desempenham funções metabólicas (FAO;WHO, 1988). É provável que não haja alterações funcionais no organismo enquanto essa produção não for prejudicada (DALLMAN *et al.*, 1980).

Ainda, as principais funções do ferro no organismo humano são: aumentar a resistência ao stress e a doenças, na formação das células vermelhas do sangue, no transporte de oxigênio para os tecidos do cérebro, na prevenção da fadiga e na promoção do bom aspecto da pele (DEMAYER *et al.*,1989).

O ferro do organismo tem dupla origem: ferro exógeno, ingerido com os alimentos e ferro endógeno, proveniente da destruição das hemácias, que libera cerca de 27mg do metal, sendo em seguida reutilizado. O ferro dos alimentos não é inteiramente aproveitado pelo organismo, dependem da forma sob a qual é ingerido, isto é, de sua separação das combinações químicas sob as quais se apresenta, pois para sua absorção é necessário que seja solúvel, ionizável e ultra-filtrável.

1.1 Anemia Ferropriva

A anemia ferropriva é o problema nutricional de maior prevalência no mundo e caracteriza-se pelo agravamento da deficiência de ferro. A carência ocorre quando existe um desequilíbrio entre a absorção e as necessidades orgânicas do mineral. Esse desequilíbrio pode ser devido à ingestão inadequada de ferro, à sua biodisponibilidade reduzida na dieta, às necessidades aumentadas em grupos específicos, ou às perdas crônicas de sangue, que acarretam uma diminuição da taxa de hemoglobina (WORLD HEALTH ORGANIZATION, 1990; SZARFARC; SOUZA,1997).

A anemia ferropriva resulta da interação de múltiplos fatores etiológicos. Dentre eles, uma das causas mais importantes é a ingestão deficiente de ferro, especialmente na forma heme, devido ao baixo consumo de alimentos de origem animal, ou seja, a uma dieta baseada em alimentos de origem vegetal (WORLD HEALTH ORGANIZATION, 1990; SZARFARC ; SOUZA, 1995). Outros fatores, como o baixo nível socioeconômico, as precárias condições de saneamento e a alta prevalência de doenças infecto-parasitárias, principalmente as que provocam perdas sanguíneas crônicas, também se constituem determinantes da anemia (CROMPTON; WHITEHEAD, 1993; MARTINS *et al.*, 1987).

1.2 Biodisponibilidade do Ferro e Necessidade de Ferro em Indivíduos

Na década de 80 estudos demonstraram que a simples presença de nutrientes na dieta não garante qualidade nutricional. Esta constatação mostrou a necessidade de se estudar a biodisponibilidade dos diferentes nutrientes, levando em consideração sua interação. Em 1997, no Congresso de Biodisponibilidade (COZZOLINO, 1997) foi proposta o conceito atual de biodisponibilidade, ou seja: fração de qualquer nutriente ingerido que tem o potencial para suprir demandas fisiológicas em tecidos alvos (FAIRWEATHER-TAIT, 1992).

As interações entre nutrientes, ou seja, a competição pelo mesmo sítio de absorção é devido às propriedades físicas e químicas semelhantes que possam efetivar de forma positiva (favorecendo a absorção) ou negativa (prejudicando-a). Portanto, o excesso de um prejudicará a utilização do outro ou ainda a escassez, quando um mineral depende do outro para sua forma ativa (COZZOLINO, 1997). Assim, faz-se necessário que as orientações nutricionais ultrapassem as quantidades de alimentos recomendadas e considerem as interações entre eles.

A deficiência sistêmica de determinados nutrientes ocorre no organismo humano de forma gradual e progressiva, resultando em carências nutricionais que implicam na depleção grave de seus estoques. Quando a perda de um determinado nutriente é maior que sua absorção tem início o processo da deficiência do mineral (SZARFARC; SOUZA, 1997) e ocorre o aparecimento de sintomatologia pertinente a distúrbios de caráter nutricional.

Alguns nutrientes ao interagir com outros podem estimular, reduzir ou até inibir sua absorção. Uma ampla lista de fatores dietários que afetam a biodisponibilidade do ferro alimentar tem aumentado a dificuldade para prever sua absorção em refeições. (REDDY *et al.*, 1996).

A biodisponibilidade de um nutriente é influenciada por fatores distintos, que se classificam em intrínsecos (fisiológicos) e extrínsecos (dietéticos) (SOUTHON *et al.*, 1988), ocorre em três fases: biodisponibilidade no lúmen intestinal para absorção, absorção e/ou retenção no organismo e utilização pelo organismo. O processamento dos alimentos pode influenciar, alterando a quantidade e espécie de ferro no produto, em relação à matéria-prima (primeira fase). A segunda e terceira fases dependem do mecanismo homeostático e necessidades fisiológicas individuais do organismo (FAIRWEATHER-TAIT, 1993).

1.2.1 Biodisponibilidade de Elementos Traços

Segundo House (1999) a biodisponibilidade de elementos traços são:

a) Composição dietética-qualidade da proteína (proteína animal ou vegetal, balanço de aminoácidos), quantidade da proteína, quantidade do elemento traço, interações de nutrientes (elemento-elemento, composto-elemento orgânico), promotores (carne, ácido ascórbico, ácido cítrico, vitamina D, alguns aminoácidos e açúcares), inibidores (fítato, oxalato, polifenóis, fibra, cálcio e zinco), deficiência de microcomponentes (ácido ascórbico, riboflavina e vitamina E);

b) Preparação ou processamento alimentar cru, cozimento (vários métodos), fermentação, moagem;

c) Fatores do indivíduo-idade, sexo, estado fisiológico (gravidez, lactação, atividade física), estado nutricional (moderada ou ostensiva deficiência), doença (incluindo parasitismo), formação étnica (tipo de alimento selecionado, área geográfica), situação econômica (quantidade de alimento selecionado).

1.2.2 Absorção de Ferro

O processo de absorção envolve a retirada de nutrientes no lúmen intestinal, transferência do nutriente através da célula da mucosa e transporte das células para outros tecidos e órgãos. Para absorção, a ingestão de alimento, contendo o nutriente mineral, pode apresentar-se na forma solúvel, ocupando as células da mucosa gastrointestinal e dependente das formas principais de ferro, denominadas ferro não-heme e ferro heme (CLYDESDALE, 1988; LARSEN, 1992).

As dietas têm sido classificadas quanto a biodisponibilidade como sendo de alta (15%), intermediária (10%) e baixa (5%) biodisponibilidade de ferro, dependendo da proporção de ferro-heme e da presença de inibidores e intensificadores da absorção de ferro não-heme (MARTINS *et al.*, 1987). A dieta de baixa biodisponibilidade é caracterizada como dieta baseada em cereais e vegetais, quantidades insignificantes de peixe, carne (30gr) e ácido ascórbico (25mg) presente nos alimentos. Uma dieta de biodisponibilidade intermediária aquela baseada também em cereais, vegetais ricos em ácido ascórbico e carne. A dieta de alta biodisponibilidade é uma dieta diversificada, contendo quantidades significantes de ácido ascórbico (75mg), carne, ave ou peixe (90g) e baixa quantidade de ácido fítico. Esse tipo de dieta pode facilmente ser classificado como intermediária, quando existe consumo de inibidores, tais como o chá, fibras e alimentos com elevado teor de cálcio (DEMAYER *et al.*, 1989; FAO;WHO, 1988).

A absorção de ferro é influenciada por uma variedade de fatores, entre eles, a concentração e a forma química do ferro ingerido, a presença de fatores na dieta que promovam ou inibam a absorção de ferro e o estado de ferro no organismo (HALLBERG, 1981). Indivíduos anêmicos absorvem duas a três vezes mais do que indivíduos normais (MONSEN *et al.*, 1978)

O ferro heme apresenta-se na forma iônica reduzida Fe^{+2} (ferroso), representando 40% a 55% do ferro presente na carne bovina, ave ou peixes, formando parte das moléculas de hemoglobina e mioglobina, sendo altamente disponível (CARPENTER; MAHONEY, 1992; MARTINEZ *et al.*, 1999). Esse tipo de ferro entra diretamente nas células da mucosa na forma de complexo ferro-porfirina e sua absorção é determinada principalmente pelo nível de ferro corporal e, em pequena parte, por fatores dietéticos, possivelmente o cálcio. O ferro não-heme, predominante na forma iônica oxidada Fe^{+3} (férico), é menos solúvel no organismo; encontra-se nos cereais, leguminosas, verduras (CARPENTER; MAHONEY, 1992; MARTINEZ *et al.*, 1999). A biodisponibilidade de ferro não-heme é menor em relação ao ferro heme, sendo influenciada por fatores dietéticos, além do nível do ferro corpóreo. O ferro não-heme, em meio ácido, é transportado quelado, aumentando a absorção na membrana do duodeno, facilitando a transferência do ferro através das microvilosidades da membrana (HALLBERG *et al.*, 1986; HOUSE; WELCH, 1987; SCHRICKER *et al.*, 1982; FAO; WHO, 1988).

Dois caminhos da absorção do ferro foram identificados (BENITO; MILLER, 1998). O principal caminho para absorção do ferro no duodeno é dependente de energia com carreador envolvendo uma proteína de transporte através da membrana. Isso foi evidenciado em fragmentos do duodeno de rata. Quando o oxigênio e a glicose estão ausentes ocorre inibição da absorção (RAJA *et al.*, 1989; CONRAD *et al.*, 1991).

O segundo caminho para captação do ferro foi proposto por Simpson *et al.* (1989), após constatar que o ácido graxo aumenta significativamente a captação do ferro pelas vesículas da borda em escova. O processo envolve a formação de um complexo Fe^{+2} ácido graxo que poderia ser transferido através da membrana. Esse caminho possui uma reação adaptável limitada ao aumento da demanda de ferro, podendo acontecer em paralelo com o transporte de ferro dependente de energia já mencionado, e somente contribuiria para a absorção do ferro (PETERS *et al.*, 1992; SIMPSON *et al.*, 1989).

Há dois carreadores distintos no microvilos para o ferro não-heme, um para Fe^{+2} e outro para Fe^{+3} , já que as propriedades físico-químicas desses dois íons são diferentes (SIMPSON *et al.*, 1989). Os caminhos eletrogênicos requerem quelação do ferro em complexos na superfície da mucosa antes de sua absorção, embora não haja concordância sobre o ferro Fe^{+3} entrar na célula dessa maneira ou se há necessidade de ser reduzido para Fe^{+2} primeiro. Acredita-se que a redução do Fe^{+3} ao Fe^{+2} acontece antes da absorção (RAJA *et al.*, 1991). Provavelmente a maior parte do Fe^{+2} que entrou na célula será oxidado a Fe^{+3} (BENITO; MILLER, 1998).

A absorção de ferro apresenta maior eficiência quando há redução da ingestão de produtos de laticínios presentes, ou seja, é necessário reavaliar refeições que contenham ferro e a redistribuição diária da ingestão de cálcio em refeições com menor quantidade de ferro (HALLBERG *et al.*, 1992; GLEERUP *et al.*, 1995).

Alguns fatores dietéticos e/ou componentes que influenciam, negativamente, na absorção de ferro não-heme em indivíduos ou experimentos com animais, incluem: interações com elementos minerais, devido às propriedades físico-químicas similares ou absorção competitiva (FAIRWEATHER-TAIT *et al.*, 1995); proteínas de fontes animais ou vegetais (HURRELL *et al.*, 1988); compostos polifenólicos, tais como taninos (DISLER *et al.*, 1975); saponinas (PRICE *et al.*, 1980); lectinas (MIGITA, 1998); estágio de maturidade da planta (WELCH *et al.*, 1973) e fítalos (TORRE *et al.*, 1991).

Os ferros férrico e ferroso são solúveis no pH do estômago, porém no pH intestinal, o ferro férrico precipita mais do que o ferro ferroso (VAN DOKKUM, 1992). Condições de óxido-redução podem influenciar na biodisponibilidade de vários elementos traço, assim como fatores dietéticos podem reduzir ferro férrico ao estado ferroso e aumentar a biodisponibilidade de ferro (WISE, 1995).

O ácido ascórbico é o promotor mais conhecido de ferro não-heme, aumentando a absorção de ferro de várias fontes alimentares, conforme a quantidade na dieta (MONSEN, 1982; HALLBERG *et al.*, 1986). O efeito desse ácido é melhorar a absorção de ferro, em primeiro lugar como agente redutor, pois converte o ferro férrico ao ferro ferroso, que é mais solúvel no pH do duodeno, prevenindo a formação de hidróxido férrico insolúvel, e, em segundo lugar, em condições altamente ácidas no estômago, formando complexos solúveis (quelados) com íons férricos, mantendo essa solubilidade a pH alcalino no duodeno (BOTHWELL *et al.*, 1989; HALLBERG, 1981; CARPENTER; MAHONEY; 1992).

Fatores dietéticos, como os polifenóis, incluindo os taninos (chás) e outras substâncias encontradas no café, o ácido oxálico (espinafre, acelga, chocolate entre outros), os fitatos (encontrados, por exemplo, em grãos integrais e no milho) e o EDTA (como conservante), inibem a absorção do ferro não-heme. Chás ou cafés consumidos junto ou logo após as refeições podem reduzir sua absorção em 60% e 40%, respectivamente. A ação dos polifenóis se daria através da formação de complexos entre os grupos hidroxila dos compostos fenólicos e as moléculas de ferro, tornando-o não disponível para absorção (DEMAYER, 1989).

A quantidade de ferro elementar absorvida é influenciada especialmente por dois fatores: a necessidade individual e a biodisponibilidade do ferro. A ingestão do mineral, nos limites ou acima das recomendações, não representa, necessariamente, uma garantia de um

estado nutricional adequado do nutriente. A absorção e a assimilação do ferro são favorecidas ou prejudicadas pelas características físicas e químicas dos alimentos nos quais o nutriente está contido, pela presença de outros constituintes da dieta, pela natureza dos processos digestivos e de absorção para o mineral em pauta e, com ênfase, para a condição fisiológica do indivíduo que consome o alimento exógeno (DEMAYER *et al.*, 1989).

1.3 Referências Nutricionais

No campo da Nutrição, as referências dietéticas para a ingestão de nutrientes estão discriminadas nas referências de ingestão diária – DRIs (*Dietary Reference Intakes*, 2000) são definidas como um conjunto de quatro valores de referências:

EAR (*Estimated Average Requirement*) – O valor médio de ingestão diária estimada para atender às necessidades de 50% de indivíduos.

RDA (*Recommended Dietary Allowance*) – Considerada como nível de ingestão diária, a quantidade que atende a necessidade de 97 a 98% dos indivíduos.

AI (*Adequate Intake*) – Baseada em níveis de ingestão, derivados experimentalmente ou por aproximações da média de ingestão do nutriente por indivíduos.

UL (*Tolerable Upper Intake Level*) – O mais alto nível de ingestão diária habitual do nutriente, que provavelmente não coloca em risco de efeitos adversos. Se o indivíduo consome uma quantidade acima do UL então passa a correr risco potencial de efeitos à saúde (MARCHIONI, SLATER e FISBERG, 2004).

1.4 Estudos Referentes à Absorção do Ferro

1.4.1 Classificação de Mosen

O modelo de classificação de Mosen (1978) qualifica os indivíduos a partir da ingestão de apenas dois fatores marcadores: vitamina c (mg) e carne (g). Neste modelo são avaliados limites inferiores e superiores que determinam a faixa em que cada indivíduo se encontra em relação à absorção de ferro:

Absorção baixa – Quando o indivíduo não ingere ferro heme (tecido animal), sendo sua dieta centrada em alimentos com ferro não heme (vegetais) e grandes quantidades de nutrientes inibidores. A consequência é o risco potencial de apresentar anemia ferropriva.

Absorção média – Quando o indivíduo ingere pouco ferro heme, sua dieta está centrada em alimentos com ferro não heme, mas procura eventualmente combiná-los de forma a evitar os fatores inibidores e privilegiar os estimuladores. A reincidência deste hábito pode levar a anemia ferropriva.

Absorção alta – quando o indivíduo consome alimentos com ferro heme em sua dieta e há a preocupação de combiná-los de forma a biodisponibilizar o ferro. São os indivíduos que detêm risco minimizado de adquirir anemia ferropriva.

Biodisponibilidade	Tipo de refeição	Absorção do ferro presente na refeição	
		Ferro heme	Ferro não-heme
Baixa	<30g de carne ou <25mg de Vitamina C	23%	3%
Média	30g a 90g de carne ou 25 a 75 mg de Vitamina C	23%	5%
Alta	>90g de carne ou >75mg de Vitamina C ou 30 a 90g de carne e 25 a 75mg de Vitamina C	23%	8%

Quadro 1 - Classificação de Mosen quanto à biodisponibilidade do ferro.

Fonte: MONSEN, 1978

1.4.2 Algoritmo de Hallberg

Hallberg e Hulthén (2000) desenvolveram um algoritmo para estimar a absorção de ferro através da dieta, este algoritmo tinha o objetivo de prever os efeitos que influenciavam a absorção de ferro heme e ferro não-heme nas refeições e dietas (HALLBERG; HULTHÉN, 2000).

A base para o algoritmo foi a absorção de ferro a partir de um pão de trigo não contendo inibidores conhecidos ou estimuladores na absorção de ferro. Esta absorção foi multiplicada pelo efeito esperado de diferentes quantidades de fatores alimentares conhecidos na absorção de ferro: fitato, polifenóis, ácido ascórbico, peixe, carne, ovos, cálcio, proteína de soja e álcool. Para cada fator foi desenvolvido uma equação que descreve a relação dose efeito (HALLBERG;HULTHÉN, 2000).

Os principais resultados foram boas concordâncias de absorção de ferro com o resultado do uso do algoritmo. Esta implementação tem diversas aplicações como:prever a

absorção de ferro a partir de várias dietas, estimar os efeitos esperados por modificações na dieta e para traduzir requisitos dietéticos de ferro a partir de diferentes tipos de dietas (HALLBERG; HULTHÉN, 2000).

2 ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

A análise de componentes principais é utilizada para a investigação das relações existentes em um conjunto de “p” variáveis, em geral, correlacionadas, transformando-o em um novo conjunto de variáveis não correlacionadas entre si denominadas componentes principais (CPs), onde estas são combinações lineares das “p” variáveis originais correlacionadas X_1, X_2, \dots, X_p e possuem propriedades especiais em termos de variância.

Inicialmente o que se obtém da transformação das “p” variáveis originais correlacionadas são “p” componentes principais. No entanto, mesmo que sejam necessárias as “p” componentes principais para reproduzir a variabilidade total do sistema, a maior parte desta variabilidade pode ser explicada por um número menor “k” de componentes principais ($k < p$). Assim, como as “k” componentes principais explicam praticamente a mesma quantidade de informação que as “p” variáveis originais, podem-se substituir as “p” variáveis originais pelas “k” componentes principais, reduzindo-se o número de variáveis do problema em questão, perdendo no processo a menor quantidade de informação possível.

Geometricamente, as combinações lineares das variáveis originais representam a seleção de um novo sistema de coordenada obtido pela rotação do sistema original com coordenadas X_1, X_2, \dots, X_p . Os novos eixos Y_1, Y_2, \dots, Y_p representam a direção com variabilidade máxima e permite uma interpretação mais simples da estrutura da matriz de covariância (JOHNSON; WICHERN, 1998). A título de exemplo, verifica-se na Figura 1 como fica a rotação para o caso bivariado ($p=2$).

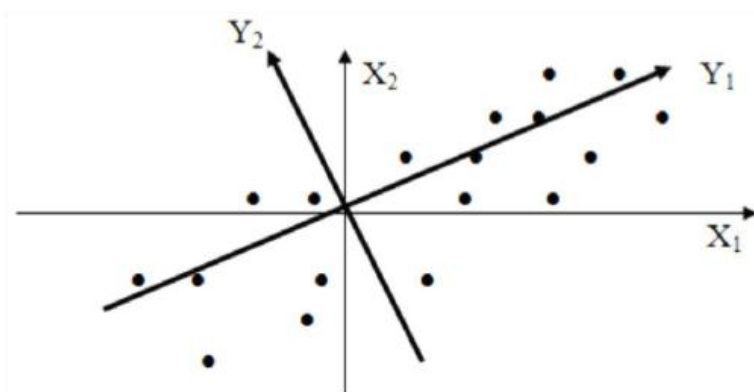


Figura 1 - Rotação para o caso bivariado
Fonte: MARQUES, 2003

De modo geral, os principais objetivos da análise de componentes principais são reduzir o número de variáveis, melhorar a interpretação e analisar quais variáveis ou conjuntos de variáveis explicam a maior parte da variabilidade total, revelando que tipo de relacionamento existe entre elas. Além disso, a Análise de Componentes Principais (ACP) é capaz de revelar informações que a princípio não se poderiam suspeitar. No entanto, segundo Johnson e Wichern (1998), esta análise funciona mais como um meio para o fim do que propriamente um fim, sendo muito útil como método auxiliar em Regressão, Análise Fatorial e Análise de Agrupamentos.

A obtenção das componentes principais depende somente da matriz de covariância “ Σ ” ou da matriz de correlação “ ρ ” referentes as variáveis X_1, X_2, \dots, X_p , não dependendo da suposição de normalidade (JOHNSON; WICHERN, 1998). Assim, se a distribuição de probabilidades do vetor aleatório de “ p ” variáveis, então as componentes principais, além de serem não correlacionadas e independentes, têm distribuição normal.

Se as variáveis forem avaliadas em unidades de medida diferentes e ocorrer variabilidade maior entre elas, então padroniza-se ou normaliza-se os dados (média = 0, variância = 1) e a ACP é realizada a partir da matriz de correlação.

2.1 Componentes Principais Populacionais

Seja $\underline{X}' = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ um vetor aleatório p -dimensional com vetor de médias $\underline{\mu}$ e matriz de covariância Σ com autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$ (MARQUES, 2006).

Considere as combinações lineares:

$$Y_1 = \mathbf{a}'_1 \mathbf{X} = a_{11}X_1 + a_{21}X_2 + \dots + a_{p1}X_p \quad (1)$$

$$Y_2 = \mathbf{a}'_2 \mathbf{X} = a_{12}X_1 + a_{22}X_2 + \dots + a_{p2}X_p \quad (2)$$

.....

$$Y_j = \mathbf{a}'_j \mathbf{X} = a_{1j}X_1 + a_{2j}X_2 + \dots + a_{pj}X_p \quad (3)$$

$$Y_p = \mathbf{a}'_p \mathbf{X} = a_{1p}X_1 + a_{2p}X_2 + \dots + a_{pp}X_p \quad (4)$$

onde a_{ij} , com $i = 1, 2, \dots, p$ e $j = 1, 2, \dots, p$.

Ou em notação vetorial:

$$\underline{Y} = \mathbf{A}' \underline{X} \quad (5)$$

Onde:

$$\underline{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_p \end{pmatrix} \quad e \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{13} \\ a_{21} & \cdots & a_{23} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & \cdots & a_{pp} \end{pmatrix}$$

Com,

$$E(Y_i) = E(\underline{a}_i' \underline{X}) = \underline{a}_i' E(\underline{X}) = \underline{a}_i' \underline{\mu} \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (6)$$

$$\text{Var}(Y_i) = V(\underline{a}_i' \underline{X}) = \underline{a}_i' V(\underline{X}) \underline{a}_i = \underline{a}_i' \Sigma \underline{a}_i \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (7)$$

$$\text{Cov}(Y_i, Y_k) = V(\underline{a}_i' \underline{X}, \underline{a}_k' \underline{X}) = \underline{a}_i' \Sigma \underline{a}_k \quad i \neq k = 1, 2, \dots, p \quad (8)$$

Onde $E(Y_i)$ é o valor esperado de Y_i , $\text{Var}(Y_i)$ é a variância de Y_i e $\text{Cov}(Y_i, Y_k)$ é a covariância entre Y_i e Y_k .

As componentes principais são as combinações lineares não correlacionadas Y_1, Y_2, \dots, Y_p representadas nas equações (1),(2),(3) e (4) e são derivadas em ordem decrescente de importância, ou seja, a primeira componente principal (Y_1) será responsável pela maior variância contida em todas as CPs e a última CP (Y_p), conseqüentemente, será responsável pela menor variância restante. As variâncias de cada componente principal são na verdade os autovalores (λ) da matriz de covariância - ou correlação dependendo do caso - sendo ordenadas em ordem decrescente. Os coeficientes a_{ij} , $i = 1, \dots, p$ são denominados pesos ou carregamentos (*loadings*) das variáveis ou “fatores” e correspondem aos autovetores da matriz de covariância ou correlação dependendo do caso. Assim, quanto maior for o peso, maior será a importância da respectiva variável original (X_1, X_2, \dots, X_p) na determinação da componente principal. Sinais positivos ou negativos indicam se a relação entre as variáveis originais e componentes principais é diretamente ou inversamente proporcional, respectivamente.

Pode-se definir que:

- A primeira componente principal é a combinação linear $\underline{a}_1' \underline{X}$ que maximiza $\text{Var}(\underline{a}_1' \underline{X})$ sujeito condição $\underline{a}_1' \underline{a}_1 = 1$.
- A segunda componente principal é a combinação linear $\underline{a}_2' \underline{X}$ que maximiza $\text{Var}(\underline{a}_2' \underline{X})$ sujeito às condições $\underline{a}_2' \underline{a}_2 = 1$ e $\text{Cov}(\underline{a}_1' \underline{X}, \underline{a}_2' \underline{X}) = 0$.

- A i -ésima componente principal é a combinação linear $\underline{a}_i \underline{X}$ que maximiza $\text{Var}(\underline{a}'_i \underline{X})$ sujeito às condições $\underline{a}'_i \underline{a}_i = 1$ e $\text{Cov}(\underline{a}'_i \underline{X}, \underline{a}'_k \underline{X}) = 0$ para $k < i$.

Para as componentes principais populacionais demonstram-se os seguintes resultados:

a) Seja o vetor aleatório $\underline{X}' = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ associado a uma matriz de covariância Σ e pares de autovalores e autovetores $(\lambda_1, \underline{e}_1), (\lambda_2, \underline{e}_2), \dots, (\lambda_p, \underline{e}_p)$ onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$. Então a i -ésima componente principal é dada por:

$$Y_i = \underline{e}'_i \underline{X} = e_{1i}X_1 + e_{2i}X_2 + \dots + e_{pi}X_p, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (9)$$

Com:

$$\text{Var}(Y_i) = \underline{e}'_i \Sigma \underline{e}_i = \lambda_i, \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (10)$$

$$\text{Cov}(Y_i, Y_k) = \underline{e}'_i \Sigma \underline{e}_k = 0, \quad i \neq k \quad (11)$$

b) Sendo $Y_1 = \underline{e}'_1 \underline{X}$, $Y_2 = \underline{e}'_2 \underline{X}$, ..., $Y_p = \underline{e}'_p \underline{X}$ as componentes principais.

Então,

$$\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_p^2 = \sum_{i=1}^p \text{Var}(X_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = \sum_{i=1}^p \text{Var}(Y_i) \quad (12)$$

Ou seja, o somatório das variâncias das componentes principais é igual ao somatório das variâncias das variáveis originais.

c) A proporção explicada da variância total pela i -ésima componente principal é dada por:

$$\frac{\lambda_i}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p}, \text{ com } i=1,2,\dots,p \quad (13)$$

d) Se $Y_1 = \underline{e}'_1 \underline{X}$, $Y_2 = \underline{e}'_2 \underline{X}$, ..., $Y_p = \underline{e}'_p \underline{X}$ são as componentes principais obtidas da matriz de covariância Σ , então:

$$\rho_{Y_i, X_k} = \frac{e_{ki} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}, \quad i, k = 1, 2, \dots, p \quad (14)$$

que é o coeficiente de correlação entre a i -ésima componente principal Y_i e a k -ésima variável X_k .

$$\text{Seja } \underline{Z}' = [Z_1, Z_2, \dots, Z_p] = \left[\frac{x_1 - \mu_1}{\sqrt{\sigma_1^2}}, \frac{x_2 - \mu_2}{\sqrt{\sigma_2^2}}, \dots, \frac{x_p - \mu_p}{\sqrt{\sigma_p^2}} \right] \quad (15)$$

Ou, em notação matricial:

$$\underline{Z} = (V^{1/2})^{-1}(\underline{X} - \underline{\mu}) \quad (16)$$

Onde

$$V^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\sigma_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{\sigma_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{\sigma_p^2} \end{bmatrix}, \quad \underline{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{bmatrix} \text{ e } \underline{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_p \end{bmatrix} \quad (17)$$

E pode-se demonstrar que $E(\underline{Z}) = 0$ e $Cov(\underline{Z}) = (V^{1/2})^{-1}\Sigma(V^{1/2})^{-1} = \rho$. Neste caso, as componentes principais de \underline{Z} podem ser obtidas pelos autovetores da matriz de correlação ρ de \underline{X} .

De acordo com o desenvolvimento de resultados para componentes principais populacionais, obtém-se o desenvolvimento de resultados importantes para componentes principais de variáveis padronizadas:

a) A i -ésima componente principal de variáveis padronizadas $\underline{Z}' = [Z_1, Z_2, \dots, Z_p]$ com $Cov(\underline{Z}) = \rho$, é dada por:

$$Y_i = \underline{e}_i' \underline{Z} = \underline{e}_i' (V^{1/2})^{-1} (\underline{X} - \underline{\mu}), \quad i = 1, 2, \dots, p \quad (18)$$

$$\text{b) } \sum_{i=1}^p Var(Y_i) = \sum_{i=1}^p Var(Z_i) = p \quad (19)$$

c) O coeficiente de correlação entre a i -ésima componente Y_i e a k -ésima variável padronizada Z_k é dado por:

$$\rho_{Y_i, Z_k} = e_{ki} \sqrt{\lambda_i} \quad i, k = 1, 2, \dots, p \quad (20)$$

d) A proporção da variância total da população (padronizada) explicada pela k-ésima componente principal é dada por:

$$\frac{\lambda_k}{p}, k = 1, 2, \dots, p \quad (21)$$

onde λ_k é o k-ésimo autovalor de ρ .

2.2 Critérios para Determinação do Número “k” de Componentes Principais

Quando a finalidade da aplicação da técnica é a redução da dimensionalidade do espaço amostral, isto é, a sumarização da informação das “p-variáveis” originais em “k” componentes principais, faz-se necessário estabelecer critérios para a seleção do número “k”, que é o número de componentes principais a serem retidas no sistema. Geralmente são considerados os seguintes critérios (MARQUES, 2006; MINGOTI, 2005):

a) *Scree Plot* (CATTELL, 1966): representação gráfica dos autovalores λ_i da matriz de correlação ou covariância, ordenados em modo decrescente de acordo com a respectiva ordem i (Figura 2). Por este critério, procura-se no gráfico um “ponto de salto”, que estaria representando um decréscimo de importância em relação à variância total. O valor de k seria, então, igual ao número de autovalores anteriores ao “ponto de salto”. Alguns autores, no entanto, sugerem manter também a primeira componente principal após a formação de cotovelo (CATTEL; JASPERS, 1967).

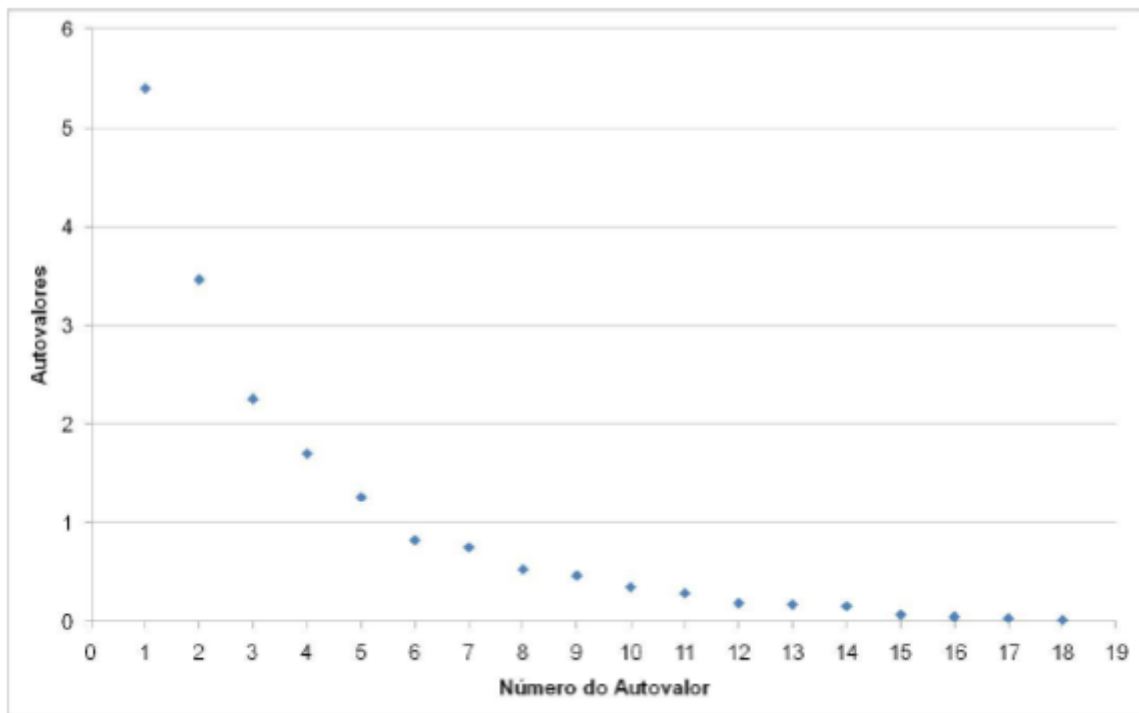


Figura 2 – Exemplo de gráfico Scree Plot

Fonte: CATTELL, 1966

b) Análise da representatividade em relação à variância total: de acordo com este critério, deve-se manter no sistema um número de componentes “k” que conjuntamente representem uma porcentagem da variância total. Esta porcentagem da variância total é um valor pré-determinado pelo pesquisador, não havendo um limite definido, podendo ser escolhido de acordo com a natureza do fenômeno investigado. Em algumas situações, é possível obter-se uma porcentagem de explicação de variância total acima de 90% ou 95% com apenas um ou dois componentes, enquanto que em outras, é necessário um número muito maior. Além disso, em alguns casos torna-se necessário trabalhar com porcentagens de explicação abaixo de 90%.

c) Critério de Kaiser (1958): o número de componentes retidas deve ser igual ao número de autovalores maiores que 1. A idéia básica do critério é manter no sistema novas dimensões que representem pelo menos a informação de variância de uma variável original.

Por fim, pode-se contar ainda com a própria experiência do pesquisador no assunto.

2.3 Escores das Componentes Principais

As componentes principais são variáveis aleatórias que não podem ser medidas diretamente, mas observadas apenas a partir da informação do vetor aleatório. É comum utilizar os escores das componentes para condução de análise estatística de dados ou para simples ordenação (ranking) dos elementos amostrais observados com intuito de identificar aqueles que estão com maiores, ou menores, valores globais das componentes (MINGOTI, 2005). Para obter os escores basta aplicar a fórmula matemática da componente aos dados amostrais, ou seja, substituem-se as variáveis nas componentes pelos seus próprios valores. Para cada nova “linha” de dados, um novo escore será calculado para cada uma das componentes principais.

2.4 Comunalidades

A comunalidade é empregada para averiguar o grau em que uma variável é uma boa medida do fator e é calculada somando-se o quadrado das cargas dos fatores para cada variável. Pode ser interpretada como a proporção da variância da variável que é explicada pelos fatores comuns (MALHOTRA, 2006).

O método das componentes principais é um método matemático que expressa a matriz de covariâncias $\Sigma_{p \times p}$, como uma função dos seus autovetores $(e_{11}, e_{12}, \dots, e_{1p}), \dots, (e_{p1}, e_{p2}, \dots, e_{pp})$ e seus respectivos autovalores $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_p$. Lembrando que os autovetores são ortonormais pode-se escrever:

$$\Sigma = \left[\begin{array}{c} \sqrt{\lambda_1} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{12} \\ \vdots \\ e_{1p} \end{pmatrix} \\ \sqrt{\lambda_2} \begin{pmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ \vdots \\ e_{2p} \end{pmatrix} \\ \dots \\ \sqrt{\lambda_p} \begin{pmatrix} e_{p1} \\ e_{p2} \\ \vdots \\ e_{pp} \end{pmatrix} \end{array} \right] * \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} (e_{11}, e_{12}, \dots, e_{1p}) \\ \sqrt{\lambda_2} (e_{21}, e_{22}, \dots, e_{2p}) \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_p} (e_{p1}, e_{p2}, \dots, e_{pp}) \end{bmatrix} \quad (22)$$

Então a matriz L com p fatores é dada por:

$$L = \left[\sqrt{\lambda_1} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{12} \\ \vdots \\ e_{1p} \end{pmatrix} \sqrt{\lambda_2} \begin{pmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ \vdots \\ e_{2p} \end{pmatrix} \dots \sqrt{\lambda_p} \begin{pmatrix} e_{p1} \\ e_{p2} \\ \vdots \\ e_{pp} \end{pmatrix} \right] \quad (23)$$

As colunas da matriz L são ordenadas na ordem decrescente dos autovalores, $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_p$. Assim na matriz L a primeira coluna é a primeira componente principal e está associada ao maior autovalor e respectivo autovetor, a segunda coluna é a segunda componente e está associada ao segundo maior autovalor e respectivo autovetor e assim sucessivamente as demais colunas de L são adicionadas na ordem decrescente dos autovalores até a última coluna que é a p -ésima componente principal, associada ao menor autovalor (MINGOTI, 2005).

A matriz L é uma matriz de cargas fatoriais, é um dos produtos finais da análise fatorial. Uma carga fatorial é um coeficiente - um número decimal, positivo ou negativo, geralmente menor do que 1 - que expressa o quanto uma variável observada está carregado ou saturado em um fator. Por outras palavras, quanto maior for a carga em cima de um fator, mais a variável se identifica com o que quer que seja o fator.

As comunalidades são empregadas para averiguar o grau em que uma variável é uma boa medida do fator e é calculada somando-se o quadrado das cargas dos fatores para cada variável. Pode ser interpretada como a proporção da variância da variável que é explicada pelos fatores comuns:

$$H_i = (\sqrt{\lambda_1} * e_{1i})^2 + (\sqrt{\lambda_2} * e_{2i})^2 + (\sqrt{\lambda_p} * e_{pi})^2 \quad (24)$$

3 LÓGICA FUZZY

Aristóteles, filósofo grego (384 - 322 a.C.), foi o fundador da ciência da lógica, e estabeleceu um conjunto de regras rígidas para que conclusões pudessem ser aceitas logicamente válidas. O emprego da lógica de Aristóteles levava a uma linha de raciocínio lógico baseado em premissas e conclusões. Como um exemplo: se é observado que "todo ser vivo é mortal" (premissa 1), a seguir é constatado que "Sarah é um ser vivo" (premissa 2), como conclusão, temos que "Sarah é mortal". Desde então, a lógica Ocidental, assim chamada, tem sido binária, isto é, uma declaração é falsa ou verdadeira, não podendo ser ao mesmo tempo parcialmente verdadeira e parcialmente falsa. Esta suposição e a lei da não contradição cobrem todas as possibilidades, formam a base do Pensamento Lógico Ocidental (SANTOS, 1958).

A Lógica *Fuzzy* (Lógica Nebulosa) viola estas suposições. Um sim ou um não como resposta a estas questões é, na maioria das vezes, incompleta. Na verdade, entre a certeza de ser e a certeza de não ser, existem infinitos graus de incerteza. Esta imperfeição intrínseca à informação representada numa linguagem natural tem sido tratada matematicamente no passado com o uso da teoria das probabilidades. Contudo, a Lógica *Fuzzy* (Nebulosa), com base na teoria dos Conjuntos *Fuzzy* (Nebulosos), tem se mostrado mais adequada para tratar imperfeições da informação do que a teoria das probabilidades (BRAGA *et al.*, 1995).

O conceito de Conjunto *Fuzzy* foi introduzido, em 1965, por Lotfi A. Zadeh (Universidade da Califórnia, Berkeley). A ele é atribuído o reconhecimento como grande colaborador do Controle Moderno. Em meados da década de 60, Zadeh observou que os recursos tecnológicos disponíveis eram incapazes de automatizar as atividades relacionadas a problemas de natureza industrial, biológica ou química, que compreendessem situações ambíguas, não passíveis de processamento através da lógica computacional fundamentada na lógica booleana (ZADEH, 1965).

Procurando solucionar esses problemas, Zadeh publicou em 1965 um artigo resumindo os conceitos dos conjuntos *Fuzzy*, revolucionando o assunto com a criação da Teoria dos Conjuntos *Fuzzy* - TCF. Esta teoria é uma generalização da teoria clássica, em que a extensão sugerida por Zadeh está na possibilidade de um determinado elemento poder pertencer a um conjunto com um valor chamado grau de pertinência. Assim, um elemento não simplesmente pertence ou não pertence a um conjunto, como na teoria clássica, mas poderá pertencer a um

conjunto com grau de pertinência que varia no intervalo $[0,1]$, onde os valores zeros indicam uma exclusão e pertinência completa, respectivamente, enquanto os valores deste intervalo representam graus intermediários de pertinência do objeto com relação ao conjunto (BARROS; BASSANEZI, 2006).

3.1 Tipos de Funções de Pertinência

A teoria dos conjuntos nebulosos baseia-se no conceito de pertinência. Um conjunto nebuloso é definido pela função de pertinência $\mu_A(x)$ que estabelece para cada x um grau de pertinência ao conjunto A , com $\mu_A(x) \in [0,1]$ (BRAGA *et al.*, 1995). Os conjuntos clássicos, Figura 3, podem ser vistos como um caso particular dos conjuntos nebulosos, Figura 4, no qual apenas os limites do intervalo são utilizados na definição da função de pertinência: $\mu_A(x) \in [0,1]$, $x \in X$ (DELGADO, 2002).

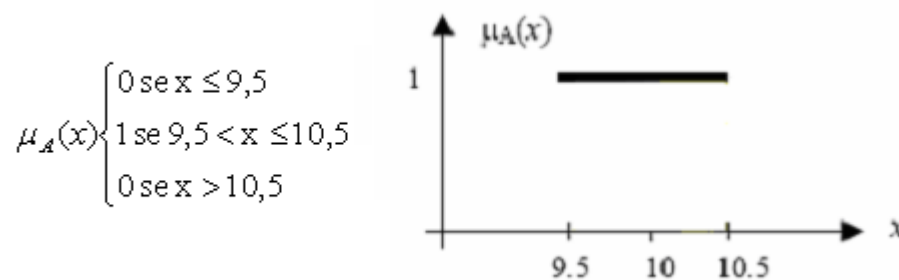


Figura 3- Concepção Clássica: “Números próximos a 10”
Fonte: DELGADO, 2002

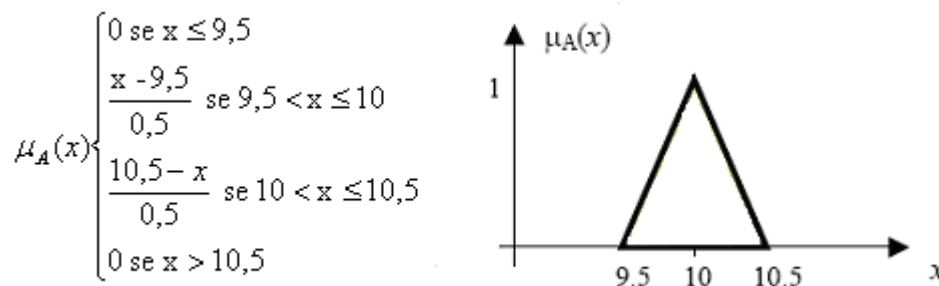


Figura 4 - Concepção *Fuzzy*: “Números próximos a 10”
Fonte: DELGADO, 2002

O formato das funções de pertinência nebulosas é restrito a certa classe de funções, representadas por certos parâmetros específicos. Os formatos mais comuns das funções de pertinência na literatura são:

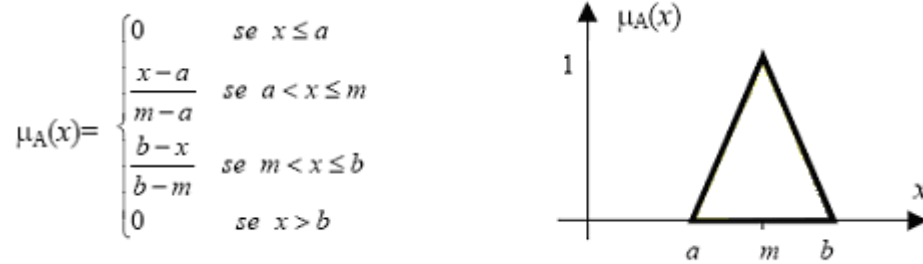


Figura 5 - Função de pertinência triangular de parâmetros (a, m, b) , com $a \leq m \leq b$
 Fonte: DELGADO, 2002

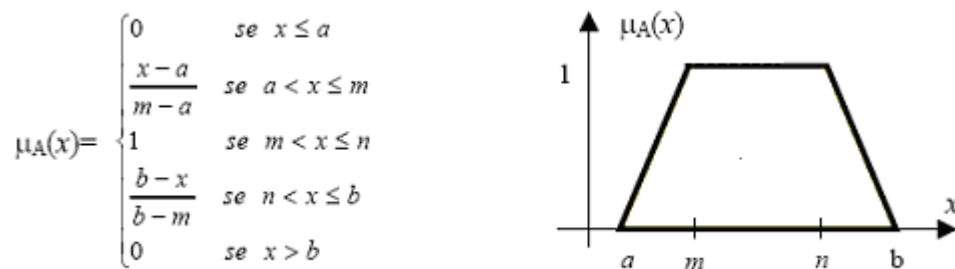


Figura 6 - Função de pertinência trapezoidal de parâmetros (a, m, n, b) , com $a \leq m, n \leq b, m \leq n$

Fonte: DELGADO, 2002

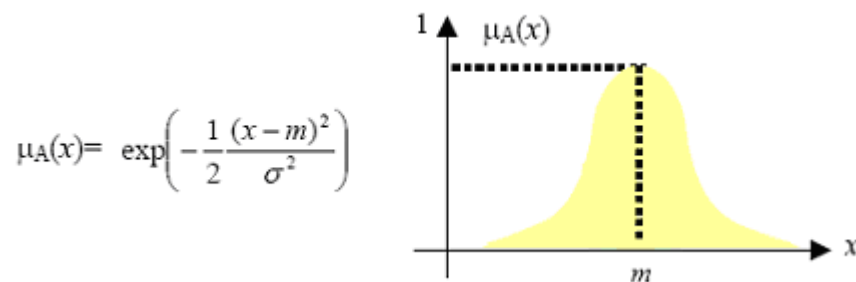


Figura 7 - Função de pertinência Gaussiana de parâmetros (m, σ) , com $\sigma > 0$, onde m é o centro e σ é o desvio padrão da gaussiana

Fonte: DELGADO, 2002

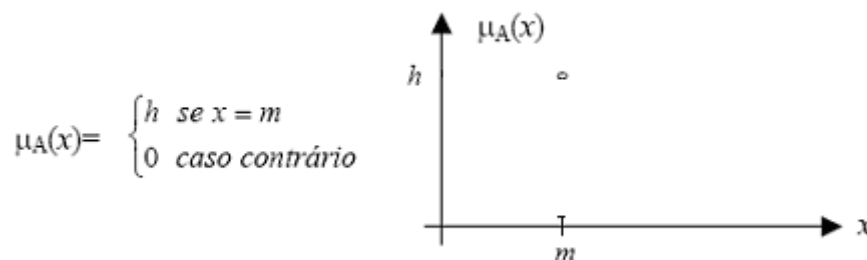


Figura 8 - Função de pertinência Singleton de parâmetros (m, h)

Fonte: DELGADO, 2002

A escolha mais adequada nem sempre é óbvia, podendo inclusive não estar ao alcance do conhecimento de um especialista para a aplicação em questão. Entretanto, existem sistemas nebulosos cujos parâmetros das funções de pertinência são totalmente definidos pelo especialista; geralmente, a escolha de funções triangulares e trapezoidais é mais comum por causa da idéia de se definirem regiões de pertinência total, média e nula. Ela é mais intuitiva do que a especificação dos conceitos de média (m) e variância (σ^2), utilizados nas funções gaussianas. Porém, em sistemas nebulosos adaptativos nos quais os parâmetros das funções de pertinência são ajustados, para otimizar o objetivo, a partir dos dados de entrada-saída, a função gaussiana é bastante utilizada, devido às suas propriedades matemáticas (DELGADO, 2002).

A função de pertinência especificada pelos parâmetros que definem o seu formato é geralmente utilizada para representar um conjunto nebuloso, entretanto existem outros parâmetros que podem ser utilizados para caracterizar os conjuntos nebulosos (BRAGA *et al.*, 1995):

Suporte (SA): Conjunto dos elementos do universo, onde o grau de pertinência é maior do que zero.

$$S_A = \{x \mid \mu_A(x) > 0\} \quad (25)$$

Núcleo(*core*) (N_A): Conjunto dos elementos do universo, onde o grau de pertinência é igual a 1.

$$N_A = \{x \mid \mu_A(x) = 1\} \quad (26)$$

Altura (H_A): Valor máximo da função de pertinência.

$$H_A = \sup_x \{\mu_A(x)\} \quad (27)$$

α -Corte : Conjunto dos elementos do universo onde o grau de pertinência é maior ou igual a α .

$$C_{\alpha A} = \{x \mid \mu_A(x) \geq \alpha\} \quad (28)$$

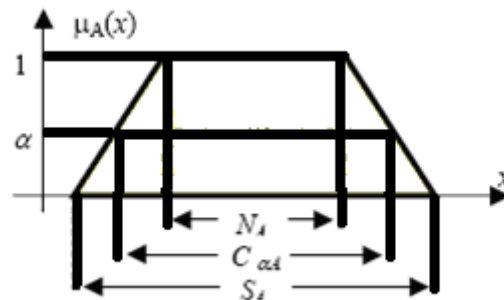


Figura 9 - Suporte (S_A), Núcleo (N_A) e α -Corte ($C_{\alpha A}$)
 Fonte: BRAGA *et al.*, 1995

3.2 Operações com Conjuntos Nebulosos

Nos conjuntos nebulosos podem ser aplicadas várias operações. Para exemplificar, citamos as operações de argumento único, que são utilizadas para modificar o formato da função de pertinência. Dentre as mais comuns definiram-se as operações de união (Figura 10), interseção (Figura 11) e complemento (Figura 12) para os conjuntos nebulosos, a partir da função de pertinência com base na teoria de conjuntos clássicos, Zadeh (1965):

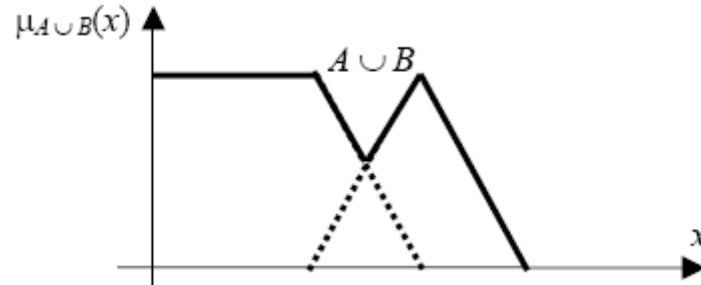


Figura 10 - Representação da função de pertinência do operador de união entre os conjuntos A e B
 Fonte: DELGADO, 2002

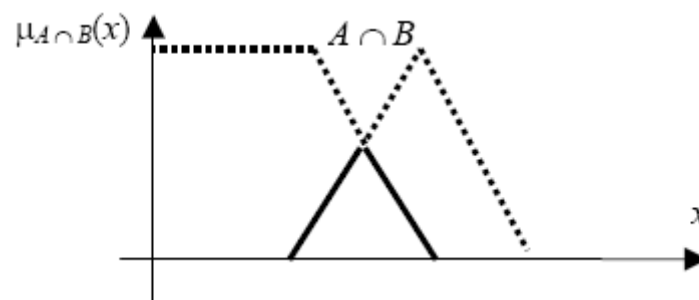


Figura 11 - Representação da função de pertinência do operador de interseção entre os conjuntos A e B
 Fonte: DELGADO, 2002

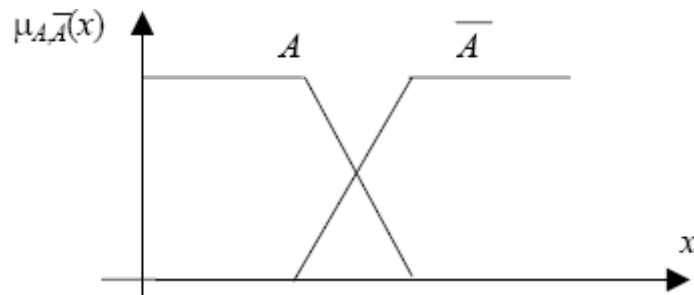


Figura 12 - Representação da função de pertinência do operador de complemento do conjunto A

Fonte: DELGADO, 2002

3.2.1 Variáveis Lingüísticas

As palavras são freqüentemente usadas para descreverem variáveis e uma variável lingüística pode ser definida como uma variável cujos valores são palavras ou sentenças, em vez de números. Para Zadeh (1975), uma variável lingüística é dada por:

$\langle X, T(X), X, G, M \rangle$, onde

$X \rightarrow$ Nome da variável lingüística, cuja variável base é x ;

$T(X) \rightarrow$ Representa o conjunto de termos lingüísticos. Cada elemento de $T(X)$ representa um rótulo l (tamanho da base) dos termos que a variável X pode assumir;

$X \rightarrow$ Universo de discurso da variável lingüística X ;

$G \rightarrow$ Representa a gramática para a geração dos termos ou rótulos, define como os termos primários (baixo, médio e alto) são associados aos modificadores (muito, pouco, maior, menor, ou, não) para formar os nomes dos termos não-primários;

$M \rightarrow$ Representa a regra que associa a cada rótulo (l), um conjunto nebuloso no universo X , representando o seu significado $M(l)$.

Seja $F(X)$ uma família de conjuntos nebulosos definidos no universo X , onde a regra M mapeia $T(X) \rightarrow F(X)$, associando a cada rótulo do conjunto de termos $T(X)$ um conjunto nebuloso definido em X . A granularização (partição esparsa ou fina), a especificação e a distribuição dos termos lingüísticos definem a partição nebulosa do universo correspondente, onde o número de termos lingüísticos define a granularidade (Figura 13) das partições de cada universo (ZADEH, 1975).

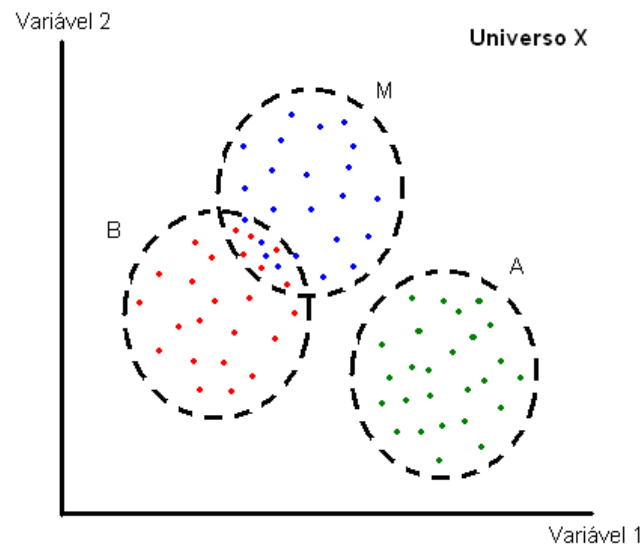


Figura 13 – Granularização
 Fonte: ZADEH, 1997

3.3 Reconhecimento de Padrões

O reconhecimento de padrões tem o propósito de procurar, detectar e explicitar estruturas associadas às regularidades ou propriedades presentes em um conjunto de dados (MANDAMI; ASSILIAN, 1975). Por ser uma atividade muito complexa, o reconhecimento de padrões pode ser decomposto em vários subproblemas, aqui chamados de etapas, tornando-o deste modo mais compreensível. Uma de suas etapas é a análise de classes, a qual requer técnicas de agrupamento de dados, sendo esta à área de estudo abordada neste trabalho. Podemos assim resumir o relacionamento entre reconhecimento de padrão e o agrupamento de dados adotado neste trabalho mostrado na Figura 14, onde é necessário elaborar a análise de classes a partir de agrupamento de dados.

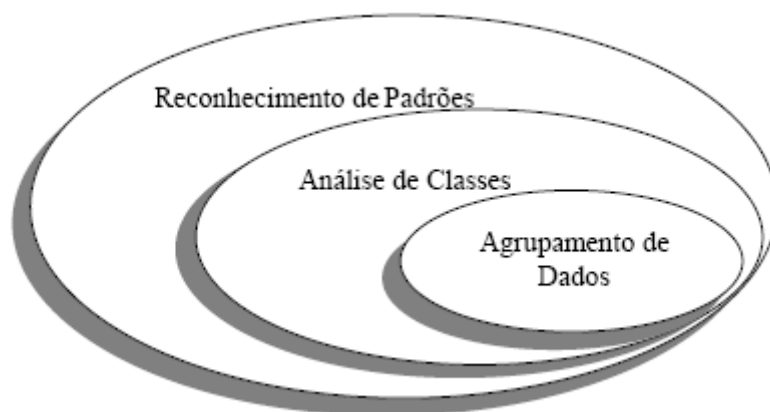


Figura 14 - Reconhecimento de padrões versus agrupamento de dados
 Fonte: COLE, 1988

Os algoritmos de agrupamentos são procedimentos de exploração que procuram estruturas “naturais” em um conjunto de dados. O agrupamento envolve classificação de dados, ou pontos, em grupos, ou classes, de modo que os pontos de um mesmo grupo são mais semelhantes entre si que com aqueles pontos de grupos distintos (COLE, 1998).

Em geral, após a partição de um conjunto de dados em grupos, associa-se a cada um destes grupos uma classe e por esta razão, freqüentemente usa-se o termo classe como sinônimo de grupo. Claramente, o agrupamento de dados constitui uma das principais e mais complexas etapas do processo de reconhecimento de padrões.

3.4 Agrupamento de Dados

Nesta seção serão abordados os conceitos de agrupamento de dados e suas categorias, e ainda detalha os principais algoritmos de agrupamento nebuloso de dados existentes na literatura.

Os termos e notações a seguir são utilizados durante o decorrer deste trabalho.

- 1) Dado, padrão, objeto, ponto ou observação: denotado por x , é representado por um vetor com p componentes.
- 2) Dados rotulados: são aqueles que assumem valores em um mesmo espaço vetorial multidimensional, acompanhados da classe a que cada dado pertence, podendo haver múltiplas classes, com variâncias e números de dados distintos ou não, para cada classe (VON ZUBEN, 2002).

3) Dados não rotulados: são aqueles que assumem valores em um mesmo espaço vetorial multidimensional e que não se conhece, a priori, a classe a que pertencem embora cada um pertença a uma classe específica. O número de classes pode ser conhecido a priori ou não. A variância e o número de dados de cada classe podem diferir ou não (VON ZUBEN, 2002).

4) Atributo ou característica: valor de um componente x_i de um vetor x .

5) Conjunto de dados: denotado por $X = \{x_1, \dots, x_p\} \subset \mathfrak{R}^p$, sendo \mathfrak{R} conjunto dos números reais. O k -ésimo elemento de X é representado por $x_k = (x_{k1}, \dots, x_{kp})^T$, onde T denota transposto.

6) Grupo: um grupo é um subconjunto homogêneo de pontos de um conjunto X de pontos. Os pontos que pertencem a um mesmo grupo devem ser similares, ou próximos, e os pontos de diferentes grupos o mais dissimilares, ou distantes, possíveis. Uma outra definição proposta por Jain e Dubes (1988) é: "Grupos são descritos como regiões de um espaço multidimensional contendo uma alta densidade de pontos, separados entre si por regiões contendo uma baixa densidade de pontos".

7) Agrupamento e classificação: na literatura, a diferença entre agrupamento e classificação se dá pela capacidade dos algoritmos de agrupamento e classificação em responderem as seguintes perguntas:

- a) Quantos grupos existem em um determinado conjunto de dados?
- b) Quais são estes grupos?
- c) A qual grupo pertence um ponto x do conjunto de dados?

Para Jain e Dubes (1988) o agrupamento é um caso especial de classificação. A Figura 15 sugere uma árvore com os tipos de classificação, onde cada nó da árvore define um modo de resolver o problema de classificação. As definições dos nós desta Figura são as seguintes:

A teoria dos conjuntos nebulosos baseia-se no conceito de pertinência. Um conjunto nebuloso é definido pela função de pertinência $\mu_A(x)$ que estabelece para cada x um grau de pertinência ao conjunto A , com $\mu_A(x) \in [0,1]$ (BRAGA *et al.*, 1995). Os conjuntos clássicos, Figura 3, podem ser vistos como um caso particular dos conjuntos nebulosos, Figura 4, no qual apenas os limites do intervalo são utilizados na definição da função de pertinência: $\mu_A(x) \in [0,1]$, $x \in X$ (DELGADO, 2002).

- Classificação exclusiva versus não exclusiva - Uma classificação exclusiva é uma partição de um conjunto X , onde cada ponto pertence exclusivamente a um único grupo. Uma classificação não exclusiva, ou sobreposta, pode assumir que um ponto pertença a vários grupos. Um agrupamento nebuloso é um tipo de classificação não exclusiva, onde o ponto é associado a cada um dos grupos com um respectivo grau de pertinência.
- Classificação supervisionada versus não supervisionada - Uma classificação supervisionada aplica somente uma medida de similaridade entre os pontos para se determinar a classe de um ponto. Esta classificação utiliza categorias já rotuladas, isto é, conhece-se o número de grupos e quais são estes grupos. Uma classificação não supervisionada possui categorias ainda não rotuladas, isto é, os algoritmos não supervisionados precisam responder a primeira e a segunda perguntas citadas acima. Em Jain *et al.* (1999) os algoritmos de agrupamento são algoritmos de classificação não supervisionados e necessariamente respondem a primeira questão, ou seja, os algoritmos determinam o número de classes nos conjuntos de dados fornecidos.



Figura 15 - Árvore de tipos de classificação
Fonte: JAIN; DUBES, 1988

Para outros (GATH; GEVA, 1989; GEVA, 1999; ZAHID *et al.*, 1999) os algoritmos de agrupamento são divididos em supervisionados e não supervisionados. Os algoritmos de agrupamento supervisionados não respondem à primeira questão, pois precisam conhecer a priori o número de grupos. Os algoritmos não supervisionados, ao contrário, têm o propósito de encontrar o número de grupos. Os algoritmos de classificação respondem apenas a terceira questão. Portanto, ao contrário de Jain (1988), a classificação torna-se um caso especial de agrupamento.

Atualmente, a maioria dos algoritmos não supervisionados utiliza os algoritmos supervisionados como parte de um procedimento iterativo para a determinação do número de grupos. Objetivamente, o número de grupos depende do critério de validação adotado e das características dos atributos dos próprios elementos do conjunto (objeto do estudo). Entretanto, exceto em casos triviais, a escolha do número de grupos é subjetiva, pois depende tanto da percepção do usuário, quanto das características e dos requisitos da aplicação. Portanto, pode-se observar a dificuldade e a importância de se obter o número de grupos.

8) Centro ou protótipo: é uma referência para o algoritmo determinar se um ponto pertence ou não a um grupo. O centro pode ser visto como o "centro de gravidade" de um grupo. Um centro denotado por $v_i \in \mathcal{R}^p$ representa o i -ésimo grupo. Cada ponto do conjunto é associado a um grupo de acordo com uma medida de similaridade em relação aos centros dos grupos. $V = \{v_1, \dots, v_c\} \in \mathcal{R}^p$ é o conjunto dos centros dos c grupos.

9) Atualização de centros por blocos: os centros são avaliados e/ou atualizados em bloco, ou seja, após a avaliação de todo um conjunto de pontos. Esse método é melhor quando se tem interesse apenas no resultado final, isto é, o melhor resultado é obtido no final da execução do algoritmo utilizado. Porém, esta técnica torna-se numericamente ou computacionalmente inviável quando o conjunto de dados é muito grande e a solução do problema é obtida através da minimização de uma função objetivo (BARALDI; BLONDA, 1998).

10) Atualização de centros ponto a ponto: a atualização dos centros é feita junto com a avaliação de cada ponto. Neste caso, é possível atualizar o centro mais similar ao ponto analisado, ou todos os centros de acordo com os respectivos graus de pertinência do ponto. Os métodos ponto a ponto são necessários quando:

- a) os resultados precisam ser conhecidos em tempo real;
- b) os conjuntos de dados são grandes e os métodos por blocos se tornam inviáveis em termos de memória ou tempo de processamento;
- c) os dados são processados de forma contínua o que impossibilita a aplicação do método por bloco (BARALDI; BLONDA, 1998).

Os resultados da atualização ponto-a-ponto tipicamente dependem da ordem de apresentação dos dados de entrada. Além disso, estes métodos são mais sensíveis à presença de ruídos (BARALDI; BLONDA, 1998).

11) Ruído segundo Han e Kamber (2001) são os pontos que completamente diferem perante todos os grupos existentes em um conjunto, de forma que seja provável que estes pontos fossem gerados por medidas ou execuções erradas.

12) Matriz de pertinência: matriz onde o valor de cada elemento é o grau de pertinência de cada ponto aos grupos existentes, sendo representada por uma matriz $U_{n \times c}$, onde c é o número de grupos e n representa o número de dados no conjunto. Portanto, cada elemento u_{ki} de U , $i=1, \dots, c$, $k=1, \dots, n$, fornece o grau de pertinência de cada elemento do conjunto ao i -ésimo grupo. Esta pertinência poderá ser rígida, com valores em $\{0,1\}$ ou flexíveis, com valores no intervalo $[0,1]$. Estas restrições induzem tipos de partição de X .

13) Medida de similaridade versus dissimilaridade: um método de agrupamento requer um índice de proximidade (semelhança, afinidade), ou uma associação estabelecida entre os pontos. Índices de proximidade podem ser obtidos via medidas de similaridade ou de dissimilaridade. Quanto maior a medida de similaridade, maior será a relação existente entre os pontos; quanto maior a medida de dissimilaridade, menor a semelhança entre pontos. A distância Euclidiana é um exemplo de medida de dissimilaridade, enquanto que o coeficiente de correlação é um exemplo de similaridade (JAIN; DUBES, 1988).

14) Densidade: é a quantidade de dados em relação a alguma unidade do espaço. Por exemplo, 200 árvores por hectares. Para o agrupamento, os grupos são considerados como regiões do espaço onde a densidade de dados é maior se comparadas com as regiões vizinhas.

3.5 Normas e Critérios de Distância

Um aspecto importante a ser definido, para as técnicas de agrupamento, é o critério de similaridade ou dissimilaridade adotado. As métricas proporcionam meios para se definir uma medida de similaridade ou dissimilaridade entre os pontos. Ou seja, as métricas quantificam o quanto os pontos são próximos ou semelhantes. Em seguida será revista a noção de distância e descrever as principais métricas.

3.6 Definição de Espaço Métrico

Segundo Domingues (1982), dado um conjunto $M \neq \emptyset$ e $d: M \times M \rightarrow \mathfrak{R}_+$, sendo \mathfrak{R}_+ o conjunto dos números reais positivos, indica-se por $d(x, y)$, a imagem de um par genérico (x, y) através da função d . Diz-se que d é uma métrica sobre M se as seguintes condições são verificadas para quaisquer $x, y, z \in M$:

$$(M_1) \quad d(x, y) = 0 \quad (x = y), \quad (29)$$

$$(M_2) \quad d(x, y) = d(y, x), \quad (30)$$

$$(M_3) \quad d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y). \quad (31)$$

Nestas condições, cada imagem $d(x, y)$ recebe o nome de distância de x a y e o par (M, d) , onde d é uma métrica sobre M , de espaço métrico. Cada objeto de um espaço métrico será sempre referido como ponto desse espaço, seja ele um ponto em si mesmo, ou um número, ou ainda uma função ou um vetor. A propriedade (M_3) é conhecida como desigualdade triangular.

3.7 Exemplos de Métricas

1. Métrica discreta ou Métrica zero-um . Dado $M \neq \emptyset$, define-se $d: M \times M \rightarrow \mathfrak{R}_+$ do seguinte modo(DOMINGUES, 1982):

$$d(x, x) = 0 \text{ e } d(x, y) = 1, \forall x, y \mid x \neq y \quad (32)$$

2. Métricas como medidas de distância entre dois pontos dados.

Seja o conjunto de todas as p-uplas (vetores com dimensão p) (x_1, x_2, \dots, x_p) , sendo $x=(x_1, \dots, x_p)$ e $y=(y_1, \dots, y_p)$ pontos arbitrários de \mathfrak{R}^p .

Existem várias métricas que podem ser utilizadas como uma medida de distância entre dois pontos, dentre as mais importantes, pode-se citar:

$$\text{Distância Euclidiana: } d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \dots + (x_k - y_k)^2} \quad (33)$$

$$\text{Distância de Mahalanobis: } d(x, y) = \sqrt{(x - y)^T A (x - y)} \quad (34)$$

onde A é a matriz de covariância e y o valor locacional (média).

$$\text{Distância de Minkowski: } d(x, y) = \left[\sum_{i=1}^p w_i |x_i - y_i|^k \right]^{1/k}, \quad k \geq 1, x_i \neq y_i \quad (35)$$

Existem outras métricas que podem ser utilizadas como uma medida de distância entre dois pontos, além das já citadas anteriormente, sendo $x=(x_1, \dots, x_p)$ e $y=(y_1, \dots, y_p)$ pontos arbitrários do \mathfrak{R}^p .

3.8 Categorias de Algoritmos de Agrupamento

Uma multiplicidade de algoritmos de agrupamento é encontrada na literatura. Estes algoritmos podem ser classificados de acordo com várias características, sendo os mais importantes:

- Tipo de dados;
- Parâmetros do algoritmo;
- Critério de similaridade que determina um grupo;
- Conceitos e fundamentos em que se baseiam os algoritmos de agrupamento (conjuntos nebulosos, estatística, redes neurais, etc...).

3.8.1 Tipo de Dados

A característica tipo de dados se refere à capacidade do algoritmo agrupar ou não dados de diferentes naturezas: numérico, caracteres, palavra, texto, imagens, objetos, etc.

3.8.2 Parâmetros do Algoritmo

Os conhecimentos a priori sobre as características do conjunto X, tais como o número de grupos, as classes desejadas, a matriz de pertinência, ou a falta deles, normalmente são fatores cruciais na seleção de um método de agrupamento.

Segundo Gath e Geva (1989), as três maiores dificuldades encontradas durante o agrupamento nebuloso de dados são:

1. Número de grupos, o que nem sempre pode ser definido a priori;
2. Características e localização dos centros dos grupos, o que não são necessariamente conhecidas a priori;
3. Grande variabilidade de formas, densidade e número de dados em cada grupo.

Vê-se, portanto, que um dos principais problemas na tarefa de agrupamento é a estimação do número de grupos. Existem inúmeras propostas na literatura que tratam deste assunto, mas até o presente momento não há um procedimento que, independentemente das características do conjunto de dados, detecte o número esperado de classes (BEZDEK; PAL, 1992; DUDA; HART, 1973). Sabe-se que o problema de determinar o número ótimo de classes em um conjunto finito de dados é um problema NP-completo. NP é a classe de problemas que possui algoritmos não-determinísticos cujo passo de reconhecimento pode ser realizado por um algoritmo polinomial do tamanho da entrada, ou seja, a relação entre o tamanho do problema e seu tempo de execução é polinômico (DUDA; HART, 1973). Devido a esta característica, a maioria dos algoritmos, sejam eles nebulosos ou não, assume que o número de classes em um conjunto finito é conhecido, de modo que, cabe para as técnicas de validação, caracterizar o melhor agrupamento Gath e Geva (1989).

3.8.3 CrITÉRIOS de Similaridade ou Dissimilaridade que Determinam um Grupo

De acordo com a categoria de critério de similaridade ou dissimilaridade, os algoritmos podem ser classificados como (JAIN *et al.*, 1999):

Agrupamento por partição: visa obter diretamente uma partição de X. Mais especificamente, estes algoritmos determinam a partição utilizando a otimização de uma função objetivo que enfatiza a estrutura local e global dos dados. Para se encontrar uma

solução ótima global, um agrupamento por partição requer uma busca exaustiva de todas as partições possíveis (HAN; KAMBER, 2001).

Agrupamento hierárquico: classifica elementos de X em grupos em diferentes etapas, de modo hierárquico. O resultado destes algoritmos é uma árvore de grupos, chamada de dendrograma. As técnicas hierárquicas podem ainda ser subdivididas em dois tipos: a primeira chamada de aglomerativa, ou aproximação “*bottom-up*”, onde fusões sucessivas dos n , $n-1$, $n-2$ pontos vão sendo obtidas, até reunir todos os pontos em um único grupo. A segunda técnica é conhecida como divisiva, onde partindo de um único grupo, e por divisões sucessivas vão sendo obtidos 2,3, grupos menores, até cada ponto ser um grupo ou até obter uma outra condição de parada determinada. As técnicas divisivas também são conhecidas como aproximação “*top-down*”. O que caracteriza estes processos é a união de dois grupos em certa etapa, produzindo um dos agrupamentos da etapa superior caracterizando assim, um processo hierárquico. Os dendogramas são impraticáveis (Figura 16) para grandes conjuntos de dados (JAIN; DUBES, 1988).

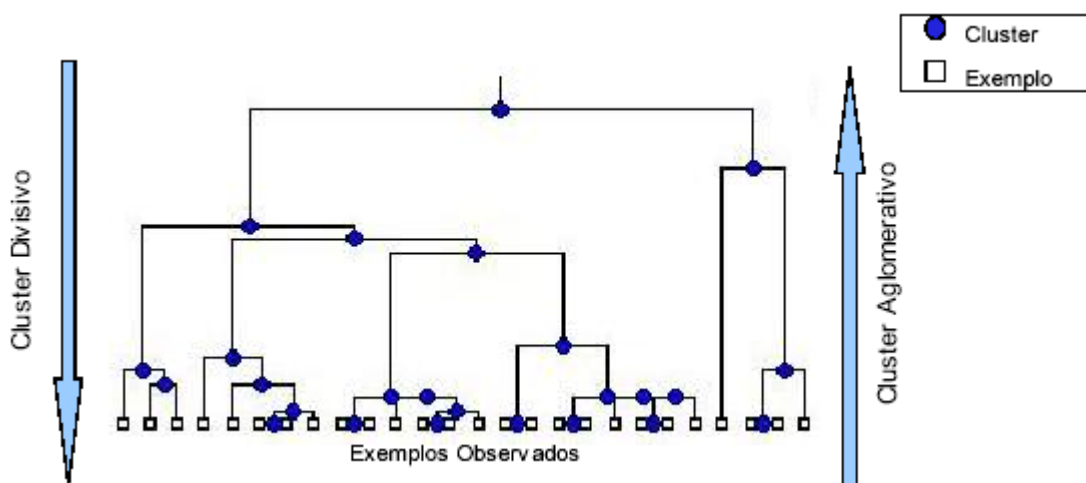


Figura 16 - Modelo de um dendrograma e seus de componentes classificação
Fonte: JAIN; DUBES, 1988

Agrupamento baseado em densidade: a idéia desta técnica é agrupar pontos vizinhos de um conjunto de dados baseado nas condições de densidade. Os grupos são regiões densas de pontos e separados por regiões de baixa densidade de pontos.

3.8.4 Conceitos e Fundamentos

De acordo com a categoria dos conceitos e fundamentos, os algoritmos podem ser caracterizados como:

- a) Rígidos: não consideram a sobreposição de grupos, o algoritmo deverá resultar em um agrupamento com valores na matriz de pertinência restritos ao conjunto $\{0, 1\}$.
- b) Neurais: adotam abordagens conexionistas para o agrupamento. Em geral utilizam redes neurais artificiais com aprendizagem não supervisionada.
- c) Estatísticos: Os Conceitos lógico-matemáticos empregados na análise estatística para agrupamento de dados são principalmente probabilísticos.
- d) Nebulosos: utilizam conjuntos nebulosos para classificar dados e considerar que um ponto pode pertencer a mais de um grupo, mas com diferentes graus de associação. Estes tipos de algoritmos levam para um esquema de agrupamento que são compatíveis com experiências da vida cotidiana, pois tratam as incertezas dos dados reais. O mais expressivo algoritmo de agrupamento nebuloso é o *Fuzzy C-Means* (BEZDEK, 1981).

3.9 Princípio de Extensão

O princípio de extensão é um dos conceitos básicos da teoria dos conjuntos *Fuzzy* que pode ser usado para generalizar conceitos matemáticos de conjuntos nítidos para conjuntos *Fuzzy* (ZIMMERMANN, 1990). Define-se este princípio da seguinte forma:

Seja um produto cartesiano de universos $X = X_1, \dots, X_r$ e $\tilde{A}_1, \dots, \tilde{A}_r$ de “r” conjuntos *Fuzzy* em X_1, \dots, X_r , respectivamente. “f” é um mapeamento de X para o universo Y, $y = f(x_1, \dots, x_r)$. Então o princípio de extensão permite definir um conjunto *Fuzzy* E^* em Y por:

$$E^* = \{(y, \mu_{E^*}(y)) \mid y = f(x_1, \dots, x_r), (x_1, \dots, x_r) \in X\} \quad (36)$$

onde

$$\mu_{E^*}(y) = \sup_{X \in f^{-1}(y) \neq \emptyset} \{[\min \{\mu_{\tilde{A}_1}(x_1), \dots, \mu_{\tilde{A}_r}(x_r)\}] \text{ para } f^{-1}(y) \neq \emptyset$$

$$\mu_{E^*}(y) = 0 \quad (37)$$

onde $f^{-1}(y) \neq \emptyset$, o inverso de f.

4 ALGORITMO *K-MEANS*

O algoritmo de clusterização *K-means* também pode ser chamado de K-médias. Segundo Jain *et al.* (1999) o algoritmo *K-means* é popular devido a sua facilidade de implementação e sua ordem de complexidade $O(n)$, onde n é o número de padrões.

De acordo com Fontana e Naldi (2009), *K-means* utiliza o conceito de centróides como protótipos representativos dos grupos, onde o centróide representa o centro de um grupo, sendo calculado pela média de todos os objetos do grupo.

K-means é uma técnica que usa o algoritmo de agrupamento de dados por K-médias (*K-means clustering*). O objetivo deste algoritmo é encontrar a melhor divisão de P dados em K grupos C_i , $i = 1, \dots, K$, de maneira que a distância total entre os dados de um grupo e o seu respectivo centro, somada por todos os grupos, seja minimizada. (PIMENTEL *et al.*, 2003).

Jain *et al.* (1999) afirmam que, um dos maiores problemas do algoritmo *K-means* é que o mesmo é sensível à seleção da partição inicial e pode convergir a um mínimo local do valor da função de critério se a partição inicial não for devidamente escolhida. Um exemplo desse problema também é apresentado a seguir:

A Figura 17 mostra sete padrões bidimensionais (A, B, C, D, E, F, G). Se iniciarmos com os padrões A, B, e C como as médias iniciais em torno das quais os três *clusters* são construídos, então nós finalizamos com a partição $\{\{A\}, \{B, C\}, \{D, E, F, G\}\}$ mostrada pelas elipses. O valor do critério de erro dentro dos retângulos é muito maior para esta partição que para a melhor partição $\{\{A, B, C\}, \{D, E\}, \{F, G\}\}$ mostrada pelos retângulos, que engloba o valor global mínimo da função critério de erro que está nos retângulos para um agrupamento contendo três *clusters*. A solução de três *clusters* correta é obtida escolhendo, por exemplo, A, D, e F como as médias de cluster iniciais (JAIN *et al.*, 1999).

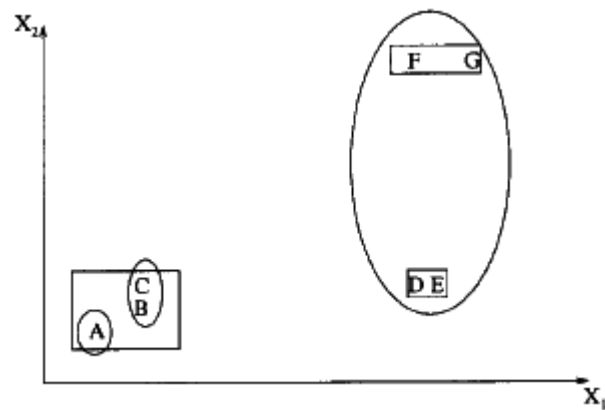


Figura 17 - Sensibilidade do *K-means* à partição inicial
 Fonte: JAIN *et al.*, 1999

O algoritmo *K-means* pode ser descrito pelos passos a seguir (Figura 18), de acordo com Fontana e Naldi (2009):

1. Atribuem-se valores iniciais para os protótipos seguindo algum critério, por exemplo, sorteio aleatório desses valores dentro dos limites de domínio de cada atributo;
2. Atribui-se cada objeto ao grupo cujo protótipo possua maior similaridade com o objeto;
3. Recalcula-se o valor do centróide (protótipo) de cada grupo, como sendo a média dos objetos atuais do grupo;
4. Repete-se os passos 2 e 3 até que os grupos se estabilizem.

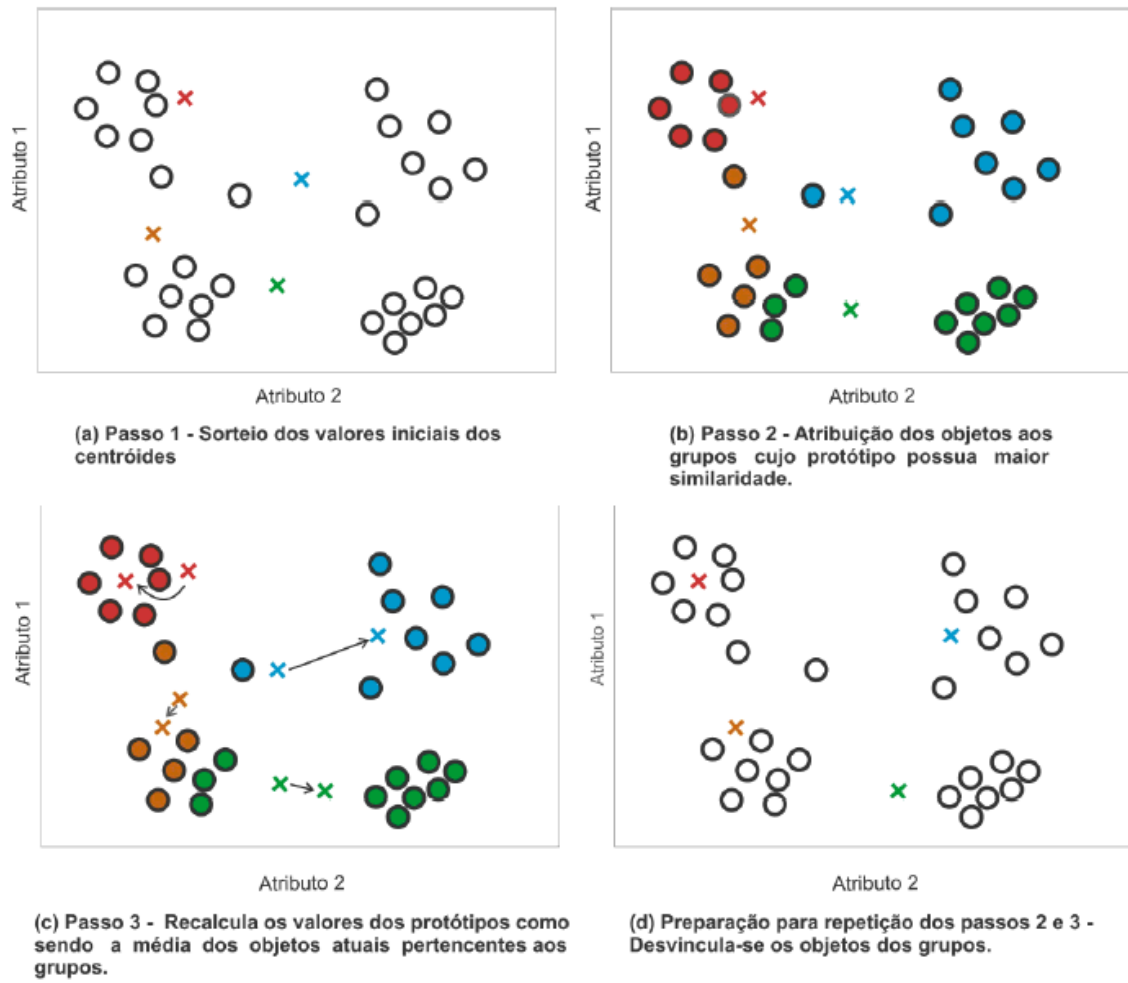


Figura 18 - Exemplo de algoritmo *K-means*
 Fonte: FONTANA; NALDI, 2009

5 ALGORITMO FUZZY C-MEANS (FCM)

O Algoritmo *Fuzzy C-Means* é um método de agrupamento que permite uma parte dos dados pertencer a dois ou mais *clusters*. Este método, desenvolvido por Dunn (1973) e melhorado por Bezdek (1981), é freqüentemente usado em reconhecimento de padrões.

O método baseia-se em um modelo não linear de otimização que agrupa dados com características similares de acordo com um procedimento iterativo de minimização de uma função objetivo que representa um critério de partição, ponderado pelos graus de pertinência dos dados aos respectivos grupos (ALBUQUERQUE; FARIAS, 2008).

O método de clusterização FCM é consubstanciado no aprendizado não supervisionado em domínios *fuzzy* (AMARAL; PACHECO, 2010) e tem como meta encontrar uma pseudo-partição *fuzzy* que representa a estrutura dos dados da melhor forma possível (BEZDEK, 1992). A seguir descreveremos o algoritmo FCM aprimorado por Bezdek em 1981.

Seja um conjunto de dados $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ onde x_k , em geral, é um vetor de características $x_k = [x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{kp}] \in \mathcal{R}^p$ para todo $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ sendo \mathcal{R}^p o espaço p -dimensional. Uma pseudo-partição *fuzzy* de X é uma família de “ c ” subconjuntos *fuzzy* de X , denotada por $P = \{\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \dots, \tilde{A}_c\}$ para todo $k \in \{1, 2, \dots, n\}$, onde “ n ” representa o número de elementos do conjunto X . A restrição imposta é que a soma dos graus de pertinência de um elemento em todas as famílias deve ser igual a um.

$$\sum_{i=1}^c A_i(x_k) = 1 \quad (38)$$

Para todo $i \in \{1, 2, \dots, c\}$ sendo que “ c ” representa o número de classes (NC), ou seja, a soma dos graus de pertinência de todos os elementos de uma família deve ser menor que o número de elementos existentes no conjunto universo X .

$$0 < \sum_{k=1}^n A_i(x_k) < n \quad (39)$$

Por exemplo, dado o conjunto de características $X = \{x_1, x_2, x_3\}$ e uma pseudo-partição com as famílias \tilde{A}_1 e \tilde{A}_2 em que:

$$\tilde{A}_1 = 0.6/x_1 + 1.0/x_2 + 0.1/x_3 \quad (40)$$

$$\tilde{A}_2 = 0.4/x_1 + 0.0/x_2 + 0.9/x_3 \quad (41)$$

Verifica-se que a soma das pertinências da característica “1”, $0.6 + 0.4 = 1$, o mesmo ocorrendo para as classes “2” e “3”, respectivamente, $1 + 0 = 1$ e $0.1 + 0.9 = 1$.

Por outro lado, para as famílias, também é atendida à restrição de não ultrapassar o total de elementos do Universo de X, que neste caso $\#X = 3$:

$$\tilde{A}_1: 0.6 + 1 + 0.1 = 1.7 < 3 \quad (42)$$

$$\tilde{A}_2: 0.4 + 0 + 0.9 = 1.3 < 3 \quad (43)$$

O método FCM deve ser equacionado por meio de um algoritmo iterativo, baseado na minimização de um Índice de Desempenho (ID), que indica a adequabilidade da pseudo-partição gerada. O desempenho do algoritmo é influenciado pela escolha do número de classes c , dos centros de grupo iniciais, da ordem na qual os vetores são processados, da medida de distância, do critério de parada e pelas propriedades dos dados. Assim, o algoritmo assume como entrada os seguintes parâmetros: o número desejado de *clusters* c ; uma medida de distância $m \in (1, \infty)$, que define a distância permitida entre os pontos e os centros de cluster; e um número pequeno $\varepsilon > 0$, utilizado como um Critério de Parada (CP), além da instanciação inicial dos graus de pertinência dos objetos a cada uma das classes e dos centros de cluster dessas classes. A seguir, são descritos os passos do algoritmo:

Passo 1: Considere $t=0$ representando a iteração 0, defina $P(0)$ como uma pseudo-partição $P = \{\tilde{A}_1, \tilde{A}_2, \dots, \tilde{A}_c\}$, atribuindo os graus de pertinência dos elementos às classes dessa pseudo-partição, os quais podem ser informados ou calculados de forma aleatória.

Passo 2: No caso de $t=0$, forneça os “ c ” centros de *cluster* $v_1^{(t)}, \dots, v_c^{(t)}$ iniciais. Para $t > 0$, calcule os “ c ” centros de *cluster* $v_1^{(t)}, \dots, v_c^{(t)}$ pela equação (44) para $P^{(t)}$ e o valor de “ m ” fornecido.

$$v_i = \frac{\sum_{k=1}^n [\tilde{A}_i(x_k)]^m x_k}{\sum_{k=1}^n [\tilde{A}_i(x_k)]^m} \quad (44)$$

A variável real $m > 1$ é chamada de índice de fuzzificação e usada para definir a distância permitida entre os pontos e o centro que está sendo calculado. Quanto maior o valor de “ m ” mais elementos do conjunto são considerados como pertencentes a uma pseudo-partição. Esse parâmetro é escolhido de acordo com o problema considerado. Não existe nenhuma base teórica para uma escolha ótima do valor de “ m ”, no entanto a literatura sugere $m=1.25$ (FRANCO, 2002). O vetor v_i calculado por (equação 44), visto como o centro do *cluster* A_i , é a média ponderada dos dados em A_i . O peso do dado x_k é a m -ésima potência do seu grau de pertinência ao conjunto *fuzzy* A_i .

Passo 3: Atualize $P^{(t)}$ para $P^{(t+1)}$ usando o seguinte procedimento: para cada $x_k \in X$ e para todo $i \in \{1, 2, \dots, c\}$, se $\|x_k - v_i^{(t)}\|^2 > 0$, calcule o grau de pertinência do elemento x_k à classe \tilde{A}_i , pela equação (45), sendo que as classes \tilde{A}_i podem ser selecionadas em uma ordem pré-definida ou aleatoriamente.

$$\tilde{A}_i^{(t+1)}(x_k) = \left\| \sum_{j=1}^c \left[\left(\frac{\|x_k - v_i^{(t)}\|^2}{\|x_k - v_j^{(t)}\|^2} \right)^{\frac{1}{m-1}} \right] \right\|^{-1} \quad (45)$$

Assume-se que $\|\cdot\|$ é alguma norma indicada para o produto interno no espaço \mathfrak{R}^p e $\|x_k - v_i^{(t)}\|^2$ representa a distância entre x_k e v_i . Por meio da equação (45), a distância de cada elemento x_k ao centro de *cluster* v_i da pseudo-partição atual \tilde{A}_i é comparada à distância do mesmo elemento ao centro de *cluster* v_j de todas as demais pseudo-partições \tilde{A}_j , de modo a atribuir um grau de pertinência ao elemento x_k no *cluster* \tilde{A}_i que seja proporcional ao seu grau de pertinência aos demais *clusters* \tilde{A}_j .

Quando $\|x_k - v_i^{(t)}\|^2 = 0$ para algum $i \in I \subseteq \{1, 2, \dots, c\}$, o que indica que x_k corresponde ao centro de *cluster* v_i , defina $\tilde{A}_i^{(t+1)}(x_k)$ como um número real não negativo que satisfaz (equação 36) e defina $\tilde{A}_i^{(t+1)}(x_k) = 0$ para $i \in \{1, 2, \dots, c\} - I$

$$\sum_{i \in I} \tilde{A}_i^{(t+1)}(x_k) = 1 \quad (46)$$

Neste caso, quando o elemento coincide com o centro de *cluster* de uma classe \tilde{A}_i , o ideal seria que o algoritmo atribuísse a tal elemento o grau de pertinência máximo (valor

unitário) àquela classe e o grau de pertinência mínimo (valor nulo) às demais classes. No entanto, o teste realizado pela equação (46) se torna necessário, uma vez que esse elemento pode ter sido associado a outras classes com um grau de pertinência maior que zero, se \tilde{A}_i não for à primeira classe selecionada pelo algoritmo. Nota-se, portanto, a influência da ordem de seleção das pseudo-partições.

Passo 4: Como critério de parada, compare $P^{(t)}$ e $P^{(t+1)}$. Se $|P^{(t)} - P^{(t+1)}| < \varepsilon$, então pare; caso contrário, faça $t=t+1$ e retorne ao Passo 2. Neste teste, $|P^{(t)} - P^{(t+1)}|$ denota a distância entre $P^{(t+1)}$ e $P^{(t)}$, dada pela equação (47):

$$|P^{(t)} - P^{(t+1)}| = \max_{i \in N_c, k \in N_n} |\tilde{A}_i^{(t+1)}(x_k) - \tilde{A}_i^{(t)}(x_k)| \quad (47)$$

Essa fórmula verifica se a máxima diferença entre o grau de pertinência de qualquer elemento x_k em uma dada classe \tilde{A}_i na iteração atual e na iteração anterior é menor que o erro pré-definido ε (feito para todas as classes). Em caso positivo, cessa o algoritmo deve e retorna-se aos graus de pertinências da ultima interação de todos os elementos em todas as classes. Note que, quanto menor o valor, maior o número de passos e, conseqüentemente, mais refinada é a pseudo-partição final obtida. Ao final da última iteração do algoritmo, a pseudo-partição obtida deve ser analisada segundo algum critério que expresse a idéia geral de que as associações são fortes dentro do *cluster* e fracas entre eles.

A validação da qualidade do resultado da clusterização é realizada mediante o Índice de Desempenho, $J_m(P)$, dado em função dos centros de *cluster* e de “m” pela equação (48).

$$J_m = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^c [\tilde{A}_i(x_k)]^m \|x_k - v_i\|^2 \quad (48)$$

Este índice de desempenho mede, para todos os elementos, a soma das distâncias ponderadas de cada elemento em relação a cada um dos centros de *cluster* da pseudo-partição. Quanto menor o valor de $J_m(P)$, melhor a pseudopartição *fuzzy* P . Assim, o problema de clusterização pode ser equacionado como um problema de otimização.

6 OBJETIVOS

6.1 Objetivo Geral

Implementar um algoritmo de reconhecimento de padrão *fuzzy* para obter pseudo-partições e classificá-las quanto à biodisponibilidade do ferro. O modelo interage substâncias alimentares que atuam na absorção e inibição do ferro utilizando relações *fuzzy* determinadas com o auxílio do especialista, profissional de nutrição que trabalha na área de segurança alimentar, para o almoço e jantar.

6.2 Objetivos Específicos

Obter um modelo (algoritmo) de interação do ferro e cálcio para verificar a sensibilidade dessas pseudo-partições à ingestão do nutriente cálcio, principal inibidor no sistema de biodisponibilidade do ferro;

Simular e analisar as quantidades limítrofes de ingestão de cálcio, incrementadas nas dietas de indivíduos classificadas como média e alta biodisponibilidade, que não interfiram na biodisponibilidade do ferro.

7 METODOLOGIA

Os dados foram obtidos através de inquérito alimentar em estudo longitudinal de intervenção com crianças de 2 a 5 anos da única Creche Municipal de Paraty entre 2007 e 2008 (PEREIRA, 2009). O projeto foi aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa do COEP/UERJ, sob o número 004.3.2008, obedecendo às exigências da Resolução 196/96 do Conselho Nacional de Saúde (CNS, 1996) (Ver Anexo A).

Utilizou-se no estudo o consumo médio diário de três recordatórios de 24 horas do inquérito alimentar correspondente às quantidades declaradas de cada indivíduo em três refeições (almoço, jantar e ceia). As quantidades médias de cada substância alimentar marcadora que auxiliam a absorção de ferro (ferro e vitamina C); e das que o inibem (cálcio, oxalato, fitato, tanino, cafeína), foram obtidas através de medidas caseiras e posteriormente convertidas em gramaturas utilizando as seguintes tabelas: Tabela Brasileira de Composição de Alimentos / UNICAMP (NEPA, 2011), Tabela de Composição de Alimentos “Tucunduva” (PHILIPPI, 2012) e um estudo comparativo (BARRETO *et al.*, 2006).

Para reconhecer padrões na biodisponibilidade de ferro foram estabelecidas duas refeições: almoço e jantar (jantar e ceia), as variáveis (substâncias alimentares ingeridas) foram padronizadas (VIEIRA, 2004), convertidas em unidades do desvio-padrão, pois as variáveis não possuem a mesma unidade de medida.

Ainda, foi feita uma análise de *outliers* com o objetivo de eliminar observações atípicas que poderiam influenciar o reconhecimento de padrão. Para tanto utilizou-se a distância de Mahalanobis calculada através da matriz de correlação das substâncias alimentares consideradas importantes na biodisponibilidade do ferro que foram mensuradas para este estudo: ferro não-heme(mg), ferro heme(mg), vitamina A(mg), vitamina C(mg), cálcio(mg), fitato(mg), oxalato(mg), tanino(mg) e cafeína(mg) (MORRISON, 1976).

No critério de definição de *outliers* adotou-se a distância de Mahalanobis que é calculada em unidades de desvio-padrão a partir da média do grupo que permite ao analista atribuir uma probabilidade estatística para essa medida. Em teoria, amostras com uma distância de Mahalanobis igual a três ou mais, tem uma probabilidade de 0,01 ou menos e podem ser classificadas como não-membros do grupo. Assim os pacientes com distâncias superiores a quatro na refeição estudada foram considerados *outliers* (MAHALANOBIS, 1936).

Realizou-se uma ACP em cada refeição para definir as substâncias alimentares que seriam utilizadas no reconhecimento de padrão. Para tanto, foi imposto o critério de Kaiser que afere o número de fatores igual ao número de autovalores maiores do que 1 e a contribuição conjunta sendo superior a 70% de explicação da variabilidade dos fatores. As contribuições de cada nutriente será o critério utilizado para a seleção de variáveis, pois determinam uma porção relativa da variabilidade dos fatores.

As contribuições de cada nutriente em cada um dos fatores pode ser calculada através da matriz L. As colunas são ordenadas na ordem decrescente dos autovalores, $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_p$. Assim na matriz L a primeira coluna é a primeira componente principal e está associada ao maior autovalor e respectivo autovetor, a segunda coluna é a segunda componente e está associada ao segundo maior autovalor e respectivo autovetor e assim sucessivamente as demais colunas de L são adicionadas na ordem decrescente dos autovalores até a última coluna que é a p-ésima componente principal, associada ao menor autovalor (MINGOTI, 2005).

Então a matriz L com p fatores é dada por:

$$L = \left[\sqrt{\lambda_1} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{12} \\ \vdots \\ e_{1p} \end{pmatrix} \sqrt{\lambda_2} \begin{pmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ \vdots \\ e_{2p} \end{pmatrix} \dots \sqrt{\lambda_p} \begin{pmatrix} e_{p1} \\ e_{p2} \\ \vdots \\ e_{pp} \end{pmatrix} \right] \quad (40)$$

O algoritmo *Fuzzy C-means* (FCM), baseado no princípio de extensão *fuzzy* foi desenvolvido para agrupar os pacientes de acordo com a biodisponibilidade do ferro: baixa biodisponibilidade, média biodisponibilidade e alta biodisponibilidade.

Esse algoritmo, foi implementado pelo pacote E1071 do software R, tem como objetivo otimizar e agregar pseudopartições *fuzzy* através da matriz de pertinência. Portanto, quanto mais informativo for o sistema *fuzzy* melhor a matriz de pertinência e por conseqüência os resultados das Pseudopartições *fuzzy* melhoraram. O FCM corresponde ao algoritmo *K-means* com a fuzzificação inerente à lógica *fuzzy*.

Na busca pelo melhor desempenho do algoritmo, foi desenvolvido uma rotina onde o índice de fuzzificação (m) variava entre 1,25 a 3,00 (acrécimo de 0,25 a cada nova rotina) e o número de *clusters* (c) variando entre dois e três. Foi observado o valor da função objetivo para cada rotina e foi selecionada a que possuísse menor valor.

Através do FCM foram determinados a quantidade de grupos e os respectivos graus de pertinência para cada paciente.

Foi estabelecido processos de interação entre variáveis, onde na primeira etapa serão calculadas as pertinências conjuntas (FCM) das substâncias alimentares que auxiliam a absorção de ferro (vitamina C e ferro). Na segunda etapa serão calculadas as pertinências conjuntas incluindo no modelo, além de ferro e vitamina C, as substâncias alimentares inibidoras de ferro selecionadas pela Análise de Componentes Principais. Ainda, se a vitamina C não for uma das variáveis selecionadas o processo começará da segunda etapa.

O processo de interação entre as variáveis foi desenvolvido com o auxílio de especialistas na área de biodisponibilidade de nutrientes, visto a sensibilidade e conhecimento que possuem.

Ainda, na classificação dos grupos utilizou-se os limites de carne e vitamina C do algoritmo de Monsen (1978), mostrados no Quadro 1 na introdução deste trabalho e as equações determinadas pelo algoritmo de Hallberg (2000), que estimam a absorção de ferro para as substâncias alimentares: cálcio e fitato.

Para o cálcio:

Taxa de Absorção = $0.4081 + \{[0.6059 / (1 + 10^{-[2.022 - \log(\text{Ca} + 1)] * 2.919})]\}$, onde Ca é a quantidade de cálcio ingerido.

Para o fitato:

Logaritmo (Log) Taxa de Absorção (com / sem fitato) = $-0.30 \times \log(1 + \text{fitato-p})$, onde fitato-p é a quantidade de fitato ingerido.

Sendo o oxalato uma substância que interage com o ferro, diminuindo a sua biodisponibilidade (COZZOLINO, 2005), especialistas sugerem utilizá-lo com cautela quando associado às refeições que priorizem a absorção do ferro, pois não existem estudos em seres humanos que indiquem a quantidade de oxalato que interfere nesse processo.

Estudo realizado *in vitro* por Machado *et al.* (2006) com o objetivo de avaliar a disponibilidade do ferro em alimentos fonte deste e de vitamina A, ovo, cenoura e couve e verificar a interação do ferro com b-caroteno e com outros interferentes, mostraram que não houve interferência significativa dos fatores antinutricionais sobre o ferro dialisável, embora os taninos e ácido oxálico tenham atuado como fatores limitantes, quando observados os valores numéricos nas amostras com maiores concentrações de cenoura e couve.

Buscou-se avaliar quantidades limítrofes de cálcio na biodisponibilidade do ferro, ou seja, estimar um intervalo onde a ingestão de cálcio interferisse totalmente a interação ferro e

cálcio. Esta interferência foi avaliada através da ingestão de ferro absorvido estimado em cada rotina. Segundo Martins, indivíduos considerados com baixa biodisponibilidade absorvem 5%, intermediária 10% e alta 15% do ferro ingerido na refeição (MARTINS *et al.*, 1987). Assim, definiu-se um algoritmo que simulou as rotinas a seguir:

- 1) Executar o FCM com os dados padronizados da interação ferro x cálcio utilizando 3 classes (biodisponibilidade alta, média e baixa);
- 2) Incrementar a ingestão de cálcio nos pacientes classificados como biodisponibilidade alta e intermediária em 52,5mg, que representa a quantidade encontrada em meio copo de leite (50ml) (BARRETO *et al.*, 2006). Ainda, vale ressaltar que o valor 52,5mg foi adicionado após ser padronizado com os valores da média e do desvio-padrão dos indivíduos em cada uma das refeições (almoço e jantar);
- 3) Executar o FCM com as quantidades ingeridas de cálcio incrementada em cada rotina;
- 4) Realiza-se o teste não-paramétrico, Kruskal Wallis para as rotinas com 3 classes e Mann-Whitney para as rotinas com duas classes (HOLLANDER; WOLFE, 1973), para testar a hipótese de que as quantidades estimadas de ferro absorvido estão bem definidas nas classes, se sim realiza a próxima rotina com a mesma quantidade de classes, caso contrário repete o passo 2 e 3 com uma classe a menos;
- 5) Repetir essa rotina até somente uma classe estar bem definida;
- 6) Após duas rotinas se não houver alteração na classificação dos pacientes, a análise de sensibilidade é finalizada, pois indicaria valores de ingestão de cálcio irreais.
- 7) Análise dos resultados após a simulação;

Para a construção e utilização dos modelos foram utilizados os softwares R 2.12.2, EXCEL 2007 e Statistica 7.0.

8 RESULTADOS

As estatísticas básicas das substâncias alimentares encontram-se na Tabela 1 na qual pode-se destacar que as quantidades ingeridas de cálcio, vitamina C e oxalato apresentaram os maiores coeficientes de variação, 59%, 56% e 55%. No jantar as quantidades de cafeína e ferro não-heme foram as que apresentaram maior coeficiente de variação, 121% e 87% respectivamente.

Tabela 1 – Estatísticas básicas das componentes dietéticas da refeição.

Substâncias Alimentares	Almoço			Jantar		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina A	10,35	4,18	40%	119,35	46,39	39%
Vitamina C	60,10	31,50	56%	34,26	21,56	63%
Ferro	2,43	0,83	38%	2,74	1,86	68%
Ferro Heme	0,62	0,23	42%	0,54	0,47	87%
Ferro Não-Heme	1,81	0,61	37%	2,23	1,52	68%
Carne	25,79	8,28	36%	75,86	44,87	59%
Cálcio	45,67	26,83	59%	128,52	89,04	69%
Oxalato	120,73	65,23	55%	134,48	76,58	57%
Fitato	310,15	157,83	52%	334,88	126,96	38%
Tanino	39,48	8,77	23%	-	-	-
Cafeína	-	-	-	25,15	30,45	121%

Na Tabela 2 fica exposto os resultados das distâncias de Mahalanobis utilizadas neste trabalho para identificar crianças com perfil nutricional fora do padrão (*outliers*). Observa-se que para o almoço a criança 4 possui uma distância de Mahalanobis aproximadamente de 4,15, superior ao ponto de corte 4, sendo assim, considerado como *outliers* e retirado da análise. No jantar as crianças 3, 17 e 21 possuíam distancias de Mahalanobis iguais a 4,74, 4,44 e 4,73 respectivamente e, também, foram considerados *outliers*.

Tabela 2 – Distâncias de Mahalanobis das medidas ingeridas dos nutrientes que participam da biodisponibilidade do ferro nas refeições.

Crianças	Distância de Mahalanobis	
	Almoço	Jantar
1	1,43	1,69
2	2,53	1,76
3	2,16	4,74
4	4,15	2,59
5	3,11	1,62
6	1,94	3,52
7	2,48	1,99
8	1,67	1,37
9	2,56	2,55
10	2,25	1,65
11	0,82	3,08
12	1,78	2,71
13	3,34	2,66
14	1,47	1,57
15	1,88	1,59
16	2,93	1,90
17	1,35	4,44
18	2,44	1,75
19	2,79	2,42
20	3,84	1,15
21	2,67	4,73
22	2,15	2,08
23	1,74	1,47
24	1,58	1,70
25	2,67	1,81
26	2,02	1,41
27	2,05	2,51
28	1,37	1,89
29	2,91	1,55
30	1,63	1,52
31	2,47	2,33
32	3,14	1,73
33	1,92	1,68
34	2,95	2,71

Após a busca e eliminação de padrões alimentares discrepantes (*outliers*) foi realizada uma análise de componentes principais, em cada refeição, que auxiliou na determinação dos principais nutrientes para um modelo de interação com o ferro através de suas comunalidades, estes resultados encontram-se na Tabela 3.

Segundo a OMS os principais fatores de risco para a anemia ferropriva incluem baixa ingestão de ferro, baixa absorção de ferro a partir de dietas ricas em fitatos ou compostos fenólicos e períodos da vida em que as necessidades de ferro são especialmente altas, como na

infância (GARCIA *et al.*, 2011). As substâncias que apresentam maior fator antinutricional para o ferro são fitatos, ácido oxálico e cálcio e o principal fator que contribui melhorando a sua biodisponibilidade é a vitamina C (HALLBERG, 2002), e estão presentes nos alimentos que compõem as principais refeições, como almoço e jantar, de escolares.

O Modelo da ACP para o almoço foi determinado por 2 componentes e explica 71,5% da variabilidade de todo modelo. As substâncias alimentares que apresentaram maiores contribuições nos fatores 1 foram: ferro, 0,23 ; fitato, 0,22 e oxalato, 0,21 e no fator 2 foi a vitamina C, 0,32 (Tabela3). Apenas a vitamina C foi selecionada no fator 2 pois o fator 1 é o que mais contribui para a variabilidade do modelo e portanto foi selecionado um maior número de substâncias alimentares desse fator.

Tabela 3 – Contribuições das substâncias alimentares nos dois primeiros fatores da ACP no almoço.

Substâncias Alimentares	Fator 1	Fator 2
Ferro	0,23	0,02
Fitato	0,22	0,08
Oxalato	0,21	0,10
Vitamina C	0,12	0,32
Tanino	0,14	0,27
Cálcio	0,07	0,12
Vitamina A	0,01	0,10

No Jantar a ACP foi modelada por 3 componentes com 80,4% de explicação, as substâncias alimentares que apresentaram maiores contribuições nos fatores 1 foram: ferro, 0,24 e cálcio, 0,17, no fator 2 foi o fitato, 0,33 e no fator 3 foi a vitamina C, 0,78 (Tabela4). Apenas o fitato foi selecionado do fator 2 e a vitamina C do fator 3. As demais substâncias alimentares pelo fator 1, pois de forma análoga a ACP realizada no almoço, este fator foi o que mais contribuiu para o modelo.

Tabela 4 – Contribuições das substâncias alimentares nos três primeiros fatores da ACP no jantar.

Substâncias Alimentares	Fator 1	Fator 2	Fator 3
Ferro	0,24	0,00	0,09
Cálcio	0,17	0,13	0,00
Oxalato	0,16	0,28	0,01
Cafeína	0,16	0,13	0,05
Vitamina A	0,14	0,12	0,05
Fitato	0,13	0,33	0,01
Vitamina C	0,00	0,01	0,78

Assim, o reconhecimento de padrão na biodisponibilidade do ferro será analisado no almoço por: ferro, vitamina C, fitato e oxalato, e no jantar esta será feita por: ferro, vitamina C, fitato e cálcio. Deve-se considerar que a mudança do oxalato pelo cálcio no jantar pode ter sido ocasionada por uma ingestão maior de alimentos que contenham este micronutriente. Isso se explica, pois de acordo com o Ministério da Saúde (2004) e *American Academy of Pediatrics* (2006), as crianças até 5 anos possuem hábitos de consumir leite enriquecido à noite, durante e após o jantar ou substituir esta refeição por lanches que incluem leite e derivados, o que aumenta a interação entre este nutriente e o ferro, contribuindo com o fator antinutricional ligado ao ferro.

8.1 Classificação dos Grupos

Na classificação dos grupos foram feitas diversas interações do algoritmo *Fuzzy C-means* (FCM). Assim, será mais adequado apresentá-los por refeição.

8.1.1 Almoço

Na refeição almoço, os parâmetros utilizados nas interações do algoritmo FCM corresponderam ao índice de fuzzificação de 2.5 com três *clusters*.

Após a realização da interação ferro não heme e vitamina C no FCM, obteve-se três grupos de crianças. A análise das estatísticas básicas em conjunto com a classificação de Monsen (Tabela 5) pode-se definir o cluster 1 como o de baixa biodisponibilidade, pois obteve um consumo baixo de vitamina C apesar de um consumo médio de carne; as crianças do cluster 2 definido como média biodisponibilidade, possuem um consumo de vitamina C 5 vezes superior ao cluster 1 apesar das quantidades de ferro não-heme e carne serem um pouco inferior ao cluster 1 e o cluster 3, alta biodisponibilidade, por possuir um consumo elevado de vitamina C e de carne.

Tabela 5 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne e vitamina C

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	13,88	5,11	37%	65,22	10,55	16%	99,74	12,45	12%
Ferro Não-Heme	1,79	0,45	25%	1,53	0,31	21%	2,55	0,79	31%
Carne	24,61	5,40	22%	21,83	5,08	23%	37,30	7,40	20%

O ácido ascórbico, quando ingerido juntamente com o ferro não-heme, potencializa sua absorção, mantendo-o na forma de quelato solúvel no intestino delgado. A absorção do ferro aumenta de 3,7% para 10,4% em refeições com pão, ovo e chá quando se adiciona de 40 a 50 mg de ácido ascórbico (MOURA; CANNIATTI-BRAZACA, 2006). O que justifica a classificação dos grupos e reforça a maior biodisponibilidade de ferro quando a quantidade de vitamina C está aumentada.

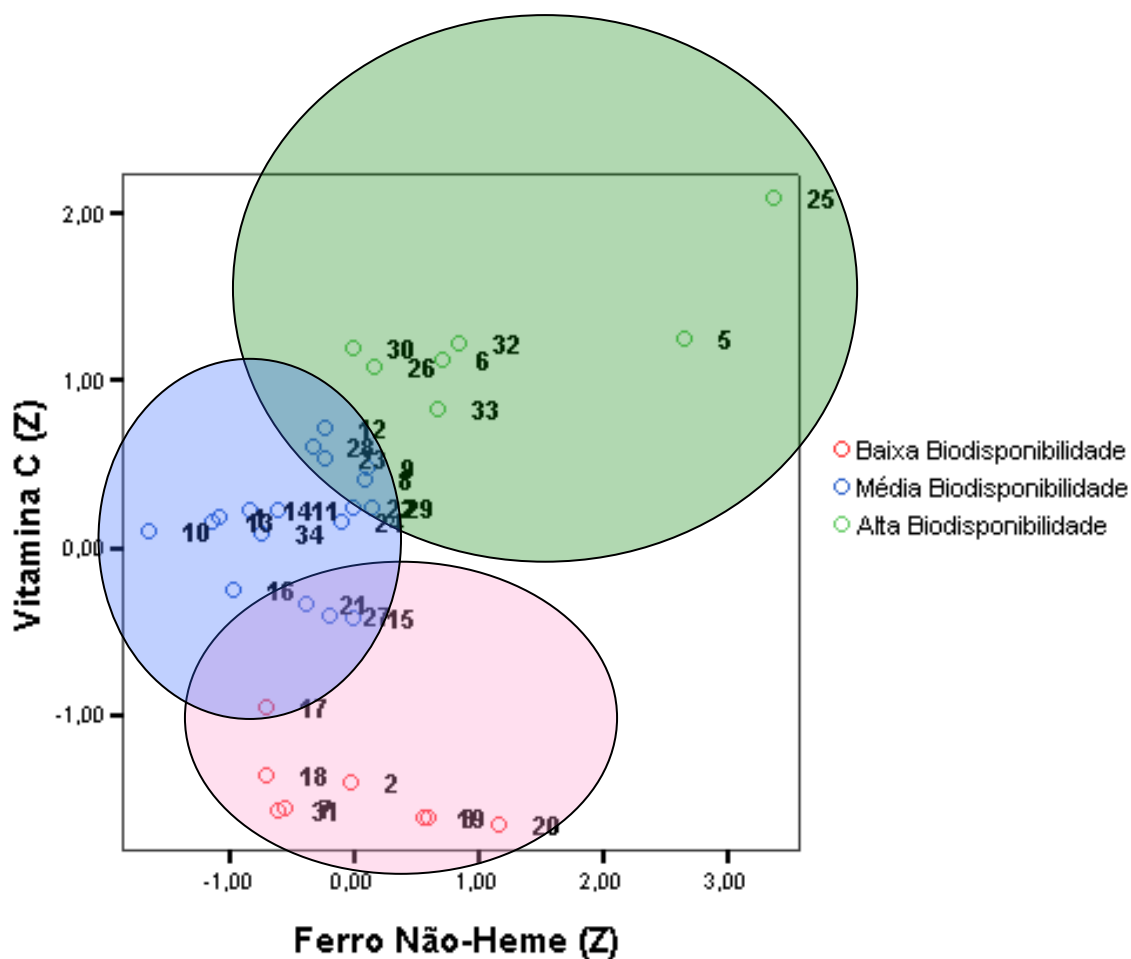


Gráfico 1 – Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme e vitamina C.

Segundo Aranha (2000), a presença da vitamina C nas refeições aumenta a absorção do ferro mesmo em presença de alimentos que contenham fatores inibidores como fitato e oxalato, porém vai depender da quantidade destes fatores na alimentação.

A inclusão do oxalato, inibidor do ferro não-heme, no modelo de interação entre o ferro não-heme e vitamina C, determinou três novos grupos (Tabela 6). Estes grupos foram especificados como baixa biodisponibilidade devido ao alto consumo de oxalato e baixo consumo de carne apesar de um consumo razoável de vitamina C; média biodisponibilidade por possuírem crianças com ingestão elevada de carne e ferro não-heme apesar de uma baixa ingestão de vitamina C e o grupo de alta biodisponibilidade onde o consumo de ferro não-heme, carne e vitamina C foram elevados e baixo consumo de oxalato.

Tabela 6 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e oxalato.

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	55,02	16,80	31%	19,72	8,00	41%	87,15	16,02	18%
Ferro Não-Heme	1,31	0,25	19%	1,88	0,38	20%	2,16	0,68	31%
Carne	17,69	2,22	13%	26,18	3,91	15%	31,92	7,79	24%
Oxalato	190,89	54,07	28%	94,95	31,57	33%	80,35	25,31	32%

Foi possível observar (Tabela 6 e Gráfico 2), que no grupo que tinha alto consumo de vitamina C, a inclusão de oxalato, não alterou a biodisponibilidade de ferro, o que reforça a importância da ingestão de fontes de vitamina C associado ao consumo de ferro não-heme.

O oxalato possui alguns fatores intraluminais que afetam negativamente a quantidade de ferro disponível para absorção através da formação de precipitados, quelatos insolúveis ou macromoléculas (MOURA; CANNIATTI-BRAZACA, 2006).

Analisando o Gráfico 1 em conjunto com o Gráfico 2, percebe-se que a inclusão do oxalato na interação entre o ferro não-heme e a vitamina C, resultou no significativo aumento da quantidade de crianças classificadas como alta biodisponibilidade. Sendo o oxalato uma substância que interage com o ferro, diminuindo a sua biodisponibilidade (COZZOLINO, 2005), especialistas sugerem utilizá-lo com cautela quando associado às refeições que priorizem a absorção do ferro, pois não existem estudos que indiquem a quantidade de oxalato que interfere nesse processo. A vitamina C nessa interação serve com um potente estimulador do ferro.

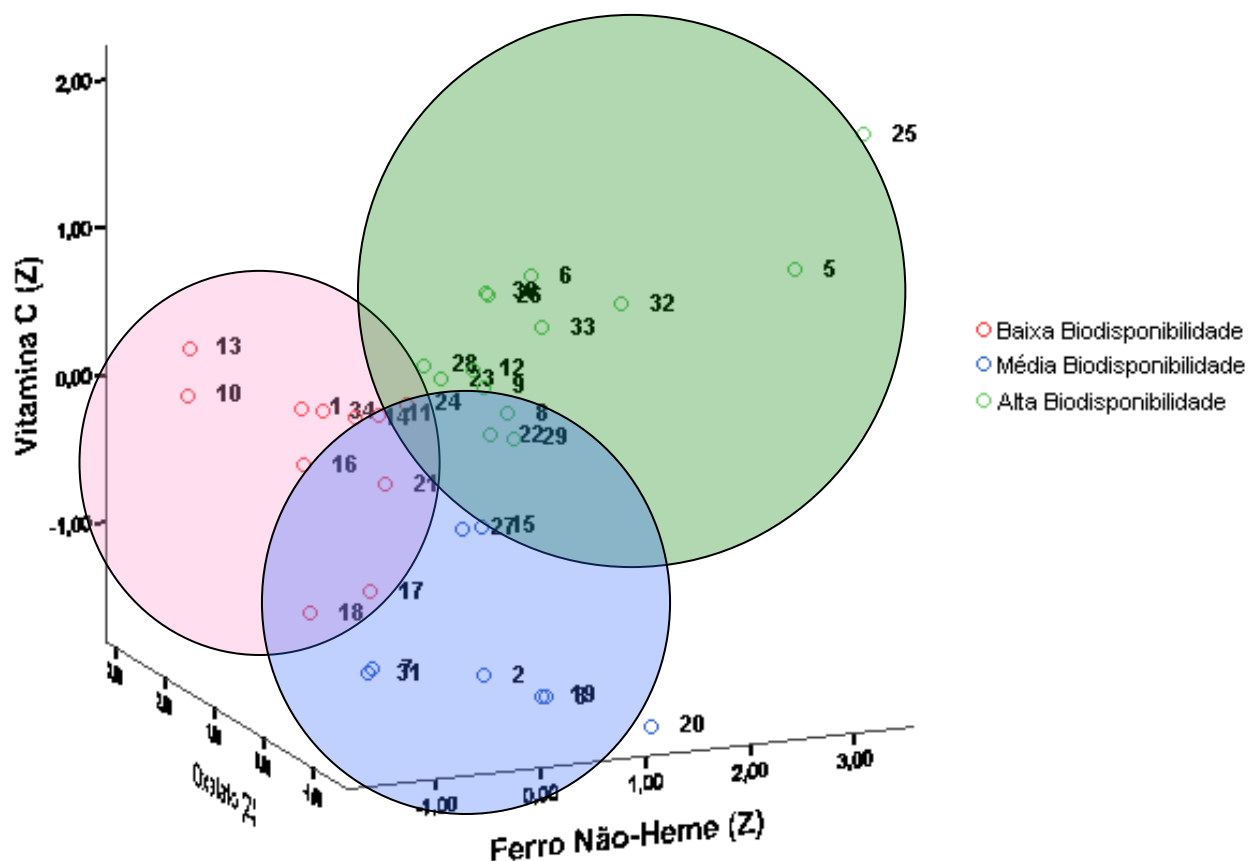


Gráfico 2 – Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e oxalato.

Além do ferro não-heme, vitamina C e oxalato, o fitato também foi uma substância alimentar selecionada pela ACP, e portanto foi realizada um FCM entre ferro não-heme, vitamina C e fitato para verificar o efeito nos grupos deste inibidor. As estatísticas básicas encontradas na Tabela 7 ajudaram a esclarecer nova classificação dos grupos aninhada à classificação de Monsen e dos resultados encontrados pelo algoritmo de Hallberg. O fitato é um componente anti-nutricional na absorção do ferro e no almoço é tem sua principal importância, uma vez que é encontrado em grãos e sementes como o feijão, amplamente consumidos nesta refeição. Assim os grupos foram definidos: baixa biodisponibilidade devido ao consumo elevado de fitato, baixo de carne e razoável de vitamina C; média biodisponibilidade, as crianças desse grupo possuem um consumo superior de carne e vitamina C e relativamente baixo de fitato em relação às crianças do grupo de baixa biodisponibilidade e finalmente, alta biodisponibilidade por apresentar um alto consumo de vitamina C, ferro não heme e carne, que são favoráveis a biodisponibilidade e um consumo reduzido de fitato em relação aos demais grupos.

De acordo com Cozzolino (2005), existe diminuição na biodisponibilidade de ferro não-heme, quando este interage com fitato. Harland e Oberlees (1987) e Hallberg (2000), verificaram que para 100mg de fitato absorvido, ocorre uma diminuição de 25% na absorção do ferro. Estes dados comprovam a diminuição na disponibilidade do ferro não-heme, porém quanto mais alta a oferta de vitamina C, menor é a interferência do fitato na biodisponibilidade de ferro não-heme (HALLBERG, 2000).

Tabela 7 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e fitato

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	45,90	17,39	38%	65,59	28,01	43%	112,85	18,69	17%
Ferro Não-Heme	1,37	0,26	19%	1,96	0,27	14%	3,66	0,32	9%
Carne	19,00	3,31	17%	29,24	5,79	20%	43,97	2,31	5%
Fitato	448,09	139,79	31%	221,03	57,77	26%	102,11	39,26	38%

Analisando o Gráfico 1 em conjunto com o Gráfico 3, percebe-se que a inclusão do fitato na interação entre o ferro não-heme e a vitamina C, resultou no aumento de crianças classificadas como baixa biodisponibilidade e uma redução de crianças no grupo de alta biodisponibilidade, em ambos os gráficos o agrupamento média biodisponibilidade se manteve com 17 crianças.

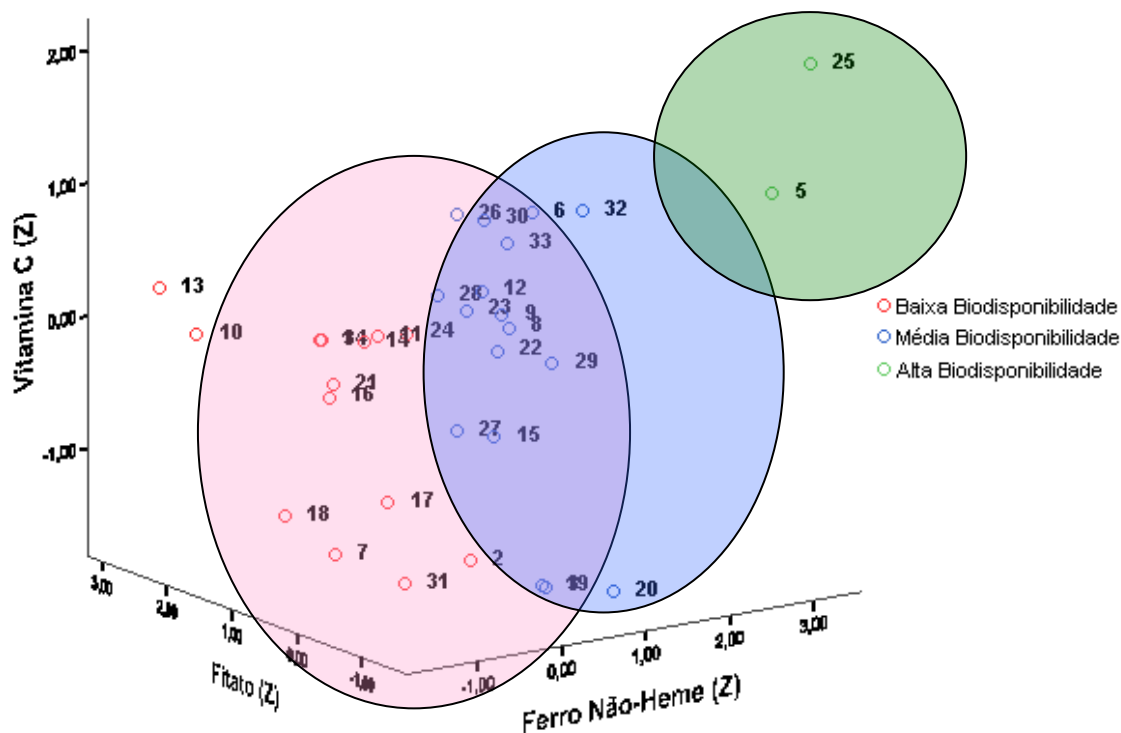


Gráfico 3 – Agrupamento de pacientes na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e fitato.

A Tabela 8 apresenta a avaliação da biodisponibilidade de ferro não-heme em conjunto com a vitamina C, e foi observado que 8 crianças consumiram refeições classificadas como de baixa biodisponibilidade, 18 em média biodisponibilidade, e 7 encontravam-se em alta biodisponibilidade. O que mostra mais uma vez que a adição de alimentos fontes de vitamina C em refeições que priorizem a absorção de ferro não-heme, vai otimizar esta biodisponibilidade.

Podemos visualizar o efeito antinutricional do oxalato na Tabela 8, que ao ser adicionado na interação do ferro não-heme e vitamina C, induziu uma diminuição da biodisponibilidade do ferro na refeição de 9 crianças, que migraram do grupo de média para o de baixa biodisponibilidade.

Quando adicionado fitato na interação do ferro não-heme e vitamina C (Tabela 8), foi verificado que 14 crianças migraram de classificação, diminuindo a biodisponibilidade do ferro. Destes, 5 crianças migraram de alta biodisponibilidade para média, e 9 saíram de média para baixa biodisponibilidade. O que confirma os dados apontados na literatura onde mostram que a associação do fitato com o ferro não-heme forma precipitados insolúveis que dificultam sua absorção (FANTINI *et al.*, 2008).

Tabela 8 – Pertinência conjunta para cada criança nas classes quanto à biodisponibilidade do ferro definidas para cada interação das substâncias alimentares selecionadas na análise de componentes principais do almoço.

Crianças	Ferro Não-Heme x Vitamina C			Ferro Não-Heme x Vitamina C x Fitato			Ferro Não-Heme x Vitamina C x Oxalato		
	Baixa	Média	Alta	Baixa	Média	Alta	Baixa	Média	Alta
1	0,18	0,68	0,14	0,68	0,25	0,07	0,79	0,09	0,12
2	0,96	0,02	0,01	0,44	0,41	0,14	0,10	0,80	0,10
3	0,70	0,18	0,13	0,36	0,43	0,21	0,10	0,79	0,11
5	0,20	0,25	0,55	0,04	0,06	0,91	0,23	0,31	0,46
6	0,02	0,05	0,93	0,20	0,55	0,25	0,18	0,15	0,66
7	0,78	0,15	0,07	0,65	0,24	0,10	0,38	0,43	0,18
8	0,13	0,60	0,27	0,08	0,87	0,05	0,11	0,15	0,74
9	0,13	0,57	0,31	0,07	0,89	0,04	0,10	0,09	0,81
10	0,27	0,54	0,19	0,62	0,27	0,12	0,61	0,19	0,20
11	0,05	0,90	0,05	0,56	0,37	0,07	0,57	0,16	0,26
12	0,11	0,65	0,24	0,14	0,76	0,09	0,14	0,14	0,72
13	0,19	0,66	0,15	0,54	0,30	0,17	0,53	0,23	0,24
14	0,12	0,78	0,10	0,56	0,37	0,08	0,60	0,16	0,24
15	0,37	0,47	0,16	0,24	0,66	0,10	0,20	0,49	0,31
16	0,25	0,61	0,13	0,84	0,13	0,03	0,86	0,07	0,07
17	0,60	0,29	0,11	0,61	0,31	0,08	0,45	0,36	0,19
18	0,72	0,19	0,09	0,66	0,23	0,11	0,53	0,28	0,19
19	0,70	0,17	0,12	0,37	0,43	0,20	0,10	0,79	0,11
20	0,56	0,24	0,21	0,32	0,41	0,27	0,18	0,58	0,24
21	0,27	0,61	0,12	0,78	0,16	0,06	0,70	0,16	0,14
22	0,12	0,71	0,17	0,07	0,90	0,04	0,14	0,19	0,66
23	0,09	0,76	0,16	0,10	0,85	0,05	0,22	0,15	0,63
24	0,10	0,77	0,12	0,53	0,39	0,08	0,62	0,16	0,22
25	0,23	0,28	0,50	0,11	0,16	0,73	0,26	0,30	0,43
26	0,11	0,33	0,57	0,26	0,58	0,16	0,12	0,09	0,79
27	0,34	0,52	0,14	0,31	0,60	0,08	0,22	0,46	0,32
28	0,09	0,75	0,16	0,19	0,73	0,07	0,29	0,16	0,55
29	0,15	0,59	0,26	0,18	0,66	0,16	0,13	0,20	0,67
30	0,12	0,38	0,50	0,20	0,64	0,16	0,13	0,11	0,75
31	0,76	0,16	0,08	0,53	0,34	0,12	0,38	0,43	0,19
32	0,02	0,05	0,93	0,17	0,47	0,36	0,18	0,23	0,60
33	0,05	0,12	0,83	0,23	0,57	0,20	0,11	0,11	0,78
34	0,11	0,81	0,08	0,77	0,17	0,05	0,87	0,06	0,07

Foi possível observar (Tabela 8), que o oxalato teve menor impacto na biodisponibilidade de ferro de algumas crianças, pois ao comparar suas pertinências, verificou-se que o oxalato não alterou a biodisponibilidade de ferro não-heme, ao contrário do

fitato que aumentou consideravelmente as pertinências nos grupos de baixa e média biodisponibilidade.

Deste modo é possível avaliar qual criança precisa de maior suplementação de vitamina C ou redução de alimentos que contenham fitato ou oxalato nas refeições que são fonte de ferro, minimizando assim o risco de desenvolver anemias por esta carência.

8.1.2 Jantar

É essencial melhorar a biodisponibilidade do ferro mediante maior consumo de ferro total da dieta (carnes e feijão) e de vitamina C (frutas e hortaliças) desde o início da alimentação complementar, evitando-se a ingestão de alimentos ricos em compostos inibidores da absorção do ferro (café, chá, espessantes e leite de vaca). Com o aumento da idade da criança, o consumo de mingau deve ser gradualmente substituído, incentivando-se consumo de alimentos disponíveis para a família. (GARCIA *et al.*, 2011).

Na refeição jantar, os parâmetros utilizados nas interações do algoritmo FCM corresponderam ao índice de fuzzificação de 2.5 com três *clusters*.

A interação ferro heme e cálcio no FCM resultou em três grupos de classificação (Gráfico 4), baixa, média e alta biodisponibilidade, sendo que a análise descritiva realizada pelas estatísticas básicas (Tabela 9), indica que o cluster 1 corresponde a baixa biodisponibilidade, pois obteve um consumo médio elevado de cálcio (232,49mg), próximo ao limite de inibição total de ferro (>300mg). O cluster 2, média biodisponibilidade, apresentou um consumo médio de cálcio quatro vezes menor do que no cluster 1, porém o consumo médio de ferro foi quatro vezes menor do que o cluster 3, classificado como alta biodisponibilidade.

Tabela 9 – Estatísticas básicas da interação ferro heme e cálcio.

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Cálcio	232,49	42,72	18%	57,30	49,29	86%	97,26	59,07	61%
Ferro Não-Heme	0,33	0,18	56%	0,20	0,11	57%	0,88	0,29	33%

De acordo com Hallberg não se observa inibição do ferro quando a quantidade de cálcio numa refeição é menor do que 50mg, a inibição total do ferro ocorre com a ingestão de cálcio em quantidades superiores a 300mg (HALLBERG; HULTHÉN, 2000).

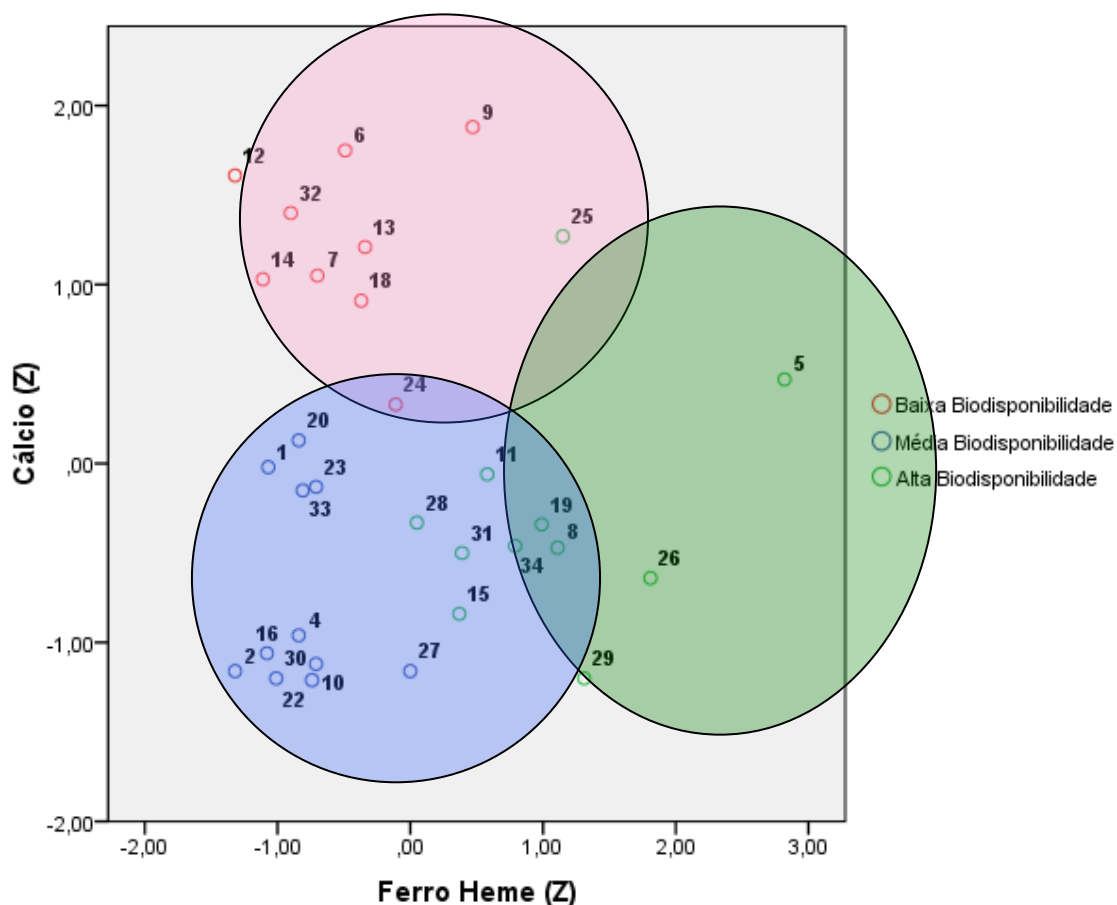


Gráfico 4 – Agrupamento de crianças na interação entre o ferro heme e cálcio.

De acordo com a classificação de Monsen, pode-se observar na interação ferro não-heme e vitamina C (Tabela 10 e Gráfico 5) que o grupo classificado como baixa biodisponibilidade apresentou um consumo médio de vitamina C próximo a 25mg, enquanto o grupo média biodisponibilidade possui consumo médio deste nutriente em torno de 25mg com consumo médio de carne no intervalo de 30 a 90g, o cluster classificado como alta biodisponibilidade possui consumo médio de vitamina C e de carne superior a 75mg e 90g, respectivamente. Dessa forma a classificação dos três grupos está respeitando os critérios da classificação de Monsen.

Tabela 10 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne e vitamina C.

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	24,02	5,81	24%	25,38	6,09	24%	78,48	1,78	2%
Ferro Não-Heme	1,12	0,34	30%	2,81	0,58	21%	1,85	0,82	45%
Carne	66,73	45,68	68%	65,42	36,35	56%	105,63	31,38	30%

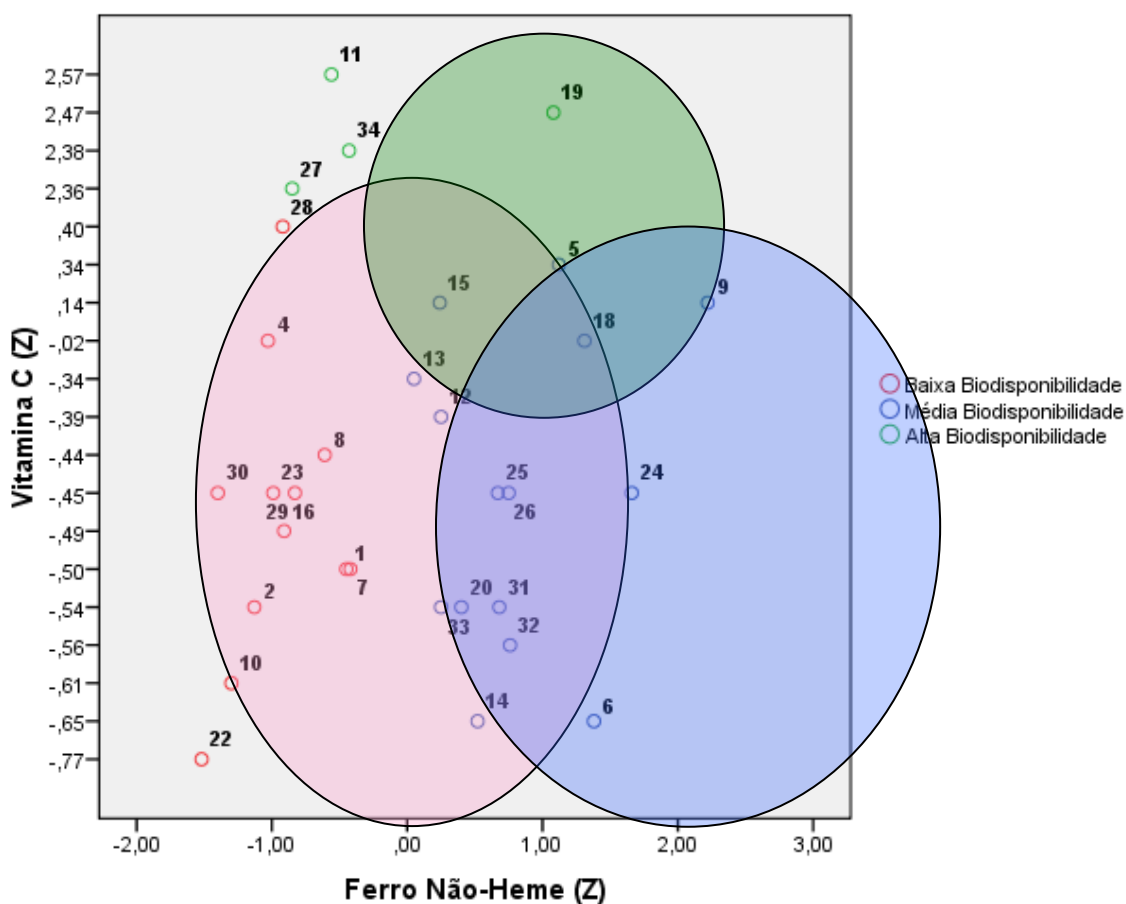


Gráfico 5 – Agrupamento de pacientes na interação entre o ferro não-heme e vitamina C.

Na interação ferro não-heme, vitamina C e fitato (Tabela 11 e Gráfico 6), a quantidade ingerida de vitamina C dos grupos não foi decisiva para classificá-los quanto a biodisponibilidade do ferro. Ao utilizar a equação de Hallberg que estima a absorção de ferro em relação a quantidade ingerida de fitato, verificou-se que a absorção média de ferro não-heme dos três grupos eram de 1,01mg, 2,02mg e 2,38mg para baixa, média e alta biodisponibilidade, respectivamente.

Tabela 11 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e fitato.

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	37,04	24,16	65%	30,06	18,35	61%	25,09	5,02	20%
Ferro Não-Heme	1,25	0,45	36%	2,39	0,92	38%	2,85	0,63	22%
Carne	75,54	46,22	61%	57,94	33,22	57%	80,54	40,70	51%
Fitato	236,16	62,46	26%	447,77	25,78	6%	314,96	30,87	10%

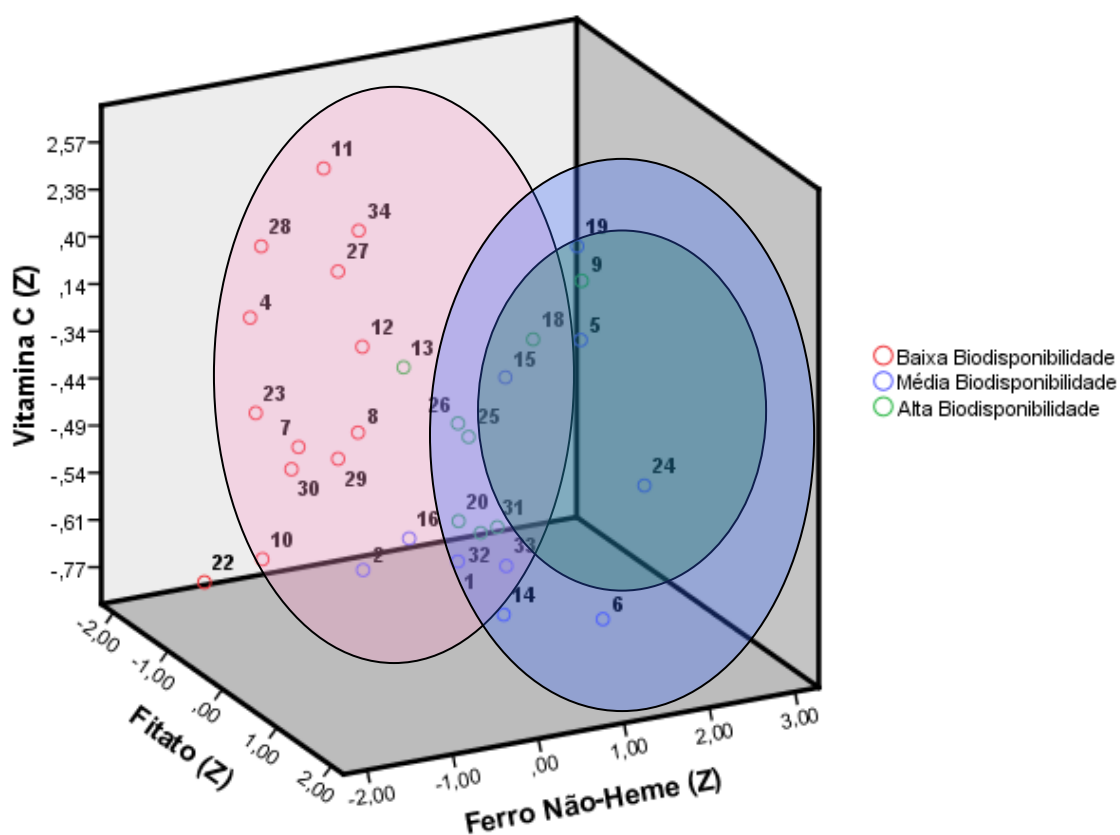


Gráfico 6 – Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e fitato.

Quando se inclui o cálcio na interação ferro não-heme e vitamina C (Tabela 12 e Gráfico 7), o grupo baixa biodisponibilidade é o que possui a maior ingestão média de ferro não-heme (2,77mg), com uma quantidade elevada de cálcio (200,88mg), o grupo de média biodisponibilidade apresentou uma alta ingestão de vitamina C (78,48mg) e uma ingestão média de cálcio bem mais baixa que a o grupo de baixa biodisponibilidade, mas promove interferência na absorção do ferro não-heme, e o grupo classificado como alta biodisponibilidade, apesar de possuir a menor ingestão média de ferro não-heme, observa-se

uma ingestão média de cálcio (51,53mg) que praticamente não interfere na absorção do ferro não-heme (HALLBERG; HULTHÉN, 2000).

Tabela 12 – Estatísticas básicas da interação ferro não-heme, carne, vitamina C e cálcio.

Substâncias Alimentares	Baixa Biodisponibilidade			Média Biodisponibilidade			Alta Biodisponibilidade		
	Média	DP	CV	Média	DP	CV	Média	DP	CV
Vitamina C	24,68	5,8	24%	78,48	1,78	2%	24,88	6,23	25%
Ferro Não-Heme	2,77	0,67	24%	1,85	0,82	45%	1,29	0,62	48%
Carne	59,56	35,57	60%	105,63	31,38	30%	72,96	44,47	61%
Cálcio	200,88	64,52	32%	77,58	41,55	54%	51,53	38,26	74%

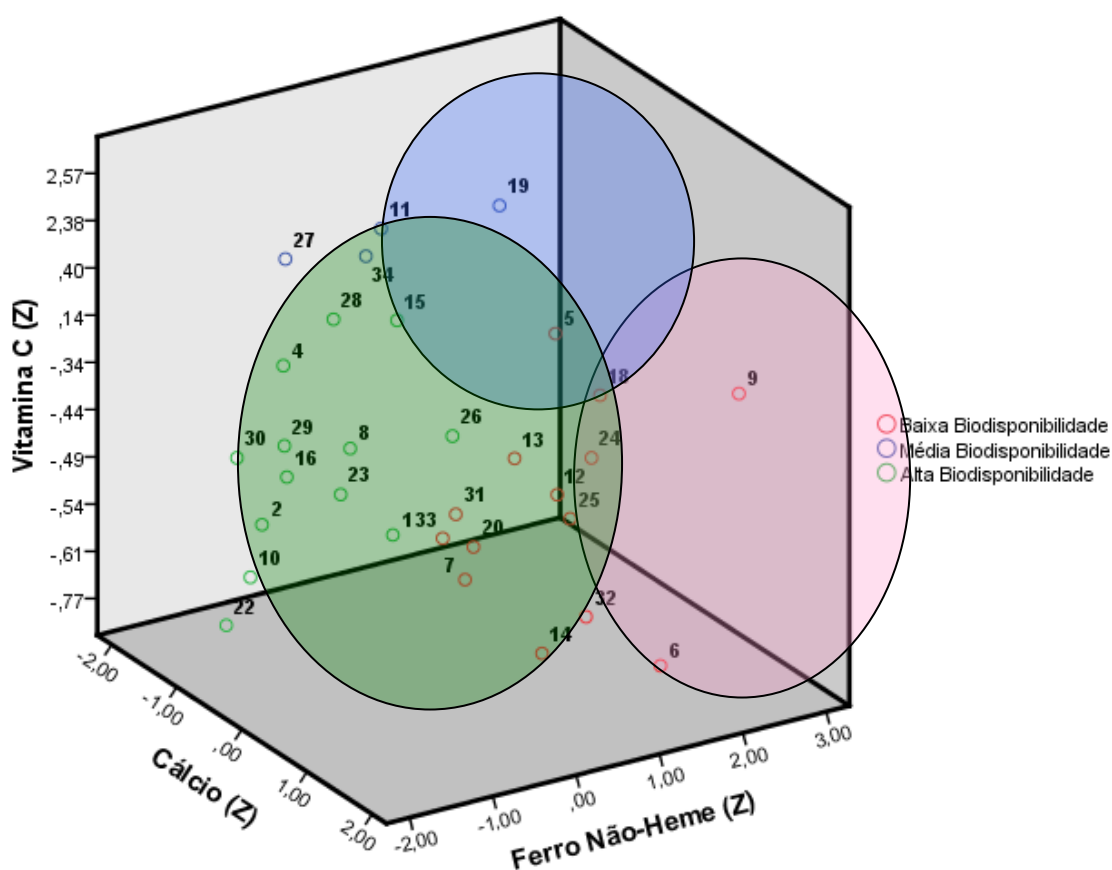


Gráfico 7 – Agrupamento de crianças na interação entre o ferro não-heme, vitamina C e cálcio.

Foi possível observar (Tabela 13), que ao acrescentarmos o fitato na interação ferro não-heme e vitamina C, as crianças 11, 12, 19, 27 e 34 migraram para uma classificação hierárquica menor quanto a biodisponibilidade do ferro. Ao incluir o cálcio na interação ferro não-heme e vitamina C, as crianças 5, 6, 9, 11, 12, 13, 14, 18, 19, 20, 24, 25, 27, 31, 32, 33 e

34 migraram para a classe baixa biodisponibilidade do ferro, uma vez que seus graus de pertinência aumentaram em relação à classificação de baixa biodisponibilidade na interação ferro não-heme e vitamina C. Logo podemos concluir que o fitato teve menor impacto na biodisponibilidade do ferro não-heme em relação ao cálcio.

Tabela 13 – Pertinência conjunta para cada criança nas classes quanto à biodisponibilidade do ferro definidas para cada interação das substâncias alimentares selecionadas na análise de componentes principais do jantar.

Paciente	Ferro Heme x Cálcio			Ferro Não-Heme x Vitamina C			Ferro Não-Heme x Vitamina C x Fitato			Ferro Não-Heme x Vitamina C x Cálcio		
	Baixa	Média	Alta	Baixa	Média	Alta	Baixa	Média	Alta	Baixa	Média	Alta
1	0,32	0,50	0,17	0,73	0,20	0,07	0,17	0,55	0,28	0,28	0,14	0,58
2	0,11	0,77	0,11	0,91	0,06	0,03	0,30	0,39	0,31	0,07	0,06	0,87
4	0,01	0,98	0,01	0,81	0,11	0,08	0,83	0,07	0,10	0,07	0,08	0,84
5	0,26	0,22	0,52	0,18	0,68	0,14	0,11	0,57	0,32	0,64	0,18	0,18
6	0,79	0,10	0,11	0,14	0,78	0,08	0,14	0,46	0,40	0,74	0,12	0,14
7	0,93	0,04	0,03	0,71	0,22	0,07	0,67	0,13	0,20	0,56	0,15	0,29
8	0,03	0,04	0,93	0,84	0,11	0,04	0,42	0,25	0,33	0,11	0,08	0,81
9	0,58	0,17	0,25	0,22	0,58	0,20	0,22	0,32	0,47	0,61	0,20	0,19
10	0,04	0,90	0,06	0,84	0,10	0,06	0,71	0,13	0,16	0,09	0,08	0,83
11	0,14	0,15	0,71	0,03	0,03	0,94	0,38	0,31	0,31	0,07	0,84	0,09
12	0,70	0,17	0,13	0,24	0,68	0,07	0,46	0,19	0,35	0,75	0,11	0,14
13	0,91	0,04	0,05	0,37	0,54	0,09	0,25	0,21	0,54	0,73	0,11	0,16
14	0,75	0,14	0,10	0,13	0,82	0,05	0,10	0,47	0,43	0,88	0,05	0,07
15	0,13	0,30	0,57	0,29	0,58	0,13	0,05	0,82	0,13	0,26	0,23	0,50
16	0,06	0,87	0,07	0,98	0,01	0,01	0,23	0,47	0,30	0,04	0,03	0,93
18	0,84	0,08	0,08	0,14	0,76	0,10	0,12	0,28	0,59	0,79	0,10	0,11
19	0,01	0,01	0,98	0,18	0,24	0,58	0,24	0,42	0,34	0,21	0,61	0,18
20	0,40	0,41	0,19	0,17	0,78	0,06	0,08	0,17	0,75	0,57	0,13	0,30
22	0,06	0,87	0,08	0,76	0,15	0,09	0,67	0,15	0,18	0,12	0,12	0,76
23	0,27	0,53	0,19	0,98	0,01	0,01	0,80	0,08	0,11	0,17	0,12	0,71
24	0,44	0,26	0,30	0,17	0,72	0,11	0,15	0,47	0,38	0,65	0,15	0,20
25	0,40	0,19	0,41	0,03	0,95	0,01	0,07	0,11	0,82	0,92	0,03	0,04
26	0,14	0,16	0,70	0,01	0,98	0,01	0,15	0,18	0,67	0,40	0,19	0,41
27	0,13	0,54	0,33	0,07	0,06	0,87	0,36	0,34	0,31	0,11	0,73	0,17
28	0,20	0,36	0,43	0,61	0,20	0,18	0,75	0,11	0,14	0,18	0,23	0,59
29	0,13	0,20	0,67	0,97	0,02	0,01	0,49	0,23	0,28	0,06	0,06	0,88
30	0,07	0,86	0,08	0,82	0,11	0,07	0,53	0,23	0,24	0,10	0,10	0,80
31	0,13	0,23	0,65	0,05	0,93	0,02	0,08	0,26	0,66	0,42	0,18	0,40
32	0,84	0,08	0,07	0,04	0,94	0,02	0,08	0,15	0,77	0,88	0,05	0,07
33	0,26	0,56	0,18	0,25	0,68	0,07	0,10	0,63	0,27	0,43	0,15	0,42
34	0,03	0,05	0,92	0,00	0,00	1,00	0,36	0,33	0,32	0,02	0,95	0,03

Na interação ferro heme e cálcio, ao analisar o grupo de baixa biodisponibilidade de ferro, notou-se que as crianças 6, 7, 12, 13, 14, 18 e 32 possuem graus de pertinência elevados, sendo esses os casos mais críticos dessa interação.

O impacto do cálcio no jantar provavelmente está relacionado com o padrão alimentar de crianças nesta faixa etária, onde o jantar costuma ser seguido por mamadeiras de leites enriquecidos com farinhas ou ainda, as mães ofertarem sobremesas como pudins e iogurtes. Uma vez que o cálcio pode inibir totalmente a absorção do ferro, recomenda-se a redução do consumo de alimentos lácteos durante as grandes refeições, principalmente para aqueles indivíduos que consomem muitos alimentos lácteos, como as crianças e especialmente os lactentes.

8.2 Análise de Sensibilidade

A Análise de Sensibilidade, como descrito na metodologia, avalia quantidades de cálcio necessária para a interferência completa na biodisponibilidade do ferro, assim foi estipulada uma quantidade de 52,5mg (50ml de leite) nos pacientes que apresentaram alta biodisponibilidade e média biodisponibilidade em cada uma das refeições.

8.2.1 Almoço

Na Tabela 15 pode-se observar o efeito que o acréscimo da quantidade definida de cálcio possui na biodisponibilidade do ferro para o almoço. Foi necessário a realização de duas iterações: Na primeira, foi adicionado 52,5mg de cálcio na refeição das crianças classificadas como média e alta biodisponibilidade, quando da análise gerada pelo FCM com os dados originais da interação ferro e cálcio. Após este acréscimo foi aplicada uma nova rotina do FCM que discriminou três novos grupos. Os resultados do teste estatístico de Kruskal-Wallis mostraram a estatística teste igual a 5,53 com p-valor igual a 0,06, o que indicam não haver evidências estatísticas para as quantidades de ferro absorvido entre os três grupos serem diferentes ao nível de significância de 5%.

Devido a esses resultados pode-se concluir que os grupos de média e alta biodisponibilidade não possuem diferenças relevantes quanto ao ferro absorvido, pois ao realizar do teste estatístico de Mann-Whitney dois a dois, verifica-se que apenas o teste

realizado entre média e alta biodisponibilidade não foi significativo ao nível de significância de 5%, portanto podem ser classificados no mesmo grupo (Tabela 14).

Tabela 14 – Teste 2 a 2 de Mann-Whitney entre as classificações após a primeira iteração no almoço.

Testes 2 a 2	Estatística Teste	p-valor
Baixa x Média	0	0,030
Baixa x Alta	0	0,007
Média x Alta	93	0,814

Na segunda iteração foi adicionado 52,5mg de cálcio nas refeições das crianças classificadas como média biodisponibilidade e realizada uma nova rotina no FCM adotando-se apenas dois grupos e resultou que as crianças foram divididos nesses dois grupos. Calculado o teste estatístico de Mann-Whitney para as duas amostras independentes, obteve-se como resultado: estatística teste igual a 122 e p-valor igual a 0,88, portanto conclui-se que não houve evidências estatísticas, ao nível de significância de 5%, que as quantidades de ferro absorvido são diferentes nesses dois grupos, ou seja, após a segunda interação todas as crianças pertencem a um único grupo classificado como baixa biodisponibilidade.

Logo, a inserção de um copo de leite (100ml) no almoço fez todos os pacientes serem classificados como baixa biodisponibilidade.

Tabela 15 – Análise de sensibilidade na interação ferro e cálcio no almoço (continua).

Paciente	Primeira Iteração			Segunda Iteração		
	Cálcio (Z)	Biodispo- nibilidade	Pertinência	Cálcio (Z)	Biodispo- nibilidade	Pertinência
1	-0,41	Média	0,81	0,03	Baixa	-
2	1,37	Baixa	0,57	1,37	Baixa	-
3	-0,58	Baixa	0,70	-0,58	Baixa	-
5	2,12	Alta	0,52	2,56	Baixa	-
6	-0,11	Média	0,71	0,33	Baixa	-
7	-0,20	Média	0,77	0,24	Baixa	-
8	-0,19	Média	0,98	0,25	Baixa	-
9	-0,29	Média	0,91	0,15	Baixa	-
10	-0,66	Média	0,63	-0,22	Baixa	-
11	-0,16	Média	0,96	0,28	Baixa	-
12	-0,26	Média	0,54	0,18	Baixa	-
13	-0,29	Média	0,80	0,15	Baixa	-
14	-0,45	Média	0,85	-0,01	Baixa	-

Tabela 15 – Análise de sensibilidade na interação ferro e cálcio no almoço (conclusão).

Paciente	Primeira Iteração			Segunda Iteração		
	Cálcio (Z)	Biodispo- nibilidade	Pertinência	Cálcio (Z)	Biodispo- nibilidade	Pertinência
15	1,33	Baixa	0,51	1,33	Baixa	-
16	-0,29	Média	0,89	0,15	Baixa	-
17	-0,32	Média	0,95	0,12	Baixa	-
18	-0,08	Média	0,90	0,36	Baixa	-
19	1,46	Baixa	0,96	1,46	Baixa	-
20	1,36	Baixa	0,81	1,36	Baixa	-
21	-0,09	Média	0,68	0,35	Baixa	-
22	-0,26	Média	0,88	0,18	Baixa	-
23	1,49	Baixa	0,52	1,49	Baixa	-
24	0,03	Média	0,53	0,47	Baixa	-
25	1,82	Alta	0,48	2,26	Baixa	-
26	-0,28	Média	0,71	0,16	Baixa	-
27	-0,12	Média	0,71	0,32	Baixa	-
28	-0,35	Média	0,52	0,09	Baixa	-
29	1,85	Baixa	0,69	1,85	Baixa	-
30	-0,15	Média	0,77	0,29	Baixa	-
31	-0,29	Média	0,90	0,15	Baixa	-
32	1,52	Baixa	0,94	1,52	Baixa	-
33	1,49	Baixa	0,97	1,49	Baixa	-
34	1,88	Baixa	0,42	1,88	Baixa	-

8.2.2 Jantar

Na Tabela 16 pode-se observar o efeito que o acréscimo da quantidade de cálcio pode interferir na biodisponibilidade do ferro no almoço e foi necessária a realização de duas iterações: Na primeira, foi adicionado 52,5mg de cálcio nesta refeição para crianças classificadas como média e alta biodisponibilidade na análise gerada pelo FCM com os dados originais da interação ferro e cálcio. Após o acréscimo, foi realizada uma nova rotina do FCM que discriminou três novos grupos, porém os resultados do teste estatístico de Kruskal-Wallis mostraram haver evidências estatísticas de diferenças para as quantidades de ferro absorvido entre os três grupos com estatística teste igual a 10,27 e p-valor igual a 0,006, ao nível de significância de 5%.

Na segunda iteração foi adicionado 52,5mg de cálcio nas refeições das crianças classificadas como média e alta biodisponibilidade e realizou-se uma nova rotina no FCM

com três grupos. Ao final da rotina, verificou-se que as crianças mantiveram suas classificações, segundo a metodologia desse trabalho, é um critério de parada do algoritmo.

Logo, a inserção de meio copo de leite (50ml) no jantar fez com que 7 crianças migrassem do grupo de alta para média biodisponibilidade e nove pacientes, do grupo de média para baixa biodisponibilidade.

Tabela 16 – Análise de sensibilidade na interação ferro e cálcio no jantar.

Paciente	Primeira Iteração			Segunda Iteração		
	Cálcio (Z)	Biodisponibilidade	Pertinência	Cálcio (Z)	Biodisponibilidade	Pertinência
1	0,71	Média	0,58	1,44	Média	0,58
2	-0,43	Baixa	0,91	-0,43	Baixa	0,91
4	-0,23	Baixa	0,97	-0,23	Baixa	0,96
5	0,47	Baixa	0,73	0,47	Baixa	0,67
6	1,75	Baixa	0,49	1,75	Baixa	0,60
7	1,05	Baixa	0,69	1,05	Baixa	0,69
8	0,26	Média	0,58	0,99	Média	0,60
9	1,88	Baixa	0,54	1,88	Baixa	0,60
10	-0,39	Baixa	0,93	-0,39	Baixa	0,93
11	0,67	Média	0,82	0,67	Média	0,84
12	1,61	Baixa	0,63	1,61	Baixa	0,60
13	1,21	Baixa	0,78	1,21	Baixa	0,76
14	1,03	Baixa	0,85	1,03	Baixa	0,82
15	-0,11	Média	0,40	-0,11	Média	0,43
16	-0,33	Baixa	0,98	-0,33	Baixa	0,98
18	0,91	Baixa	0,76	0,91	Baixa	0,89
19	0,39	Alta	0,88	1,12	Alta	0,91
20	0,86	Média	0,91	0,86	Média	0,89
22	-0,48	Baixa	0,85	-0,48	Baixa	0,85
23	0,60	Baixa	0,46	0,60	Baixa	0,45
24	0,33	Baixa	0,84	0,33	Baixa	0,68
25	1,27	Baixa	0,58	1,27	Baixa	0,76
26	0,09	Alta	0,73	0,09	Alta	0,58
27	-0,43	Baixa	0,73	-0,43	Baixa	0,74
28	0,40	Média	0,44	0,40	Média	0,45
29	-0,47	Baixa	0,49	-0,47	Baixa	0,50
30	-0,47	Baixa	0,85	-0,47	Baixa	0,85
31	0,23	Alta	0,56	0,23	Alta	0,47
32	1,40	Baixa	0,58	1,40	Baixa	0,52
33	0,58	Média	0,81	0,58	Média	0,82
34	0,27	Média	0,59	0,27	Média	0,61

9 CONCLUSÃO

Pode-se concluir dos resultados obtidos que apesar da amostra de crianças possuírem consumo alimentar heterogêneo (coeficientes de variação elevados), foi considerado apenas uma criança no almoço e três crianças no jantar como *outliers* (distância de Mahalanobis maior que quatro), evidenciando a orientação para a alimentação saudável.

A análise de componentes principais mostrou que no almoço as substâncias alimentares que explicavam melhor a variabilidade do modelo foram ferro heme (carnes), ferro não-heme (verduras verde escuro), vitamina C (frutas e verduras cruas), fitato (grãos integrais) e oxalato (hortaliças) que são alimentos comumente consumidos no almoço. No jantar o nutriente cálcio se mostrou mais eficaz na determinação da variabilidade do modelo em relação ao oxalato, este fato pode ser explicado, pois no jantar foi considerado também o consumo dos nutrientes na ceia onde a ingestão de leite e derivados é elevada.

O algoritmo FCM é uma ferramenta útil na discriminação de classes de um sistema de biodisponibilidade do ferro, uma vez que:

- Foi capaz de lidar com a superposição de classes, áreas de inerente incerteza, com adoção de graus de afirmação (pertinências) para cada elemento desta classe;
- Permitiu avaliar os centros das classes (*clusters*) utilizando uma média ponderada cujos pesos são os graus de afirmação determinados pela Teoria da Lógica *Fuzzy*;
- Converge para um ótimo global;
- Trabalha de forma adequada com conjuntos que apresentam expressiva variabilidade, peculiar a avaliação dietética;
- Foi um método compatível com a análise exploratória de dados em problemas de classificação, quando se adota variável linguística.

Para o almoço, na aplicação do FCM na interação entre o ferro não-heme e a vitamina C, notou-se que as quantidades de ingestão de vitamina C foram determinantes na classificação dos grupos, na interação ferro não-heme, vitamina C e oxalato as quantidades de ingestão de vitamina C continuaram sendo importantes, porém sofreram a influência da ingestão de oxalato. Ao realizar o FCM na interação ferro não-heme, vitamina C e fitato, observou-se que a ingestão de fitato foi a principal variante na determinação dos grupos que também sofreram a influência do consumo de vitamina C e ferro não-heme.

No jantar a classificação de grupos quanto à biodisponibilidade do ferro através do FCM foi determinada pela quantidade de ferro heme na interação entre este e o cálcio. Na

interação ferro não-heme e vitamina C, o FCM sofreu principal influência na determinação dos grupos nas quantidades de ingestão de ferro não-heme visto o baixo consumo de vitamina C no jantar. Quando acrescentada quantidades ingeridas de fitato na interação ferro não-heme e vitamina C, verificou-se que o ferro não-heme continuou sendo determinante na classificação dos grupos, porém com uma influência maior do fitato. Na classificação envolvendo ferro não-heme, vitamina C e cálcio, os 3 nutrientes se mostraram importantes, pois não houve uma discriminação evidente de nenhum nutriente.

Na análise de sensibilidade realizada no almoço, foi necessário apenas duas iterações para determinar a interferência total do cálcio na biodisponibilidade do ferro, ou seja, o incremento na dieta das crianças de um copo de leite foi suficiente para classificá-los como baixa biodisponibilidade.

No jantar, a análise de sensibilidade não pode ser concluída, pois a partir da segunda iteração não houve interferência na classificação com os incrementos de cálcio depois de duas rotinas, o que motivou a parada da análise de sensibilidade visto que com mais incrementos os valores nutricionais seriam incompatíveis com a faixa etária.

No que se refere ao campo da Nutrição,

- Permite aos profissionais desta área um livre arbítrio na determinação do número de classes;
- A interação entre os nutrientes possibilita o reconhecimento dos padrões de biodisponibilidade do ferro nas refeições e de risco à anemia ferropriva;
- O método FCM mostrou-se sensível à migração entre classes, não se opondo aos pressupostos do sistema de biodisponibilidade do ferro.

Os resultados obtidos nesta pesquisa despertaram uma série de questões e propostas que podem ser objetos de estudos futuros. Entre elas, podem-se destacar:

- Utilizar modelos de reconhecimento de padrão híbridos, como sugestão modelos baseados em redes neuro-*fuzzy* na análise da biodisponibilidade do ferro;
- Utilizar técnicas de otimização heurística (*simulated annealing* e algoritmos genéticos) na busca de quantidade limítrofes de cálcio e outros componentes dietéticos que inibem a absorção do ferro na análise de sensibilidade;
- Desenvolver um software de fácil manuseio por profissionais da área de saúde, em especial nutricionistas, para apoiar no reconhecimento de padrões quanto a biodisponibilidade do ferro na refeição e na estratégia a ser tomada.

REFERÊNCIAS

Albuquerque NR, Farias, DAA. Identificação de curvas de carga diária típicas com uso de Mapa de Kohonen e Fuzzy C-Means. RICA - Revista de Inteligência Computacional Aplicada da PUC-Rio. Rio de Janeiro, 2008.

Amaral JLM, Pacheco MAC. Clusterização através de Redes Neurais com Aprendizado Não Supervisionado com Ajuste dos Parâmetros de Treinamento utilizando Algoritmos Genéticos. RICA - Revista de Inteligência Computacional Aplicada da PUC-Rio. Rio de Janeiro, 2010.

American Academy of Pediatrics. Dietary recommendations for children and adolescents: a guide for practioners. Pediatrics. 2006; 117-544.

American Dietetic Association. Position of the American Dietetic Association: dietary guidance for healthy children ages 2 to 11 years. Journal of the American Dietetic Association.2004;104-660.

ANVISA - Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Brasília. [acesso em: 03 de agosto 2007]. Disponível em: <http://www.anvisa.gov.br/divulgacao/noticias/030801.html>.

Aranha, FQ. O papel da vitamina C sobre as alterações orgânicas no idoso. Revista de Nutrição. Campinas, 2000; 13 (2): 89-97.

Baraldi A, Blonda P. A survey of fuzzy clustering algorithms for pattern recognition”, International Computer Science Institute. California, 1998; TR-98-038.

Barreto ICAS, Lanzillotti HS, Portella ES, Soares EA, Barros ME. Estudo comparativo entre os valores de oxalato, fitato, tanino e cafeína, em tabelas de composição química dos alimentos. Revista Higiene Alimentar. São Paulo, 2006; 20 (140): 30-7

Barros LC, Bassanezi R. Tópicos de Lógica Fuzzy e Biomatemática. Campinas: Editora do IMECC-UNICAMP; 2006.

Benito P, Miller D. Iron absorption and bioavailability: an uptake review. Nutrition Research, 1998; 18 (3): 581-603.

Bezdek CJ, Pal SK. “Fuzzy Models for Pattern Recognition”, New York: IEEE Press; 1992.

Bezdek JC. Pattern Recognition with Fuzzy Objective Function. Plenum Press; 1998.

Bothwell TH, Baynes RD, Macfarlane, BJ. Nutritional iron requirements and food iron absorption. Journal of International Medicine. 1989; 226: 357-365.

Braga MJF, Barreto MJ, Machado MAS. Conceitos da Matemática Nebulosa na Análise de Risco. Rio de Janeiro: Artes & Rabiskus; 1995: 05-30.

Carpenter CE, Mahoney AW. Contributions of heme and nonheme iron to human nutrition. Critical Review of Food Science and Nutrition, 1992; 31 (4): 333-367.

Cattell RB, Jaspers J. A general plasmode (No. 30-10-5-2) for factor analytic exercises and research. *Mult. Behav. Res. Monogr.* 1967; 67: 1-212.

Cattell RB. The screen test for the number of factors. *Multivariate Behavioral Research*, 1966; 1: 140-161.

Chuang M, Freitas O. Compostos alternativos para o tratamento e/ou prevenção da anemia ferropriva. *Cadernos de Nutrição*, 1994;8: 1-9.

Clydesdale FM. Minerals: their chemistry and fate in food, 1998. In: Dekker M. Trace minerals in food, New York: K.T.Smith Ed., 1998; 57-94.

Cole RM. Clustering with genetic algorithms [dissertação de mestrado]. University of Western, Austrália, 1998.

Conrad ME, Umbreit JN, Moore EG. A role for mucin in the absorption of inorganic iron and other metal cations. *Gastroenterology*. 1991; 100: 129-136.

Cozzolino SMF. Biodisponibilidade de Minerais. *Revista de Nutrição*, Campinas, 1997; 10(2): 87-98.

Cozzolino SMF. Biodisponibilidade de nutrientes. Barueri: Manole; 2005. 878p.

Crompton DW, Whitehead RR. Hookworm infections and human iron metabolism. *Parasitology*. 1993; 107 Suppl: S137-45.

Dallman PR, Siimes MA, Stekel A. Iron deficiency in infancy and childhood. *Am J Clin Nutr.* 1980; 33:86-118.

De Angelis RC, Ctenas ML. Biodisponibilidade de ferro na alimentação infantil. *Temas de Pediatria*, Nestlé Serviço de Informação Científica. 1993;52.

De Vizia B, Poggi V, Vajro P. Iron malabsorption in giardiasis. *The Journal of Pediatrics*. 1995; 107(1): 75-78.

Delgado MRBS. Projeto Automático de Sistemas Nebulosos: Uma Abordagem Co-Evolutiva. [tese de doutorado]. Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, 2002.

Demayer EM, Dallman P, Gurney JM, Hallberg L, Sood SK, Srikantia SG. Preventing and controlling iron deficiency anemia through primary health care. World Health Organization, Geneva, 1989.

Institute of Medicine; National Academy of Sciences. Dietary reference intakes for vitamin A, vitamin K, arsenic, boron, chromium, copper, iodine, iron, manganese, molybdenum, nickel, silicon, vanadium, and zinc. Washington, D.C. National Academy Press. 2002; 65-126.

Disler PB, Lynch SR, Charlatan RW. The effect of tea on iron absorption. *Gut British Society of Gastroenterology*. 1975; 16: 193-200.

Domingues HH. Espaços métricos e introdução à topologia. São Paulo: Ed. Atual; 1982: p.184.

Duda RO, Hart PE. Pattern classification and scene analysis. New York: Wiley Ed.; 1973: p.482.

Dunn JC. A Fuzzy Relative of the ISODATA Process and Its Use in Detecting Compact Well-Separated Clusters. *Journal of Cybernetics*. 1973; 3: 32-57.

Institute of Medicine; National Academy of Sciences. Dietary references Intakes for vitamin A, vitamin K, arsenic, boron, chromium, copper, iodine, iron, manganese, molybdenum, nickel, silicon, vanadium and zinc. Washington, D.C. (USA): National Academy Press. 2001.

Fairbanks VF. Iron in medicine and nutrition. In: Shils ME, Olson JA, Shike M. *Modern nutrition in health and disease*. Philadelphia: Lea and Febiger. 1994; p. 185-213.

Fairweather-Tait SJ. Bioavailability of trace elements. *Food Chemistry*. 1992; 43: 213-217.

Fairweather-Tait SJ. Bioavailability of nutrients. In: Macrae R, Robinson RK, Sadler MJ. *Encyclopedia of food science food technology and nutrition*. London: Academic Press. 1993; p. 384-388.

Fairweather-Tait SJ, Fox TE, Wharf SG. The bioavailability of iron in different weaning foods and the enhancing effects of a fruit drink containing ascorbic acid. *Pediatric Research*. 1995; 37(4): 389-394.

Fantini AP, Canniatti-Brazaca SG, Souza MC, Mansi DNC. Disponibilidade de ferro em misturas de alimentos com adição de alimentos com alto teor de vitamina C e de cisteína. *Ciência e Tecnologia de Alimentos*. 2008; 28(2): 435-439.

FAO/WHO Requirements of Vitamin A, Iron, Folate and Vitamin B12. Rome: Food and Nutrition Series. 1988; 23.

Fontana A, Naldi MC. Estudo de Comparação de Métodos para Estimação de Números de Grupos em Problemas de Agrupamento de Dados. Universidade de São Paulo. 2009 ISSN - 0103-2569.

Franco CR. A Validity Measure for Hard and Fuzzy Clustering derived from Fisher's Linear Discriminant. *IEEE International Conference on Fuzzy Systems. World Congress on Computational Intelligence (WCCI)*. Honolulu, Havaí; 2002

Garcia MT, Granado FS, Cardoso MA. Alimentação complementar e estado nutricional de crianças menores de dois anos atendidas no Programa Saúde da Família em Acrelândia, Acre, Amazônia Ocidental Brasileira. *Cad. Saúde Pública*, Rio de Janeiro. 2011; 27(2):305-316.

Garcia-Casal, MN, Layrisse M. Absorción de hierro de los alimentos. Papel de la vitamina A. *Arch Latinoam Nutr*. 1998; 48:191-6.

Gath I, Geva AB. Unsupervised optimal fuzzy clustering. *IEEE Transactions Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 1989; 11(7):773-781.

- Geva AB. Hierarchical-fuzzy clustering of temporal-patterns and its application for time-series prediction. *Pattern Recognition Letters*.1999; 20: 1519-1532.
- Gleerup A, Rossander-Hultén L, Gramatkovski E. Iron absorption from the whole diet: Comparison of effect of two different distributions of daily calcium intake. *American Journal of Clinical Nutrition*. 1995; 61(3): 97-104.
- Guyton AC. *Fisiologia humana e mecanismos das doenças*. 4^a ed. Rio de Janeiro: Guanabara; 1989.
- Hallberg L. Bioavailability of dietary iron in man. *Annual Review of Nutrition*. 1981; 1: 123-147.
- Hallberg L. Advantages and disadvantages of an iron-rich diet. *European Journal of Clinical Nutrition*. 2002; 56 Suppl 1: S12–18.
- Hallberg L, Brune M, Rossander L. Effect of ascorbic acid on iron absorption from different types of meals. Studies with ascorbic acid rich foods and synthetic ascorbic acid given in different amounts with different meals. *Human Nutrition Applied Nutrition* 1986; 40(1): 97-113.
- Hallberg L, Hulthén L. Prediction of Dietary Iron Absorption: An Algorithm for Calculating Absorption and Bioavailability of Dietary Iron. *American Journal of Clinical Nutrition*. 2000; 71: 1147-60.
- Hallberg L, Rossander-Hulthén L, Brune M. Calcium and iron absorption: mechanism of action and nutritional importance. *European Journal of Clinical Nutrition*. 1992; 46: 317-327.
- Han J, Kamber M. *Data mining: concepts and techniques*. Morgan Kaufmanns Publishers. San Francisco, USA. 2001; p.550.
- Harland BF, Oberlees D. Phytate in foods. *World Rev Nutr Diet*. 1987; 52: 235–59.
- Hollander M, Wolfe DA. *Nonparametric Statistical Methods*. New York: John Wiley & Sons. 1973; p.27–33 (one-sample), p.68–75 (two-sample).
- House WA. Trace element bioavailability as exemplified by iron and zinc. *Field Crops Research*. 1999; 60: 115-141.
- House WA, Welch RM. Bioavailability to rats of iron in six varieties of wheat grain intrinsically labeled with radioiron. *Journal of Nutrition*. 1987; 117: 476-480.
- Hurrell RF, Lynch SR, Trinidad TP. Iron absorption in humans: bovine serum albumin compared with beef muscle and egg white. *American Journal of Clinical Nutrition*. 1988; 47:102-107.
- Jain A, Dubes R. *Algorithms for clustering data*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall; 1988. p.320.
- Jain AK, Murty MN, Flynn PJ. Data clustering: a review. *ACM Comput. Surv.* 1999; 31(3):264–323.

Johnson RA, Wichern DW. Applied multivariate statistical analysis. 4^a ed. New Jersey: Prentice Hall; 1998.

Kaiser H.F. The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis. *Psychometrika*. 1958; 23:187- 200.

Lampe JW. Poor iron status of women runners training for a marathon. *Int. J. Sports Med*. 1996; 7:111-114.

Larsen T. Interactions between minerals: Comparison between mineral absorption in rat and pig. In: Jungvid H, Forshell LP, Eggum BO. The rat as a model for man and pig in nutritional and physiological studies. Tjele: National Institute of Animal Science. 1992; p.137-142.

Machado FMVF, Canniatti-Brazaca SG, Piedade SMS. (2006): Avaliação da Disponibilidade de Ferro em Ovo, Cenoura e Couve em suas Misturas, *Ciênc. Tecnol. Aliment.*, Campinas, 26(3): 610-618, jul.-set.

Mahalanobis PC. On the generalised distance in statistics. *Proceedings of the National Institute of Sciences of India*. 1936;2(1):49-55.

Malhotra NK. Pesquisa de Marketing. Uma Orientação Aplicada. 4^aed. Porto Alegre: Bookman; 2006.

Mandami EH, Assilian S. An experiment in linguistic synthesis with a fuzzy logic controller. *International Journal of Man-Machine Studies*. 1975; 7(1):1-13.

Marchioni DML, Slater D, Fisberg RM. Aplicação das Dietary Reference Intakes na avaliação da ingestão de nutrientes para indivíduos. *Revista de Nutrição*. 2004;17(2):207-216.

Marques JM. Apostila de análise multivariada aplicada à pesquisa [dissertação]. Curitiba(PR): Universidade Federal do Paraná; 2003.

Marques MAM. Aplicação da Análise multivariada no estudo da infra-estrutura dos serviços de saúde dos municípios paranaenses [dissertação]. Curitiba(PR): Universidade Federal do Paraná; 2006.

Martínez C, Ros G, Periago MJ. Biodisponibilidad del hierro de los alimentos. *Archivos Latinos Americanos de Nutrición*. 1999; 49(2):106-113.

Martins IS, Alvarenga AT, Siqueira AA, Szarfarc SC, Lima FD. As determinações biológica e social da doença: um estudo de anemia ferropriva. *Rev Saude Publica*. 1987; 21:73-89.

Migita S. The effects of food ingredients on nonheme iron absorption in rats and inhibitory mechanism of soy protein isolate. *Journal of Nippon Medical School*. 1988; 55: 555-563.

Mingoti SA. Análise de dados através de métodos de estatística multivariada: uma abordagem aplicada. Belo Horizonte: Editora UFMG; 2005.

Ministério da Saúde. Programa Nacional de Suplementação de Ferro; 2004. Disponível em: <http://dtr2004.saude.gov.br/nutricao/ferro.php>

Monsen ER, Balifty JL. Calculating dietary iron bioavailability: refinement and computerization. *Journal of The American Dietetic Association*. 1982; 80(4):307-311.

Monsen ER, Hallberg L, Layrisse M, Hegsted DM, Cook JD, Mertz W, Finch CA. Estimation of available dietary iron. *American Journal of Clinical Nutrition*. Bethesda.1978; (31):134-141.

Morrison DF. *Multivariate statistical methods*. New York: McGraw-Hill Book Co. 1976; p.415.

Moura NC, Canniatti-Brazaca SG. Avaliação da Disponibilidade de Ferro de Feijão Comum (*Phaseolus vulgaris* L.) em Comparação com Carne Bovina, *Ciênc. Tecnol. Aliment*. 2006;26(2):270-276.

Nielsen FH. Other elements: Sb, Ba, B, Br, Cs, Ge, Rb, Ag, Sr, Sn, Ti, Zr, Be, Bi, Ga, Au, In, Nb, Sc, Te, Tl, W. In: Mertz W. *Trace elements in human and animal nutrition*. 5ª Ed. New York: Academic Press. 1987; 2:415-488.

Núcleo de Estudos e Pesquisas em Alimentação – NEPA: Tabela Brasileira de Composição de Alimentos. 4ª Ed. Campinas: UNICAMP. 2011; p.161.

Oliveira MG, Oliveira E, Marchesi MZ. Um QASystem para Interação de Alunos em Avaliações Somativas a Distância. In *Anais do Simpósio Brasileiro de Informática na Educação*; Florianópolis: SBC; 2009.

Paiva AA, Rondó PH, Guerra-Shinohara EM. Parâmetros para avaliação do estado nutricional de ferro. *Rev Saude Publica*. 2000; 34:421-6.

Pereira AS. *Efetividade de Ações de Intervenção Nutricional em Creche Pública [dissertação]*. Rio de Janeiro(RJ): Universidade do Estado do Rio de Janeiro; 2009.

Peters TJ, Raja KB, Simpson RJ. Speciation of trace metals, with special reference to intestinal iron absorption. *Food Chemistry*. 1992; 43:315-320.

Philippi ST. (2012): *Tabela de Composição de Alimentos: Suporte para Decisão Nutricional*. 3ª Ed. São Paulo:Editora Manole. p.174.

Pimentel EP, França VF, Omar N. A identificação de grupos de aprendizes no ensino presencial utilizando técnicas de clusterização. In *Anais do Simpósio Brasileiro de Informática na Educação*, Rio de Janeiro: SBC;2003.

Price ML, Hagerman AE, Butler LG. Tannin content of cowpeas, chickpeas, pigeon peas, and human mung beans. *Journal of Agriculture Food Chemistry*. 1980;28(2):459-461.

Raja KB, Simpson RJ, Peters TJ. Membrane potential dependence of Fe (III) uptake by mouse duodenum. *Biochemical Biophysical Acta*. 1989; 984:262-266.

Raja KB, Simpson RJ, Peters TJ. (1991): Ferric iron reduction and uptake by mouse duodenal mucosa. *Biochemical Society Transactions* 1991; 19(3):316S.

Reddy MB, Hurrell RF, Juillerat MA. The influence of different protein sources on phytate inhibition of nonheme iron absorption in humans. *American Journal of Clinical Nutrition*. 1996; 63:203-207.

Santos TM. *Manual de Filosofia - Introdução à Filosofia Geral - História da Filosofia - Dicionário de Filosofia*. 10ªEd. São Paulo: Nacional; 1958.

Simpson RJ, Venkatesan S, Peters TJ. Brush border membrane non esterified fatty acids, physiological levels and significance for mucosal iron uptake in mouse proximal intestine. *Cell Biochemistry and Function*. 1989; 7(3):165-172.

Southon S, Fairweather-Tait J, Hazell T. Trace element availability from human diet. *Proceeding of the Nutrition Society*. 1988; 47(1):27-35.

Schricker BR, Miller DD, Van Campen D. (1982): In vitro estimation of iron availability in meals containing soy products. *Journal of Nutrition*. 1982;112(9):1696-1705.

Steinbach M, Karypis G, Kumar V. A comparison of document clustering techniques. *KDD workshop on text mining*; 2000.

Szarfarc SC, Souza SB Prevalence and risk factors in iron deficiency and anemia. *Arch Latinoam Nutr*.1997; 47(2 Suppl 1):S35-8.

Torre M, Rodriguez AR, Saura-Calixto F. Effects of dietary fiber and phytic acid on mineral availability. *Critical Reviews Food Science and Nutrition* 1991; 30(1):1-22.

UNICEF/UNU/WHO/MI. Preventing iron deficiency in women and children: technical consensus on key issues. *Technical Workshop*. New York; 1998.

Van Dokkum W. Significance of iron bioavailability for iron recommendation. *Biological Trace Element Research*.1992;35:1-11.

Vieira S. *Bioestatística - Tópicos Avançados*. 2ªEd. Rio de Janeiro: Campus Elsevier;2004.

Von Zuben F. (2002): “Notas de aula – IA353”, tópico: 9; 2002. Disponível em: <http://www.dca.fee.unicamp.br/~vonzuben/courses/ia353.html>.

Welch RM, House WA, Allaway WH. (1973): Effects of oxalic acid on availability of zinc from spinach leaves and zinc sulfate to rats. *Journal of Nutrition*. 1973;104:733-740.

Wise A. (1995): Phytate and zinc bioavailability. *Journal of Food Science and Nutrition*. 1995;46(1):53-63.

World Health Organization. *Diet, nutrition and the prevention of chronic diseases*. Technical Report Series, 797. Geneva: WHO; 1990.

Zadeh LA. Fuzzy Sets. *Information and Control*. 1965; 8:338 – 353.

Zadeh LA. Fuzzy sets as a basis for a theory of possibility. *Fuzzy Sets and Systems*. 1975; 1:3–28.

Zadeh LA. Toward a theory of fuzzy information granulation and its centrality in human reasoning and fuzzy logic. *Fuzzy Sets and Systems*. 1997;90(2): 111-127.

Zahid N, Abouelala O, Limouri M, Essaid A. Unsupervised fuzzy clustering. *Pattern Recognition Letters*. 1999; 20(2): 123-129.

Zimmermann HJ. *Fuzzy Set Theory and Its Applications*. Ed.2^a. Massachusetts: Kluwer Academic Publishers; 1990.

APÊNDICE – Algoritmo em Linguagem R utilizado no estudo.

```
# UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
# CCOMP PROGRAMA DE POS GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA COMPUTACIONAIS
# RECONHECIMENTO DE PADRÃO NA BIODISPONIBILIDADE DO FERRO
# AUTOR: MÁRCIO COUTINHO BRANDÃO CORTES FILHO

# LEITURA DO BANCO DE DADOS ORIGINAL PADRONIZADO

library(class)

library(e1071)

refeicao1<-read.table("tabela1.txt",header=T,sep";",dec",")

attach(refeicao1)

# BANCO DE DADOS ORIGINAL PADRONIZADO

refeicao1

# CALCULANDO A DISTÂNCIA DE MAHALANOBIS

# BUSCA DE OUTLIERS

refeicaoMahalanobis<-cbind(vita,vitc,ferro,calcio,oxalato,fitato,tanino)

dist_mahalanobis<-
sqrt(mahalanobis(refeicaoMahalanobis,colMeans(refeicaoMahalanobis),cov(refeicaoMahalanobis)))

dist_mahalanobis2<-dist_mahalanobis<4

refeicao_DM<-refeicao1[dist_mahalanobis2,]

attach(refeicao_DM)

refeicao_DM
```

```
# LEITURA DO BANCO DE DADOS SEM OUTLIERS
```

```
refeicao2<-read.table("tabela2.txt",header=T,sep";","dec",")
```

```
attach(refeicao2)
```

```
# BANCO DE DADOS SEM OUTLIERS
```

```
refeicao2
```

```
# RETIRANDO FERRO HEME E FERRO NÃO-HEME DO BANCO
```

```
refeicao2<-data.frame(cbind(vita,vitc,ferro,calcio,oxalato,fitato,tanino))
```

```
refeicao2
```

```
# ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS
```

```
mcov<-
```

```
c(cov(vita,vita),cov(vita,vitc),cov(vita,ferro),cov(vita,calcio),cov(vita,oxalato),cov(vita,fitato),cov(vita,tanino),
```

```
cov(vitc,vita),cov(vitc,vitc),cov(vitc,ferro),cov(vitc,calcio),cov(vitc,oxalato),cov(vitc,fitato),cov(vitc,tanino),
```

```
cov(ferro,vita),cov(ferro,vitc),cov(ferro,ferro),cov(ferro,calcio),cov(ferro,oxalato),cov(ferro,fitato),cov(ferro,tanino),
```

```
cov(calcio,vita),cov(calcio,vitc),cov(calcio,ferro),cov(calcio,calcio),cov(calcio,oxalato),cov(calcio,fitato),cov(calcio,tanino),
```

```
cov(oxalato,vita),cov(oxalato,vitc),cov(oxalato,ferro),cov(oxalato,calcio),cov(oxalato,oxalato),cov(oxalato,fitato),cov(oxalato,tanino),
```

```
cov(fitato,vita),cov(fitato,vitc),cov(fitato,ferro),cov(fitato,calcio),cov(fitato,oxalato),cov(fitato,fitato),cov(fitato,tanino),
```

```
cov(tanino,vita),cov(tanino,vitc),cov(tanino,ferro),cov(tanino,calcio),cov(tanino,oxalato),cov(tanino,fitato),cov(tanino,tanino))
```

```
mcov
```

```
mcov1<-matrix(mcov,ncol7,nrow7,byrowT)
```

```
mcov1
```

```
auto<-eigen(mcov1)
```

```
auto
```

```
mcor<-matrix(rep(0,14),ncol7,nrow7)
```

```
for(i in 1:7)
```

```
for(j in 1:7){
```

```
mcor[i,j]<-(mcov1[i,j]/(sqrt(mcov1[i,i])*sqrt(mcov1[j,j])))}
```

```
for(i in 1:7){
```

```
mcor[i,i]<- 1 }
```

```
mcor
```

```
refeicao2<-as.matrix(refeicao2)
```

```
# MATRIZ DE COMPONENTES
```

```
componente<-matrix(0,ncol2, nrow33)
```

```
for(i in 1:33){
```

```
componente[i,1]<-t(auto$ectors[,1])%*(refeicao2[i,])
```

```
componente[i,2]<-t(auto$ectors[,2])%*(refeicao2[i,])}
```

```
componente
```

```
# COMUNALIDADES
```

```
Hvita<-(sqrt(auto$values[1])*(auto$ectors[1,1]))^2+(sqrt(auto$values[2])*(auto$ectors[1,2]))^2
```

```
Hvitc<-(sqrt(auto$values[1])*(auto$ectors[2,1]))^2+(sqrt(auto$values[2])*(auto$ectors[2,2]))^2
```

```
Hferro<-(sqrt(auto$values[1])*(auto$ectors[3,1]))^2+(sqrt(auto$values[2])*(auto$ectors[3,2]))^2
```

```
Hcalcio<-(sqrt(auto$values[1])*(auto$ectors[4,1]))^2+(sqrt(auto$values[2])*(auto$ectors[4,2]))^2
```

```
Hoxalato<-(sqrt(auto$values[1])*(auto$ectors[5,1]))^2+(sqrt(auto$values[2])*(auto$ectors[5,2]))^2
```

```

Hfitato<-sqrt(auto$values[1]*(auto$vectors[6,1])^2+(auto$values[2]*(auto$vectors[6,2])^2
Htanino<-sqrt(auto$values[1]*(auto$vectors[7,1])^2+(auto$values[2]*(auto$vectors[7,2])^2
Hvita Hvite Hferro Hcalcio Hoxalato Hfitato Htanino

# SELECIONAR VARÁVEIS CONFORME A ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS
refeicao2<-data.frame(cbind(var1,var2,...,varN)) #Inputar apenas os nutrientes selecionados na ACP
refeicao2

# CRITÉRIO DE PARADA

.Machine$double.eps

sqrt(.Machine$double.eps)

# ANÁLISE DA MELHOR PSEUDOPARTIÇÃO

# SIMULAÇÃO PARA A SELEÇÃO DA QUANTIDADE DE CLUSTER E VALOR DE m

# ANALISAR O MENOR VALOR PARA FUNÇÃO_OBJETIVO

Funcao_Objetivo_a3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.25)

Funcao_Objetivo_b3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.5)

Funcao_Objetivo_c3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.75)

Funcao_Objetivo_d3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2)

Funcao_Objetivo_e3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.25)

Funcao_Objetivo_f3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.5)

Funcao_Objetivo_g3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.75)

Funcao_Objetivo_h3<-
cmeans(refeicao2,3,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m3)

```

```

Funcao_Objetivo_a2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.25)

Funcao_Objetivo_b2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.5)

Funcao_Objetivo_c2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m1.75)

Funcao_Objetivo_d2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2)

Funcao_Objetivo_e2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.25)

Funcao_Objetivo_f2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.5)

Funcao_Objetivo_g2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m2.75)

Funcao_Objetivo_h2<-
cmeans(refeicao2,2,iter.max100,verboseFALSE,dist"euclidean",method"cmeans",m3)

Funcao_Objetivo_Otima<-c(

Funcao_Objetivo_a3$withinerror,Funcao_Objetivo_b3$withinerror,Funcao_Objetivo_c3$withinerror,
Funcao_Objetivo_d3$withinerror,Funcao_Objetivo_e3$withinerror,Funcao_Objetivo_f3$withinerror,
Funcao_Objetivo_g3$withinerror,Funcao_Objetivo_h3$withinerror,Funcao_Objetivo_a2$withinerror,
Funcao_Objetivo_b2$withinerror,Funcao_Objetivo_c2$withinerror,Funcao_Objetivo_d2$withinerror,
Funcao_Objetivo_e2$withinerror,Funcao_Objetivo_f2$withinerror,Funcao_Objetivo_g2$withinerror,
Funcao_Objetivo_h2$withinerror)

Funcao_Objetivo_Otima

# RESULTADOS

Funcao_Objetivo_f3

# OUTPUT - MATRIZ FINAL DE PERTINÊNCIA E CLUSTERS

grupos<-Funcao_Objetivo_f3$cluster

refeicao3<-data.frame(cbind(refeicao2,grupos))

refeicao3

sink("refeicao3")

```

refeicao3

Funcao_Objetivo_f3\$membership

Funcao_Objetivo_f3\$iter

ANEXO A – Parecer COEP.

UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE NUTRIÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ALIMENTAÇÃO, NUTRIÇÃO E SAÚDE

PARECER COEP 012/2008

A Comissão de Ética em Pesquisa – COEP, em sua 2ª Reunião Ordinária realizada em 10 de Março de 2008, analisou o protocolo de pesquisa nº. **004.3.2008**, segundo as normas éticas vigentes no país para pesquisa envolvendo sujeitos humanos e emite seu parecer.

Projeto de pesquisa: Do impacto da intervenção em pré-escolares assistidos pelo Programa Nacional de Alimentação Escolar

Pesquisadoras responsáveis: Eliane Abreu Soares e Haydée Serrão Lanzillotti

Mestranda: Alessandra da Silva Pereira

Instituição responsável: Instituto de Nutrição - UERJ

Área do conhecimento: 4.00 – Ciências da Saúde – 4.05 – Nutrição – Diag.

Áreas temáticas especiais: Grupo III

Palavras-chave: pré-escolares, merenda escolar, estado nutricional, creches.

Sumário: Pesquisa desenvolvida para avaliar o impacto da intervenção nutricional em pré-escolares matriculados em uma creche assistida pelo Programa Nacional de Alimentação Escolar no Município de Paraty - RJ. Trata-se de um estudo longitudinal censitário no período de 6 meses com crianças de 2 a 4 anos, matriculadas nesta creche nos anos de 2008 e 2009. A metodologia prevê uma avaliação sócio-demográfica através de questionário dirigido aos responsáveis; duas avaliações antropométricas (na matrícula e 6 meses após); duas avaliações bioquímicas (na matrícula e 6 meses após) por hemoglobímetro portátil para detecção de anemia; avaliação do consumo alimentar através de pesagem direta dos alimentos consumidos na creche e por questionário dirigido aos responsáveis. A intervenção nutricional será realizada pela implementação de ações de educação nutricional através de jogos educativos, palestras e folder.

Objetivo: avaliar o impacto da intervenção nutricional em pré-escolares matriculados em uma creche assistida pelo Programa Nacional de Alimentação Escolar no Município de Paraty - RJ.

Considerações Finais: O estudo é pertinente, tem valor científico e prático, apresenta clareza, objetividade e concisão.

Após o atendimento à solicitação do Parecer COEP nº009/2008 e a versão dos Termos de Consentimento Livre e Esclarecidos de 09 de abril de 2008, versão2, a Comissão deliberou pela **aprovação** do projeto.

Faz-se necessário apresentar Relatório Anual - **previsto para abril de 2009**, para cumprir o disposto no item *VII. 13.d da RES. 196/96/CNS*. Além disso, a COEP deverá ser informada de fatos relevantes que alterem o curso normal do estudo, devendo o pesquisador apresentar justificativa, caso o projeto venha a ser interrompido e/ou os resultados não sejam publicados.

Situação: Projeto Aprovado

Rio de Janeiro, 15 de abril de 2008.

Prof. Dr. Olinto Pegoraro

Coordenador da Comissão de Ética em Pesquisa – UERJ

ANEXO B – Tabela com a Ingestão dos Nutrientes no Almoço.

Paciente	Vitamina A	Vitamina C	Ferro	Ferro Heme	Ferro Não-Heme	Carne	Cálcio	Oxalato	Folato	Tamino	Cafeína
1	13,47	66,06	1,57	0,42	1,15	18,63	22,71	176,21	414,13	39,12	-
2	12,39	15,53	2,39	0,59	1,79	22,94	82,49	81,72	259,28	29,71	-
3	11,28	9,26	2,83	0,66	2,17	29,33	30,11	85,06	203,60	27,34	-
4	9,69	162,09	5,43	1,53	3,89	54,67	99,60	58,24	139,00	56,95	-
5	8,11	99,63	4,66	1,22	3,43	42,33	90,74	41,08	72,94	54,28	-
6	7,99	93,29	2,98	0,74	2,24	32,60	30,93	121,70	262,73	49,33	-
7	9,48	11,03	2,01	0,54	1,47	25,70	28,40	156,53	482,01	29,47	-
8	7,48	72,96	2,58	0,71	1,86	29,48	28,83	66,01	191,65	43,19	-
9	4,19	75,17	2,63	0,75	1,88	30,02	26,18	101,15	212,70	44,50	-
10	11,21	63,33	1,13	0,33	0,80	14,53	16,09	247,76	594,22	36,46	-
11	11,37	67,11	1,83	0,39	1,43	15,93	29,52	140,62	368,38	41,66	-
12	7,57	82,73	2,26	0,60	1,67	26,08	26,91	68,77	192,63	46,71	-
13	10,43	65,11	1,52	0,41	1,11	18,00	25,93	317,25	789,27	38,47	-
14	6,30	66,91	1,82	0,52	1,30	21,56	21,82	139,61	355,43	41,18	-
15	7,70	46,95	2,28	0,47	1,81	20,33	81,27	87,82	209,73	33,36	-
16	20,70	52,36	1,67	0,45	1,22	20,43	26,00	191,43	412,12	35,64	-
17	10,39	29,87	1,81	0,44	1,37	18,88	25,24	137,88	321,35	32,16	-
18	5,63	17,41	1,76	0,38	1,38	16,20	31,82	217,04	575,70	30,43	-
19	4,10	9,41	2,96	0,80	2,16	30,05	84,89	86,70	206,83	27,79	-
20	4,18	7,77	3,33	0,81	2,52	31,03	82,20	24,08	156,67	21,12	-
21	4,27	49,48	2,05	0,47	1,58	18,91	31,53	162,21	521,48	34,46	-
22	16,85	67,70	2,51	0,71	1,80	28,47	26,80	74,64	197,65	41,91	-
23	8,93	76,81	2,22	0,55	1,67	21,72	73,88	109,04	231,33	44,53	-
24	11,84	64,92	2,14	0,39	1,75	15,85	34,77	173,11	398,89	37,07	-
25	18,24	126,06	5,14	1,26	3,88	45,60	82,57	49,98	131,28	56,57	-
26	10,57	94,43	2,97	1,07	1,91	45,10	26,24	102,61	334,51	48,47	-
27	11,89	47,09	2,37	0,68	1,69	27,34	30,68	84,72	259,97	33,83	-
28	9,94	78,87	2,25	0,64	1,61	25,73	24,46	119,39	280,74	45,83	-
29	19,61	67,73	2,52	0,62	1,90	24,25	83,53	65,16	98,91	41,98	-
30	11,47	97,63	2,40	0,60	1,80	25,97	29,89	81,96	231,94	50,77	-
31	12,09	10,74	1,91	0,48	1,44	22,70	26,09	153,01	302,99	28,51	-
32	11,77	98,97	3,16	0,82	2,33	37,00	74,59	21,71	170,42	53,57	-
33	11,86	86,18	2,97	0,74	2,23	32,50	73,84	101,64	315,55	47,14	-
34	8,17	62,71	1,69	0,33	1,36	15,70	96,06	196,68	478,04	36,31	-
Média	10,33	63,10	2,52	0,65	1,87	26,63	47,25	118,90	305,12	40,00	-
Desvio-Padrão	4,12	35,61	0,96	0,28	0,70	9,54	27,99	65,12	158,17	9,14	-
Coef. Variação	40%	56%	38%	42%	37%	36%	59%	55%	52%	23%	-

Fonte: PEREIRA AS, 2009.

ANEXO C – Tabela com a Ingestão dos Nutrientes no Jantar.

Paciente	Vitamina A	Vitamina C	Ferro	Ferro Heme	Ferro Não-Heme	Carne	Cálcio	Oxalato	Folato	Tanino	Cafeína
1	93,75	22,23	1,70	0,10	1,60	40,00	120,14	182,87	473,34	-	-
2	73,94	21,33	0,96	0,33	0,96	80,00	19,05	163,99	404,04	-	-
3	170,56	81,27	1,82	0,33	1,50	80,00	103,84	299,70	314,10	-	7,25
4	176,78	31,30	1,22	0,18	1,04	150,00	36,73	53,81	176,38	-	-
5	163,84	38,30	4,65	1,55	3,09	56,00	164,03	170,22	451,54	-	9,67
6	46,50	19,33	3,66	0,31	3,35	35,00	277,40	186,50	451,70	104,00	-
7	91,26	22,23	1,86	0,23	1,63	35,00	215,54	42,77	169,79	-	-
8	73,94	23,23	2,36	0,91	1,45	120,00	80,56	139,19	311,79	-	-
9	111,38	34,30	4,82	0,67	4,15	56,00	288,92	121,42	276,62	-	-
10	70,59	19,98	1,02	0,23	0,79	30,00	22,53	84,95	242,89	-	-
11	73,94	80,76	2,21	0,71	1,49	97,50	117,07	72,84	239,26	112,00	-
12	178,09	24,23	2,27	0,37	2,27	60,00	265,70	16,18	182,09	-	14,50
13	191,84	25,23	2,45	0,37	2,08	60,00	229,89	188,15	290,82	-	14,50
14	150,30	19,35	2,60	0,08	2,52	22,00	213,94	155,93	403,20	-	7,25
15	129,60	34,30	2,89	0,63	2,25	61,50	47,56	182,77	451,09	-	-
16	73,94	22,33	1,25	0,09	1,16	75,00	27,85	176,49	455,45	-	-
17	91,26	23,33	2,68	0,30	2,38	75,33	240,85	86,61	220,58	-	86,00
18	191,77	31,30	3,63	0,36	3,27	73,33	202,94	128,62	332,08	-	12,08
19	122,20	78,99	3,93	0,87	3,06	135,00	92,26	196,92	451,78	-	-
20	101,38	21,33	2,59	0,18	2,41	150,00	134,28	129,28	337,84	-	25,12
21	181,89	77,29	11,23	2,16	9,07	200,00	232,30	385,44	783,91	-	98,67
22	73,94	17,00	0,80	0,22	0,58	21,50	14,72	17,37	169,14	-	-
23	74,60	23,12	1,32	0,23	1,09	30,00	110,74	39,18	180,90	-	-
24	156,50	23,12	4,06	0,46	3,61	60,00	151,37	201,51	483,78	-	9,67
25	181,65	23,12	3,60	0,93	2,67	80,00	234,86	150,39	313,28	-	14,50
26	91,26	23,12	3,92	1,17	2,75	115,00	65,34	132,19	281,16	-	-
27	91,26	76,88	1,72	0,49	1,22	65,00	19,37	108,88	312,28	-	-
28	73,94	39,30	1,67	0,52	1,15	45,00	93,01	17,37	179,18	-	-
29	100,37	23,12	2,23	0,99	1,24	130,00	15,51	126,44	309,37	-	-
30	73,94	23,12	0,81	0,12	0,69	57,50	16,14	118,28	313,01	-	-
31	173,82	21,33	3,32	0,64	2,67	95,00	78,03	107,05	366,03	-	-
32	173,37	21,00	2,92	0,16	2,76	15,00	246,70	117,43	321,88	-	21,98
33	70,59	21,33	2,46	0,19	2,27	37,00	108,79	178,96	451,79	-	5,80
34	164,01	77,29	2,41	0,79	1,62	125,00	81,62	92,53	284,00	-	-
Média	119,35	34,26	2,74	0,54	2,23	75,86	128,52	134,48	334,88	108,00	25,15
Desvio-Padrão	46,39	21,56	1,86	0,47	1,52	44,87	89,04	76,58	126,96	5,66	30,45
Coef. Variação	39%	63%	68%	87%	68%	59%	69%	57%	38%	5%	121%

Fonte: PEREIRA AS, 2009.